

N° d'ordre NNT : 2024EMSEM049

THÈSE DE DOCTORAT
de l'**Institut Mines-Télécom**
École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne

opérée au sein de
École des Mines de Saint-Étienne

École Doctorale N° 488
(Sciences, Ingénierie, Santé)

Spécialité de doctorat : Sciences des Images et des Formes
Discipline : Mathématiques Appliquées

Soutenue publiquement le 25/11/2024, par :
Léo Théodon

Caractérisation morphométrique d'agrégats de particules par analyse d'image et géométrie stochastique

Devant un jury composé de :

Bierme, Hermine	Professeur	Université de Tours	Rapporteur
Moreaud, Maxime	Chercheur Senior HdR	IFPEN Solaize	Rapporteur
Daoudi, Mohamed	Professeur	IMT Nord Europe	Examinateur
Estrade, Anne	Professeur	Université Paris Cité	Examinaterice
Figliuzzi, Bruno	Maître Assistant HdR	Mines ParisTech	Examinateur
Yon, Jérôme	Professeur	INSA Rouen Normandie	Examinateur
Coufort – Saudejaud, Carole	Maître de conférences	Université de Toulouse	Co-encadrante de thèse
Debayle, Johan	Directeur de Recherche	Mines Saint-Étienne	Directeur de thèse
Frances, Christine	Directeur de Recherche CNRS	Université de Toulouse	Invitée
Gavet, Yann	Professeur	Mines Saint-Étienne	Invité

Affidavit

Je soussigné, Léo Théodon, déclare par la présente que le travail présenté dans ce manuscrit est mon propre travail, réalisé sous la direction scientifique de Johan Debayle et Carole Coufort-Saudejaud, dans le respect des principes d'intégrité et de responsabilité inhérents à la mission de recherche. Les travaux de recherche et la rédaction de ce manuscrit ont été réalisés dans le respect de la charte nationale de déontologie des métiers de la recherche.

Ce travail n'a pas été précédemment soumis dans sa globalité en France ou à l'étranger dans une version identique ou similaire à un organisme examinateur.

Fait à Stigny, le 2 juillet 2024

Ce travail de thèse est une œuvre de l'esprit, protégée par le droit d'auteur, tel que prévu aux articles L111-1 du CPI et suivants disposant que « *L'auteur d'une œuvre de l'esprit jouit sur cette œuvre, du seul fait de sa création, d'un droit de propriété incorporelle exclusif et opposable à tous. [...]* »

Il est rappelé que par exception au droit d'auteur, la loi française autorise l'utilisation d'une œuvre divulguée, sans autorisateur de son auteur, suivant les conditions définies dans l'article L122-5 du CPI disposant que « *Lorsque l'œuvre a été divulguée, l'auteur ne peut interdire [...] la représentation ou la reproduction d'extraits d'œuvres, [...] sous réserve que soient indiqués clairement le nom de l'auteur et la source [...] les analyses et courtes citations justifiées par le caractère critique, polémique, pédagogique, scientifique ou d'information de l'œuvre à laquelle elles sont incorporées [...]* »

Caractérisation morphométrique d'agrégats de particules par
analyse d'image et géométrie stochastique

Léo THÉODON

25/11/2024

Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet MORPHING financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) et d'une problématique industrielle posée par l'entreprise ARKEMA. Elle vise à développer des méthodes pour caractériser la morphologie 3D d'agrégats de nanoparticules de latex dans un contexte industriel, à partir d'images 2D in-situ. En effet, les propriétés morphologiques de ces agrégats influencent fortement la qualité des produits finis et l'efficacité des procédés, mais ne peuvent être estimées que par imagerie en conditions de production.

La thèse aborde cette problématique sous deux angles complémentaires : une approche scientifique visant à développer des modèles géométriques stochastiques 3D exploitant les informations 2D issues de l'analyse d'image, et une approche industrielle ciblant une mise en œuvre en quasi temps réel. Plusieurs contributions sont apportées, notamment trois modèles géométriques stochastiques originaux permettant de générer des agrégats 3D à partir de mesures morphométriques 2D, ainsi qu'un modèle génératif d'apprentissage profond pour estimer directement la morphologie 3D à partir d'images 2D.

Ces approches sont validées numériquement et expérimentalement sur des images in-situ et ex-situ. Les résultats montrent que l'approche purement géométrique stochastique offre une précision légèrement supérieure, tandis que l'approche par apprentissage profond est plus adaptée à un contexte industriel de par sa rapidité et sa simplicité de mise en œuvre. Des pistes d'amélioration sont identifiées concernant la qualité des données expérimentales et l'optimisation des modèles.

Cette thèse ouvre ainsi de nouvelles perspectives pour la caractérisation morphologique 3D de populations d'agrégats par analyse d'images 2D, en proposant des méthodes efficaces applicables aux conditions industrielles. Ses résultats pourront bénéficier à de nombreux procédés dont la maîtrise morphologique des produits est un enjeu clé.

À Noisette, alias Nikita.



Remerciements

Au terme de ce travail de recherche, je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de cette thèse.

Mes premiers remerciements vont naturellement à Johan Debayle, mon directeur de thèse, dont la rigueur scientifique et les précieux conseils ont façonné ma démarche de chercheur. Sa disponibilité constante et sa capacité à proposer de nouvelles perspectives ont été des atouts inestimables tout au long de ce parcours. Les enseignements qu'il m'a transmis continueront de guider ma carrière scientifique.

Je remercie chaleureusement Carole Coufort-Saudejaud, ma co-encadrante, qui a su m'accompagner avec bienveillance dans l'exploration de nouveaux domaines de recherche. Son expertise et son soutien ont été déterminants dans l'aboutissement de ce travail.

Ma reconnaissance va également à Yann Gavet, dont le regard critique et les conseils avisés ont significativement enrichi mes travaux de recherche. Sa disponibilité et son expertise ont été des ressources précieuses. Je tiens à remercier particulièrement les rapporteurs de cette thèse, Maxime Moreaud et Hermine Biermé, pour leur lecture attentive de mon manuscrit et leurs commentaires constructifs qui ont permis d'améliorer la qualité de ce travail.

Ma gratitude s'étend à l'ensemble des membres du jury pour la richesse des échanges lors de la soutenance et la pertinence de leurs questions qui ont ouvert de nouvelles perspectives de recherche.

Je souhaite exprimer ma reconnaissance à Eric Serris et Jean-Charles Pinoli pour leur aide précieuse dans la préparation de ma soutenance, ainsi qu'à Marc Roelens, directeur du cycle ICM de l'École des Mines de Saint-Étienne, qui m'a offert l'opportunité de poursuivre cette formation.

Ces trois années ont été enrichies par la présence d'Anthony et Pierre-Louis, dont le soutien régulier a été précieux.

Enfin, je remercie toutes les personnes qui, bien que non citées ici, ont contribué d'une manière ou d'une autre à l'aboutissement de ce travail de recherche. Certaines lumières, même les plus discrètes, éclairent parfois les chemins les plus importants.

Un merci sincère à Claude, pour tout.

Table des matières

Résumé	v
Remerciements	vii
Table des matières	xii
Liste des figures	xix
Glossaire	xxi
1 Introduction	1
1.1 Contexte et motivation	1
1.2 Objectifs de la thèse	2
1.2.1 Problématique industrielle	2
1.2.2 Problématique scientifique	3
1.3 Contributions	3
1.3.1 Contributions scientifiques	3
1.3.2 Publications et communications	4
1.4 Organisation du manuscrit	5
2 État de l'art	7
2.1 Introduction	8
2.2 Caractérisation morphologique d'agrégats par analyse d'image	8
2.2.1 Principe d'une revue systématique de la littérature	8
2.2.2 Caractéristiques morphologiques les plus populaires	9
2.2.3 Dispositifs d'imagerie	10
2.2.4 Techniques d'analyse d'image et de caractérisation morphologique	13
2.2.5 Discussion	17
2.3 Géométrie stochastique et stéréologie	18
2.3.1 Stéréologie en coupe	18
2.3.2 Stéréologie projective	19
2.3.3 Discussion	21
2.4 Modélisation d'agrégats et d'objets granulaires	21
2.4.1 Modélisation par empilement	21
2.4.2 Modélisation par déformation et/ou subdivision	24
2.4.3 Discussion	25
2.5 Conclusion générale	27

3 Éléments théoriques	29
3.1 Introduction	30
3.2 Analyse d'image & Morphométrie	30
3.2.1 Caractérisation morphométrique	30
3.2.2 Mesures géométriques	36
3.2.3 Segmentation	39
3.3 Stéréologie projective	42
3.4 Génération d'objets aléatoires	43
3.4.1 Par empilement de particules élémentaires	43
3.4.2 Par déformation d'un maillage	44
3.5 Conclusion générale	48
4 Modélisation 3D d'une population d'agrégats	49
4.1 Introduction	50
4.1.1 Contenu du chapitre	50
4.1.2 Pourquoi développer de nouveaux modèles ?	50
4.2 Modèle GRAPE	51
4.2.1 Genèse du modèle	51
4.2.2 Description générale du modèle	52
4.2.3 Description de l'algorithme	53
4.2.4 Généralisation et exemples de réalisations	55
4.2.5 Optimisation et validation sur une population synthétique	56
4.3 Modèle SPHERE	60
4.3.1 Genèse du modèle	60
4.3.2 Description générale du modèle	61
4.3.3 Description de l'algorithme	62
4.3.4 Exemples de réalisations et généralisation	63
4.3.5 Influence des paramètres, étude de sensibilité et estimations	65
4.3.6 Optimisation et validation sur une population synthétique	72
4.3.7 Discussion	76
4.4 Modèle VOX-STORM	79
4.4.1 Genèse du modèle	79
4.4.2 Description générale du modèle	79
4.4.3 Description de l'algorithme	81
4.4.4 Exemples de réalisation	82
4.4.5 Influence des paramètres du modèle et estimations	84
4.4.6 Optimisation et validation sur une population synthétique	88
4.4.7 Discussion	91
4.5 Conclusion générale	92
5 Validation de la méthode par application à des images ex-situ	95
5.1 Introduction	95
5.1.1 Problématique générale et méthodologie proposée	95
5.1.2 Contenu du chapitre	98
5.2 Validation sur des agrégats imprimés en 3D	98
5.2.1 Génération de l'ensemble de données	98
5.2.2 Application de la méthode	98
5.2.3 Discussion	101

5.3 Application à des populations d'agrégats de latex	102
5.3.1 Description du protocole expérimental et définition des objectifs	102
5.3.2 Résultats	104
5.3.3 Discussion et comparaison des performances des modèles	108
5.4 Conclusion générale	114
6 Génération d'objets 3D par apprentissage profond à partir d'images 2D	117
6.1 Introduction	117
6.1.1 Contenu du chapitre	117
6.1.2 Problématique générale et méthode proposée	118
6.2 Développement d'un modèle génératif d'objets 3D	119
6.2.1 Réseaux antagonistes génératifs pour la génération d'objets 3D	119
6.2.2 Entraînement	122
6.2.3 Validation	126
6.3 Caractérisation morphologique 3D à partir d'images in-situ synthétiques	129
6.3.1 Description de la méthode	129
6.3.2 Génération des données	131
6.3.3 Résultats	132
6.3.4 Discussion	136
6.4 Conclusion générale	137
7 Application à des images in-situ d'agrégats de latex	139
7.1 Introduction	139
7.1.1 Contenu du chapitre	139
7.1.2 Problématique générale	140
7.2 Collecte des données expérimentales	140
7.2.1 Description du protocole expérimental	140
7.2.2 Acquisition des images in-situ	141
7.3 Segmentation automatique	143
7.3.1 Description de la méthode	143
7.3.2 Génération d'images synthétiques similaires aux images réelles	144
7.3.3 Comparaison des modèles de segmentation	147
7.3.4 Application aux images in-situ	153
7.4 Caractérisation morphologique d'une population d'agrégats de latex	154
7.4.1 Description de la méthode	154
7.4.2 Résultats	155
7.5 Conclusion générale	157
8 Conclusion & perspectives	159
8.1 Conclusion	159
8.1.1 Analyse d'image et segmentation automatique	159
8.1.2 Modélisation géométrique stochastique 3D	160
8.1.3 Modèles génératifs	160
8.1.4 Application aux données réelles	160
8.2 Perspectives	161
8.2.1 Amélioration de la qualité des données expérimentales	161
8.2.2 Amélioration des modèles et perspectives théoriques	161
A Caractéristiques morphologiques	163

B Maillage d'une sphère	167
C Illustrations supplémentaires d'agrégats imprimés en 3D	171
Bibliographie	173

Table des figures

1.1	Exemples d'images ex-situ capturée par un morphogranulomètre (a) et in-situ capturées par un capteur CMOS (b) d'agrégats de latex.	3
2.1	Protocole en six étapes d'une revue systématique de la littérature.	9
2.2	Caractérisation morphologique d'un agrégat : taille, forme, angularité et texture (a) et taille moyenne des agrégats ou agglomérats étudiés parmi les articles de recherche sélectionnés (b).	10
2.3	Caractéristiques morphologiques les plus courantes pour les agrégats et les agglomérats dont la taille moyenne se situe dans différentes fourchettes. . .	10
2.4	Illustration des méthodes de caractérisation d'agrégats de TiO ₂ proposées par FREI et al. [1] (a) et MONCHOT et al. [2] (b) en utilisant un modèle de segmentation Mask R-CNN et de la méthode de segmentation et de classification proposée par MEHLE et al. [3] (c) pour des granulés pharmaceutiques en utilisant des réseaux de neurones convolutifs.	14
2.5	Illustration d'agrégats générés par les modèles d'empilement de sphères dures proposés par MORÁN et al. [4, 5], TOMCHUK et al. [6] et GUESNET et al. [7].	23
2.6	Méthode proposée par MOLLON et al. [8] pour la génération 3D de particules aléatoires, basée sur trois contours 2D aléatoires générés à partir de descripteurs de Fourier et utilisés comme coupes transversales orthogonales.	25
2.7	Illustration d'agrégats générés par la méthode de subdivision de surfaces proposée par WEI et al. [9] (a) et par le modèle basé sur une tessellation de Voronoi de ZHANG et al. [10] (b).	26
2.8	Illustration d'agrégats générés par le modèle proposé par MOLLON et al. [11] mêlant descripteurs de Fourier et champs Gaussiens aléatoires (a) et par le modèle utilisant le concept d'harmoniques sphériques proposé par WEI et al. [12] (b).	26
3.1	Illustration de l'aire et du périmètre de la projection 2D d'un objet 3D (a), et du calcul des diamètres de Feret maximum et minimum (b).	32
3.2	Exemples d'objets 2D ayant la même « forme » mais pas la même circularité : (a-b) et (c-d) ; Et d'objets ayant la même circularité C = 0.54 mais pas la même « forme » : (b-c).	35
3.3	Illustration de la 4-connectivité (a) et de la 8-connectivité (b).	37
3.4	Comparaison de différentes techniques de segmentation avec en particulier des méthodes directes (b-c) et des modèles d'apprentissage profond (d-f). .	41

3.5 Exemple d'objets étoilés avec une étoile à cinq branches (a) et un octogone régulier (b), et non-étoilés avec un croissant de lune (c) et une forme en « U » (d).	45
3.6 Temps nécessaire pour générer un champ Gaussien aléatoire 3D sur des grilles de différentes tailles en utilisant la méthode proposée. Les données simulées sont moyennées sur 20 simulations.	46
3.7 Exemple de champs Gaussiens aléatoires 3D générés sur une grille de 50^3 px avec différentes longueurs de corrélation ℓ et avec la fonction de corrélation donnée par l'équation (3.34). Les couleurs représentent l'intensité du champ (bleu foncé = 0 et rouge foncé = 1).	46
3.8 Exemple de déformation du maillage d'une sphère par des champs Gaussiens aléatoires 3D générés sur une grille de 50^3 px avec différentes longueurs de corrélation ℓ et coefficient d'intensité c , à partir de la fonction de corrélation donnée par l'équation (3.34).	47
3.9 Exemple de déformation d'un ellipsoïde d'elongation $e = 0.8$ par un champ aléatoire Markovien 3D (a) et par un bruit de Perlin (b).	48
4.1 Exemple de deux cas dégénérés d'agrégats ayant les mêmes caractéristiques 2D projetées (aire, aire convexe, périmètre et aspect ratio). Seul le rayon r des particules élémentaires et de nombre total de particules N_p diffère.	52
4.2 Images d'agrégats et agglomérats en milieu dilué, à l'issue du processus d'agglomération, capturées à l'aide d'un morphogranulomètre.	53
4.3 Évolution des erreurs relatives en fonction du nombre de configurations à tester N_c pour des agrégats composés de différents nombres de particules N_p . Les erreurs relatives sont des moyennes calculées sur des ensembles de 200 agrégats synthétiques.	55
4.4 Exemple d'agrégats générés par le modèle GRAPE avec des paramètres et des objectifs différents.	55
4.5 Exemple d'agrégats générés par le modèle GRAPE à partir de particules élémentaires dont le rayon suit une loi log-normale et avec $N_p = 150$	56
4.6 Distribution jointe d'aspect ratio et d'aire projetée de la population d'agrégats synthétiques générée par le modèle GRAPE.	58
4.7 Exemple d'agrégats synthétiques générés par le modèle GRAPE pour produire la population \mathcal{A} contenant 10^4 objets.	58
4.8 Distributions marginales de la distribution jointe utilisée pour générer les agrégats synthétiques de la population \mathcal{A} comparées aux histogrammes des mesures de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des agrégats générés par le modèle GRAPE à partir de l'estimation de la paramétrisation optimale $\hat{\Omega}$ obtenue à l'issue du processus d'optimisation.	59
4.9 Illustration du processus de génération d'un objet granulaire à partir du modèle SPHERE à 6 paramètres.	63
4.10 Exemple d'objets générés par le modèle SPHERE, avec différentes formes, angularités et textures. Le ratio $e = b/a$ varie de 1 à 0.6 ; et les coefficients d'intensité de déformation appliqués à G_A et G_T sont $c_A \in [0.05; 0, 3]$ et $c_T \in [0.01; 10]$, respectivement.	64
4.11 Exemple d'objets générés par une extension du modèle SPHERE en utilisant quatre champs Gaussiens aléatoires plutôt que deux.	64

4.12 Illustration du mode de calcul du grand axe projeté a_p ainsi que du petit axe projeté b_p de l'ellipse équivalente de la projection 2D d'un objet 3D selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum.	66
4.13 Illustration des paramétrisations du modèle SPHERE utilisées pour étudier l'influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques des objets synthétiques générés. Les Fig. 4.13a et Fig. 4.13b montrent les formes de base utilisées pour générer les graphes des Fig. 4.14 et Fig. 4.15, respectivement. Les Fig. 4.13c et Fig. 4.13d montrent des coupes 2D des champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T utilisés pour modéliser l'angularité et la texture des objets, respectivement.	66
4.14 Influence des coefficients d'intensité de déformations appliqués par les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T avec des longueurs de corrélation $\ell_A = 25$ et $\ell_T = 1$, respectivement, et un ratio $b/a = 1$ (voir Fig. 4.13a). Les points représentent la valeur moyenne de la déviation relative par rapport à la mesure effectuée sur la forme de base, calculée sur 500 objets synthétiques, et les barres d'erreur représentent $+/-$ un écart-type.	67
4.15 Influence des coefficients d'intensité de déformations appliqués par les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T avec des longueurs de corrélation $\ell_A = 25$ et $\ell_T = 1$, respectivement, et un ratio $b/a = 0.7$ (voir Fig. 4.13b). Les points représentent la valeur moyenne de la déviation relative par rapport à la mesure effectuée sur la forme de base, calculée sur 500 objets synthétiques, et les barres d'erreur représentent $+/-$ un écart-type.	68
4.16 Observations versus prédictions pour le volume normalisé, l'aire surfacique normalisée, la solidité et la sphéricité d'objets synthétiques générés par le modèle SPHERE. Les prédictions sont réalisées à partir de modèles de régression linéaire basés sur les paramètres du modèle. Les données sont normalisées. Les points les plus sombres indiquent des valeurs plus faibles pour le coefficient c_A (Fig. 4.16a) et pour le coefficient c_T (Fig. 4.16b, Fig. 4.16c et Fig. 4.16d). Les données synthétiques représentent un ensemble de 5000 observations.	70
4.17 Illustration de la corrélation entre l'elongation b/a et l'elongation projetée b_p/a_p d'une part, et entre la longueur de grand axe a et la longueur de grand axe projeté a_p d'autre part. L'ensemble de données utilisé est généré à l'aide des paramètres du tableau 4.4 avec $c_A < 0.3$	73
4.18 Évolution de la <i>Fourier power</i> cumulée (4.18a) et de la reconstruction partielle du contour en fonction du nombre d'harmoniques.	74
4.19 Exemple d'objets générés par le modèle SPHERE à partir de l'ensemble des paramètres Ω_s et qui composent l'échantillon de 250,000 objets utilisés pour la validation numérique de la méthode d'optimisation.	75
4.20 Illustration des résultats obtenus lors de la validation numérique de la méthode proposée. Les lignes rouges en pointillés représentent les densités de probabilité à noyau estimées sur l'échantillon de 250,000 objets générés par le modèle SPHERE à partir du jeu de paramètres Ω_s . Les histogrammes représentent les caractéristiques morphologiques de la population générée par le modèle SPHERE à partir de l'ensemble de paramètres $\hat{\Omega}_s$ estimés par la méthode d'optimisation proposée.	77

4.21 Illustration du contour de l'alpha-shape d'un nuage de points allant de $\alpha = 0$, ce qui donne l'ensemble de points lui-même, à $\alpha = +\infty$, ce qui donne l'enveloppe convexe.	80
4.22 Visualisation 2D de l'Algorithmme 3 appliqué à une grille de 7×7 , avec les paramètres $\lambda = 0.3$ et $w = 2$. (a) montre la phase d'initialisation ; (b) illustre le calcul des probabilités d'activation à la frontière, les teintes plus lumineuses indiquant des probabilités plus élevées ; (c) montre la sélection aléatoire des pixels pour l'activation. Les figures suivantes (d-l) montrent la croissance de la forme 2D. Les légendes indiquent le nombre d'itérations et les lignes correspondantes dans l'Algorithmme 3.	83
4.23 Illustration du processus de génération d'un objets par le modèle VOX-STORM sur une grille de 49^3 voxels avec $\lambda = 0.15$. L'état de la grille 3D est montré pour les itérations 1 à 5, puis pour les itérations 10, 20, 30 et 40, de gauche à droite. L'objet final, y compris le maillage dérivé de la surface d'une alpha-shape (avec $\alpha = 5$), est représenté à droite. Le gradient de couleur sur les structures voxélisées indique l'intensité du produit des champs Gaussiens aléatoires, allant du plus foncé (produit = 0) au plus clair (produit = 1).	83
4.24 Exemples d'objets générés par le modèle VOX-STORM avec différents jeux de paramètres, exhibant des maillages calculés avec deux valeurs α différentes à chaque fois, de sorte à illustrer son impact sur l'angularité et la texture de la surface des objets.	83
4.25 Temps nécessaire pour générer un agrégat à l'aide du modèle VOX-STORM en fonction de la taille de la grille n_g . La paramétrisation est issue du tableau 4.10, et 100 agrégats sont générés pour chaque valeur n_g différente afin d'établir un temps de calcul moyen.	84
4.26 Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 2D des objets générés par VOX-STORM. Chaque observation représente une moyenne calculée sur un échantillon de 500 objets, et les barres représentent les écarts types.	85
4.27 Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 3D des objets générés par VOX-STORM. Chaque observation représente une moyenne calculée sur un échantillon de 500 objets, et les barres représentent les écarts types.	86
4.28 Corrélation entre le produit $n_i \times \lambda^{2/3}$ et l'ECD (a) d'une part, et l'ESD (b) d'autre part.	87
4.29 Comparaison des caractéristiques morphologiques 2D et 3D entre deux populations synthétiques générées par le modèle VOX-STORM : l'une composée de 40,000 objets utilisant l'ensemble de paramètres Ω_s (vérité de terrain, représentée par des histogrammes) et l'autre comprenant 20,000 objets générés avec l'ensemble de paramètres $\hat{\Omega}_s$ estimé par la méthode proposée (représentée par des lignes pleines).	90
5.1 Description du morphogranulomètre Morphologi G3 – Malvern Panalytical et de ses composants ("Analyseur d'images Morphologi G3 Malvern Panalytical" – 2021) et illustration de la segmentation (binarisation) automatique des images brutes.	96

5.2	Illustration des différentes étapes permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à l'aide d'images 2D projetées et de modèles géométriques stochastiques.	97
5.3	Visualisation des mûres (agrégats imprimés en 3D). Image prise par un smartphone (a) et par un morphogranulomètre (b).	99
5.4	Comparaison entre la géométrie 3D contenue dans le fichier STL destiné à l'impression 3D et des exemples de rendus 3D d'objets générés par les trois modèles avec les ensembles de paramètres optimaux (à gauche), et entre une image projetée binarisée d'un agrégat imprimé en 3D capturée par le morphogranulomètre et les projections 2D des objets générés par les modèles (à droite).	100
5.5	Schéma du dispositif expérimental utilisé pour les expériences d'agrégation de latex MBS.	102
5.6	Exemple d'images capturées par le morphogranulomètre pour les Exp. 1 et Exp. 2. La largeur de chaque image est de 2.8 mm pour 2,584 px.	103
5.7	Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés pour l'Exp. 1. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence et sont normalisés.	105
5.8	Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés pour l'Exp. 2. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence et sont normalisés.	106
5.9	Comparaison des prédictions des trois modèles pour toutes les dimensions fractales 2D et 3D pour l'Exp. 1 et l'Exp. 2.	109
5.10	Temps de calcul nécessaire à chaque modèle pour générer des objets synthétiques et effectuer des mesures morphologiques. Les données correspondent à un total de 20000 objets, répartis en deux ensembles de 10,000 éléments pour chacune des paramétrisations correspondant aux deux expériences (Exp. 1 et Exp. 2). Les lettres V, S et G correspondent respectivement aux modèles VOX-STORM, SPHERE et GRAPE, et le suffixe +M indique que le temps de calcul des caractéristiques morphologiques à l'aide de MATLAB® est pris en compte.	110
5.11	Illustration du principe de duplication du modèle VOX-STORM proposé pour modéliser des populations hétérogènes.	112
5.12	Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés, ainsi que celles de la version dupliquée du modèle VOX-STORM, pour l'Exp. 1. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.	113
6.1	Illustration du mode de fonctionnement du GAN utilisé pour générer des structures 3D voxélisées à partir d'images 2D à niveaux de gris. Les données d'entraînement sont générées par le modèle VOX-STORM.	120
6.2	Schéma détaillé de l'architecture du générateur utilisé dans le réseau antagoniste génératif (GAN) pour la génération de structures 3D voxélisées à partir d'images 2D projetées.	123

6.3	Schéma détaillé de l'architecture du discriminateur utilisé dans le réseau antagoniste génératif (GAN) pour évaluer la ressemblance des structures 3D voxélisées générées à partir d'images 2D projetées avec les structures 3D voxélisées issues de l'ensemble d'entraînement.	124
6.4	Exemple d'objet 3D de taille $32 \times 32 \times 32$ généré par le modèle VOX-STORM avec sa projection 2D de taille 64×64 associée (image à niveaux de gris).	125
6.5	Comparaison des objets 3D produits par le générateur à partir d'images 2D issues de l'ensemble de test avec les objets 3D originaux.	127
6.6	Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D entre les objets de l'ensemble de test générés par le modèle VOX-STORM et les objets produits par le générateur à partir des images 2D projetées à niveaux de gris.	128
6.7	Illustration du processus visant à valider la méthode proposée pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir d'images in-situ. Une population d'objets synthétiques est générée par le modèle SPHERE, des images photo-réalistes sont créées puis segmentées, et le générateur entraîné à l'aide du modèle VOX-STORM produit une population d'objets 3D à partir des images projetées individuelles issues de la segmentation.	131
6.8	Exemple d'images in-situ synthétiques générées à l'aide du modèle SPHERE.	132
6.9	Exemple de prédictions du générateur à partir de vignettes extraites par segmentation d'images in-situ synthétiques photo-réalistes.	133
6.10	Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D pré-dites par le générateur (GAN), ainsi que par le modèle VOX-STORM, avec la <i>vérité terrain</i> correspondant aux objets synthétiques du <i>Dataset. 1</i> générés par le modèle SPHERE. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.	134
6.11	Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D pré-dites par le générateur (GAN), ainsi que par le modèle VOX-STORM, avec la <i>vérité terrain</i> correspondant aux objets synthétiques du <i>Dataset. 2</i> générés par le modèle SPHERE. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.	135
7.1	Illustration du dispositif expérimental mis en place pour capturer des images in-situ du phénomène d'agrégation du latex PMMA, ainsi que des différents éléments le composant.	141
7.2	Exemples d'images in-situ capturées durant le processus d'agrégation après 3 heures (a), après 7 heures (b) et après 10 heures (c).	142
7.3	Génération séquentielle d'un agrégat à l'aide d'une version étendue du modèle SPHERE : De la forme de base (a) au rendu final (g) avec des déformations progressives de 1 à 4 champs Gaussiens aléatoires (b-e), amélioré par des effets de lumière et d'ombre (f), en finissant par des effets de bruit et de flou (g).	144
7.4	Exemples d'images synthétiques générées à l'aide de la version du modèle SPHERE utilisant quatre champs Gaussiens aléatoires.	145
7.5	Illustration des deux ensembles de 2000 images synthétiques générés à l'aide du modèle SPHERE.	146

7.6	Illustration de l'évolution des valeurs moyens de FID en fonction de la taille des sous-ensembles d'images réelles. La ligne pointillée indique le score obtenu en comparant les images réelles avec les images synthétiques.	147
7.7	Illustration du processus de segmentation par Mask R-CNN.	148
7.8	Exemple de segmentation d'une image issue de l'ensemble de test du Dataset. 2 par les cinq différents modèles, avec des taux de détection d'objets similaires à ceux présentés dans la dernière colonne (ARE) du Tableau 7.4.	150
7.9	Illustration des masques de segmentation prédits par les différents modèles sur un <i>groupe</i> d'agrégats.	150
7.10	Distributions de taille (Diamètre équivalent – ECD), de forme (Aspect Ratio – AR) et d'angularité et texture (Circularité – C et Convexité – Co) déterminées par les différents modèles de segmentation sur les ensembles de test des Dataset. 1 et Dataset. 2.	152
7.11	Illustration des masques de segmentation prédits par le modèle Mask R-CNN pour les images in-situ réelles.	153
7.12	Distributions de caractéristiques morphologiques 2D obtenues par segmentation des images in-situ et nombre d'objets détectés par image (f).	154
7.13	Distributions de caractéristiques morphologiques 3D estimées par l'approche basée sur un modèle génératif d'apprentissage profond (a) et par l'approche purement géométrique stochastique utilisant le modèle VOX-STORM (b).	156
B.1	Illustration de cinq types de maillages sphériques différents comptant un total de 642 sommets.	167
B.2	Illustration des écarts relatifs entre les mesures effectuées sur des objets générés avec le modèle SPHERE à partir de cinq maillages différents. Les mesures de référence sont effectuées sur une icosphère à 10242 sommets.	169
C.1	Visualisation des agrégats imprimés en 3D. Images capturées par un morphogranulomètre.	171

Glossaire

Abréviations

Acronyme	Définition
2D	Deux dimensions
3D	Trois dimensions
CNN	Réseau de Neurones Convolutif
EMSE	École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne
FFT	Transformée de Fourier Rapide
GAN	Réseau Génératif Antagoniste
GRAPE	Geometrical Random Aggregation of Particles Emulation
PSD	Distribution de la Taille des Particules
OM	Microscopie Optique
ReLU	Unité Linéaire Rectifiée
SEM	Microscopie Électronique à Balayage
SPHERE	Stochastic Process for Highly Effective Radial Expansion
SPIN	Centre des Sciences des Procédés Industriels et Naturels
STEM	Microscopie Électronique en Transmission et à Balayage
SVM	Machine à Vecteurs de Support
TEM	Microscopie Électronique en Transmission
VOX-STORM	VOXel-based STOchastic geometRical Model

Notations

Symbol	Définition
ε_{cp}	Porosité
Φ_S	Sphéricité
A	Aire Projetée
A_c	Aire Convexe
AR	Aspect Ratio
a	Axe Majeur
a_p	Axe Majeur Projété
b	Axe Mineur

Symbol	Définition
b_p	Axe Mineur Projeté
C	Circularité
Co	Convexité
D_2^{BC}	Dimension Fractale définie par Box-Counting (2D)
D_3^{BC}	Dimension Fractale définie par Box-Counting (3D)
D_2^{PL}	Dimension Fractale définie par une Loi de Puissance
D_3^{LS}	Dimension Fractale calculée par Diffusion Laser
ECD	Diamètre de Cercle Équivalent
ESD	Diamètre de Sphère Équivalent
e	Élongation
e_p	Élongation Projectée
F_{\max}	Diamètre de Feret maximum
F_{\min}	Diamètre de Feret minimum
P	Périmètre
S	Aire de la Surface
SLD	Solidité
V	Volume
V_c	Volume Convexe
V_p	Volume Poreux

Paramètres des modèles

Symbol	Définition
α	Paramètre de lissage de l'alpha-shape
Ω	Ensemble de paramètres d'un modèle
$\hat{\Omega}$	Estimation d'un ensemble de paramètres d'un modèle
λ	Proportion de voxels à activer
c_A	Coefficient d'intensité de déformation du champ G_A
c_A	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_A
c_T	Coefficient d'intensité de déformation du champ G_T
c_T	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_T
d_i	Distance minimum entre les centres de deux particules élémentaires
G_A	Champ Gaussien aléatoire d'angularité
G_C	Champ Gaussien aléatoire (combinaison)
G_T	Champ Gaussien aléatoire de texture
ℓ_A	Longueur de corrélation de G_A
ℓ_A	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_A
ℓ_T	Longueur de corrélation de G_T
ℓ_T	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_T
N_c	Nombre de configurations à tester à chaque itération
n_i	Nombre d'itérations

Symbol	Définition
r	Rayon des particules élémentaires
w	Poids dans le noyau de convolution K_w

Chapitre 1

Introduction

Contenu du chapitre

1.1	Contexte et motivation	1
1.2	Objectifs de la thèse	2
1.2.1	Problématique industrielle	2
1.2.2	Problématique scientifique	3
1.3	Contributions	3
1.3.1	Contributions scientifiques	3
1.3.2	Publications et communications	4
1.4	Organisation du manuscrit	5

Préambule

Cette thèse a été réalisée au sein du laboratoire Georges Friedel (LGF CNRS UMR 5307) et du centre SPIN de l’École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne. Elle s’inscrit dans le projet MORPHING – « Apport d’un jumeau numérique pour une meilleure maîtrise des propriétés morphologiques d’agrégats générés sous contraintes hydrodynamiques », financé par l’Agence Nationale de la Recherche ; Référence ANR-20-CE07-0025.

1.1 Contexte et motivation

La compréhension des phénomènes d’agrégation en suspension est importante pour améliorer les procédés d’agrégation, notamment à travers la maîtrise des propriétés morphologiques des solides formés. En effet, le contrôle de la morphologie des agrégats est indispensable pour nombre d’applications industrielles, notamment pour l’optimisation des conditions de production et le maintien d’une qualité constante de la production.

Ainsi, le développement de techniques de visualisation optique in-situ pour suivre la dynamique morphologique des agrégats en temps réel est essentiel pour obtenir des données précises et fiables. En parallèle, l’utilisation de modèles géométriques stochastiques pour simuler les agrégats observés permet de fournir des représentations numériques réalistes, facilitant les mesures morphométriques et la compréhension des changements morphologiques sous différentes contraintes.

Cette thèse propose ainsi de mettre au point des outils permettant de caractériser la morphologie d'agrégats de nanoparticules de latex à partir d'images in-situ, en s'appuyant sur des techniques issues de la géométrie stochastique. Cela répond à une problématique industrielle posée par l'entreprise ARKEMA, qui cherche à mieux comprendre les phénomènes d'agrégation de latex, et à mieux maîtriser la morphologie des agrégats produits. D'un point de vue industriel, il est nécessaire d'agglomérer les nanoparticules de latex via un processus de coagulation-agrégation dans des réacteurs agités fonctionnant en cascade, dans des conditions physico-chimiques spécifiques (pH, température). Les agrégats sont ensuite séchés en conditions douces. La poudre obtenue est alors dispersée dans une matrice liquide ou polymérique pour formuler des produits de consommation courante (emballage de mobilier, intérieur de véhicules, coques de smartphones, etc.). Cependant, les propriétés morphologiques des agglomérats (distribution de taille, forme et densité) influencent fortement la qualité de la poudre (densité, tendance au mottage) et l'efficacité de la dispersion, ce qui peut faire varier les temps d'opération par un facteur de 10. La morphologie des agrégats peut par ailleurs avoir un impact significatif sur le taux de rebut ainsi que le temps de production.

Par conséquent, deux problématiques se dégagent : l'une scientifique et l'autre industrielle. Bien que cette thèse apporte principalement des éléments de réponse à la problématique scientifique, validés notamment par un certain nombre de contributions scientifiques listées dans la suite de ce chapitre, elle s'attache également à répondre à la problématique industrielle, reconnaissant l'importance d'apporter des solutions concrètes et applicables aux défis rencontrés par l'industrie.

1.2 Objectifs de la thèse

1.2.1 Problématique industrielle

La problématique industrielle rejoint la problématique scientifique, en ce sens que le problème posé est celui de la mise en œuvre de méthodes pour caractériser la morphologie 3D d'agrégats de latex dans un contexte industriel.

En effet, le fait de travailler sur des images ex-situ (Fig. 1.1a) est essentiel pour calibrer les modèles et valider les méthodes qui seront proposées, mais est un processus long, coûteux, invasif, potentiellement destructif, et qui n'est généralement pas applicable dans un environnement industriel. Pour cette raison, il est nécessaire de s'assurer qu'il est également possible d'exploiter les images in-situ (Fig. 1.1b), et de développer des outils pouvant être utilisés en quasi temps réel.

Les objectifs industriels sont les suivants :

1. Développer des méthodes de segmentation automatiques pour la caractérisation 2D de populations d'agrégats à partir d'images capturées in-situ, éventuellement très dégradées et de qualité variable.
2. Rendre compatibles les outils développés pour caractériser la morphologie 3D des agrégats de latex à partir des images in-situ avec un environnement industriel, et en particulier à une utilisation en quasi temps réel.
3. Valider le protocole complet de caractérisation morphométrique par des simulations numériques, et le tester sur des données réelles.

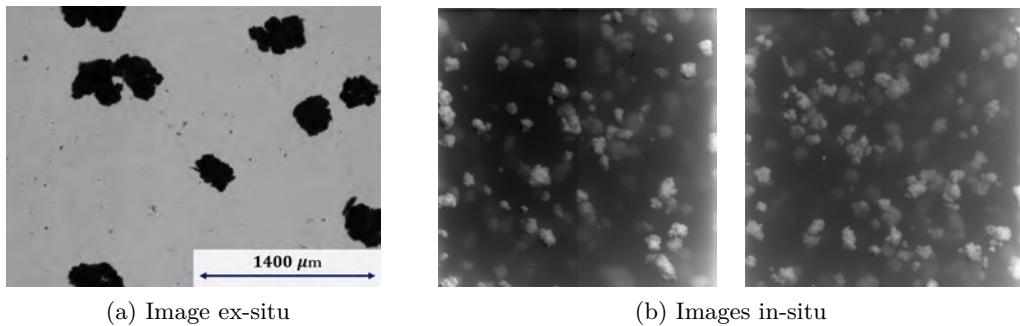


FIGURE 1.1 – Exemples d’images ex-situ capturée par un morphogranulomètre (a) et in-situ capturées par un capteur CMOS (b) d’agrégats de latex.

1.2.2 Problématique scientifique

D'un point de vue scientifique, la problématique la plus importante consiste à se poser la question de l'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'un objet à partir d'une unique image 2D projetée. En effet, la caractérisation morphométrique des agrégats de latex ne peut être effectuée qu'à partir d'images in-situ ou ex-situ (cf. Fig. 1.1). Bien que l'étude des phénomènes d'agrégation puisse être réalisée par l'établissement et la résolution de bilans de population [13], ces derniers ne permettent pas de fournir à ce jour une connaissance fine et exhaustive des caractéristiques morphologiques des agrégats. Pour cela, l'utilisation de modèles produisant une représentation numérique des objets, que ce soit une image 3D, un maillage, ou tout autre type de structure, est nécessaire. Ainsi, l'approche retenue consiste à développer des modèles géométriques stochastiques capables de générer des populations représentatives des agrégats réels. En particulier, les paramètres des modèles devront être ajustés pour que les caractéristiques 2D projetées des agrégats synthétiques correspondent à celles des agrégats réels qui auront été mesurées par analyse d'image. La méthode sera présentée plus en détail au Chapitre 5.

Les objectifs scientifiques sont les suivants :

1. Développer des techniques d'analyse d'image de segmentation automatique pour la caractérisation morphologique 2D de populations d'agrégats.
 2. Proposer des modèles géométriques stochastiques suffisamment flexibles pour être en mesure de générer des populations d'objets dont les caractéristiques morphologiques 2D projetées et 3D correspondent à celles des agrégats de latex.
 3. Définir une méthode permettant de caractériser la morphologie 3D des agrégats de latex à partir des images in-situ, et la valider par des simulations numériques et/ou des mesures expérimentales.

1.3 Contributions

1.3.1 Contributions scientifiques

Les contributions scientifiques de cette thèse peuvent être résumées de la manière suivante :

- **Développement de plusieurs modèles géométriques stochastiques 3D** pour modéliser des agrégats ou des objets granulaires. Ces modèles ont été pensés pour tirer profit au maximum des informations recueillies par analyse d'image. Ainsi,

ils intègrent la connaissance des distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées au processus de génération afin de représenter au mieux la réalité. Par ailleurs, plusieurs approches différentes ont été explorées, avec notamment des modèles reposant sur l'empilement de particules primaires, et d'autres proposant plutôt de déformer le maillage d'un objet convexe.

- **Proposition d'une méthode permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D** des agrégats de latex en ajustant les paramètres des modèles par optimisation d'une fonction de coût, et validation de la méthode par des simulations numériques ainsi que par comparaison à des mesures expérimentales.
- **Développement d'un protocole pour générer des images in-situ synthétiques** ressemblant aux images réelles, à partir des modèles géométriques stochastiques. La ressemblance des images synthétiques aux images réelles est évaluée par une métrique appelée Frechet Inception Distance (FID).
- **Comparaison et entraînement de plusieurs modèles d'apprentissage profond pour la segmentation automatique** des images in-situ. Le modèle le plus performant est sélectionné en calculant les métriques usuelles, ainsi qu'en comparant la qualité des masques de segmentation à la vérité terrain de par le calcul de différentes distributions de caractéristiques morphologiques 2D.
- **Entraînement d'un modèle d'apprentissage profond de type GAN** pour générer des objets 3D à partir d'images 2D projetées.
- **Proposition d'un processus complet applicable à un environnement industriel** permettant de caractériser la morphologie 3D d'une population d'agrégats à partir d'images in-situ, utilisant une combinaison d'outils géométriques stochastiques et de modèles d'apprentissage profond. Ce processus est validé numériquement et appliqué aux images réelles.

1.3.2 Publications et communications

Les contributions scientifiques ont fait l'objet de publications dans des revues à comités de lecture, ainsi que dans des conférences avec actes.

Publications dans des revues internationales à comité de lecture

1. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2023). "GRAPE : A Stochastic Geometrical 3D Model for Aggregates of Particles With Tunable 2D Morphological Projected Properties." *Image Analysis and Stereology*, 42(1), 1-16. <https://doi.org/10.5566/ias.2875>. (**Publié**)
2. Léo Théodon, Johan Debayle, Carole Coufort-Saudejaud. (2023). "Morphological characterization of aggregates and agglomerates by image analysis : A systematic literature review." *Powder Technology*, 430, 119033. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.119033>. (**Publié**)
3. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2024). "A stochastic model based on Gaussian random fields to characterize the morphology of granular objects." *Pattern Recognition*, 149, 110255. <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2024.110255>. (**Publié**)
4. Léo Théodon, Johan Debayle, Carole Coufort-Saudejaud. (2024). "VOX-STORM : A stochastic 3D model based on a dual voxel-mesh architecture for the morphological characterization of aggregates." *Powder Technology*, 444, 119983. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2024.119983>.

//doi.org/10.1016/j.powtec.2024.119983. (**Publié**)

5. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. "Complete Workflow Based on GANs and CNNs to Estimate the 3D Morphological Characteristics of Latex Aggregates from 2D Images." *Pattern Recognition*.
(En cours d'écriture)

Publications dans des actes de conférences

1. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Ali Hamieh, Johan Debayle. (2023). "Morphological characterization of compact aggregates using image analysis and a geometrical stochastic 3D model." *2023 IEEE 13th International Conference on Pattern Recognition Systems (ICPRS), Guayaquil, Ecuador*, pp. 1-7. <https://doi.org/10.1109/ICPRS58416.2023.10179036>. (**Publié**)
2. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2024). "Deep Learning-Based Instance Segmentation to Characterize the Morphology of Compact Aggregates through Image Analysis." *2024 IEEE 14th International Conference on Pattern Recognition Systems (ICPRS), London, UK*. (**Accepté**)
3. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2024). "A stochastic 3D model based on random graphs to characterize the morphology of compact aggregates using image analysis." *11th International Symposium on Signal, Image, Video and Communications (ISIVC), Marrakech, Morocco*. (**Accepté**)

Autres communications

1. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2022). "GRAPE : A simple stochastic 3D model for aggregates of particles with tunable 2D properties." *GDR Morpheo*, 25-26 Octobre 2022, Toulouse.
2. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2023). "GRAPE : A stochastic geometrical 3D model for aggregates of particles with tunable 2D morphological projected properties." *46ème journée ISS France*, 2 février 2023.
3. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2023). "Morphological characterization of compact aggregates using image analysis and a geometrical stochastic 3D model." *RT GeoSto*, 14 Juin 2023, Dijon.
4. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2023). "Morphological characterization of compact aggregates using image analysis and a geometrical stochastic 3D model." *RT Morpheo*, 20 Juin 2023, Saint-Étienne.
5. Léo Théodon, Carole Coufort-Saudejaud, Johan Debayle. (2024). "Morphological Characterization of Aggregates by Image Analysis : Combining Deep Learning and Stochastic Geometry." *RT Morpheo*, 11-12 Juin 2024, CEA Marcoule.

1.4 Organisation du manuscrit

À la suite de cette introduction, le manuscrit est organisé de la manière suivante :

Chapitre 2 – État de l'art

Ce chapitre propose une brève revue de l'état de l'art relative aux techniques de caractérisation d'agrégats par analyse d'image, les techniques de modélisation géométrique

d'agrégats, ainsi que les méthodes stéréologiques permettant d'estimer des caractéristiques 3D à partir de mesures 2D.

Chapitre 3 – Éléments théoriques

Dans ce chapitre, les outils et définitions théoriques nécessaires à la bonne compréhension du manuscrit sont présentés.

Chapitre 4 – Modélisation 3D d'une population d'agrégats

Le chapitre 4 présente trois modèles géométriques stochastiques 3D pour la modélisation d'agrégats ou d'objets granulaires. L'influence des paramètres sur la morphologie des agrégats est étudiée, et la méthode permettant de trouver une paramétrisation optimale par optimisation d'une fonction de coût est validée numériquement.

Chapitre 5 – Validation de la méthode par application à des images ex-situ

Dans ce chapitre, la méthode présentée au chapitre 4 est validée sur des images ex-situ à l'aide d'agrégats imprimés en 3D et, dans un second temps, en comparant les résultats à des mesures expérimentales effectuées par diffraction laser sur deux populations d'agrégats de latex.

Chapitre 6 – Génération d'objets 3D par apprentissage profond à partir d'images 2D

Le chapitre 6 introduit un outil d'apprentissage profond permettant de générer des objets 3D à partir d'une unique projection 2D. L'idée est d'accélérer la méthode d'estimation des caractéristiques morphologiques 3D des agrégats de latex pour l'adapter à un contexte industriel. Le nouveau protocole est validé numériquement à partir d'images de synthèse ressemblant à des images in-situ réelles.

Chapitre 7 – Application à des images in-situ d'agrégats de latex

Le dernier chapitre propose de mettre en œuvre tous les outils et techniques développés durant cette thèse pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'agrégats de latex à partir d'images in-situ, dans des conditions similaires à un environnement industriel. Le protocole expérimental est décrit, et les résultats obtenus par les différentes approches proposées sont comparés.

Chapitre 2

État de l'art

Contenu du chapitre

2.1	Introduction	8
2.2	Caractérisation morphologique d'agrégats par analyse d'image.	8
2.2.1	Principe d'une revue systématique de la littérature	8
2.2.2	Caractéristiques morphologiques les plus populaires	9
2.2.3	Dispositifs d'imagerie	10
2.2.3.1	Vue d'ensemble.	10
2.2.3.2	Dispositifs d'imagerie optique	11
2.2.4	Techniques d'analyse d'image et de caractérisation morphologique	13
2.2.4.1	Segmentation d'image et caractérisation : Méthodes classiques.	13
2.2.4.2	Transformée de Hough	13
2.2.4.3	Segmentation d'image et caractérisation : Deep-Learning	14
2.2.4.4	Classification.	15
2.2.4.5	Caractérisation & Évaluation du processus d'agrégation	17
2.2.5	Discussion	17
2.3	Géométrie stochastique et stéréologie	18
2.3.1	Stéréologie en coupe	18
2.3.2	Stéréologie projective	19
2.3.2.1	Méthodes avec a priori sur la forme des objets	19
2.3.2.2	Méthodes sans a priori sur la forme des objets	20
2.3.2.3	Utilisation d'un modèle 3D	20
2.3.3	Discussion	21
2.4	Modélisation d'agrégats et d'objets granulaires	21
2.4.1	Modélisation par empilement	21
2.4.2	Modélisation par déformation et/ou subdivision	24
2.4.3	Discussion	25
2.5	Conclusion générale.	27

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, un bref état de l'art des différentes techniques et outils permettant de répondre à la problématique de cette thèse est proposé. En effet, afin de déterminer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats de latex par analyse d'image et géométrie stochastique, il convient de se poser trois questions.

1. Quelles techniques existent pour caractériser la morphologie d'agrégats par analyse d'image, et que signifie par ailleurs le terme « *caractériser* » dans ce contexte ?
2. Quels outils et quelles techniques de géométrie stochastique permettent d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'un objet ou d'une population d'objets à partir de la connaissance des caractéristiques morphologiques 2D ?
3. Quels sont les modèles les plus populaires dans le domaine de la modélisation d'agrégats et/ou d'objets granulaires, et, parmi-eux, quels sont les modèles les plus adaptés à notre sujet ?

Ainsi, ce chapitre se décompose en trois parties. La première partie se base en partie sur un travail bibliographique effectué selon la méthode de *Revue Systématique de la Littérature*, ou *Systematic Literature Review* (SLR) en anglais, en utilisant l'outil Sysrev [14] et publié dans Powder Technology [15]. Il s'agit de proposer un aperçu de la façon dont on caractérise la morphologie d'agrégats par analyse d'image, dans différentes communautés scientifiques. La seconde partie s'attache aux outils de géométrie stochastique et de stéréologie permettant notamment d'estimer des caractéristiques 3D à partir de mesures 2D. Enfin, la dernière partie s'intéressera aux différents types de modèles existants, et permettant de modéliser des agrégats ou des objets granulaires, et pouvant être utilisés pour répondre à la problématique de cette thèse.

2.2 Caractérisation morphologique d'agrégats par analyse d'image

Cette section s'appuie sur l'article bibliographique intitulé *Morphological characterisation of aggregates and agglomerates by image analysis : A systematic literature review* par THÉODON et al. [15]. Il s'agit de présenter de manière synthétique les techniques les plus populaires utilisées pour caractériser la morphologie d'agrégats par analyse d'image. Cet article bibliographique s'appuie sur une méthode spécifique : *la revue systématique*.

2.2.1 Principe d'une revue systématique de la littérature

Une revue systématique de la littérature est l'une des nombreuses formes spécifiques d'analyse de la littérature [16] qui fournit un cadre permettant d'identifier, d'évaluer et d'interpréter l'ensemble des recherches existantes de la manière la plus précise et la plus impartiale possible. L'analogie est souvent faite avec l'application de la méthode scientifique aux analyses documentaires. En effet, toute personne appliquant la même méthode dans les mêmes conditions devrait obtenir les mêmes résultats. L'idée est de répondre à une série de questions en obéissant à un ensemble de règles. En suivant les lignes directrices proposées par KITCHENHAM et al. [17], on peut définir un protocole en six étapes (Fig. 2.1) : formulation des questions de recherche, recherche documentaire, sélection initiale des articles, extraction des données pour répondre aux questions de recherche, évaluation de la qualité des articles sélectionnés et synthèse des données.

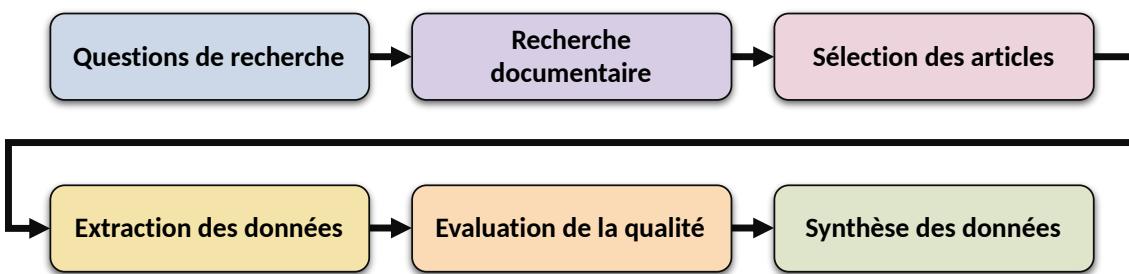


FIGURE 2.1 – Protocole en six étapes d'une revue systématique de la littérature.

Dans le cadre de cette thèse, et pour la réalisation de cette étude bibliographique très ciblée, un ensemble de 393 articles a été sélectionné pour répondre aux questions présentées par le Tableau 2.1. Après avoir appliqué différents critères de sélection, et notamment le fait que chaque article devait proposer une application à des données expérimentales, c'est un ensemble de 145 articles qui a pu être constitué. Parmi les questions de recherche, on retrouve notamment celle des caractéristiques morphologiques, des techniques d'analyse d'image, ou encore de dispositifs d'imagerie les plus utilisés, ce qui correspond aux questions posées en préambule de cette section.

ID	Question de Recherche
RQ1	Quels sont les journaux internationaux les plus significatifs ?
RQ2	Quels sont les chercheurs les plus importants et influents ?
RQ3	Quelles sont les caractéristiques morphologiques les plus couramment utilisées ?
RQ4	Quelles sont les techniques d'analyse d'image les plus couramment utilisées ?
RQ5	Quel type d'agrégats ou d'agglomérats est le plus étudié ?
RQ6	Quelle est la taille moyenne des agrégats ou agglomérats les plus étudiés ?
RQ7	Quels sont les dispositifs d'imagerie les plus couramment utilisés ?
RQ8	Dans quels domaines de recherche les agrégats ou agglomérats sont-ils le plus étudiés ?

TABLE 2.1 – Ensemble de questions de recherche formulées dans le cadre de la revue systématique de la littérature. Toutes les questions concernent la caractérisation d'agrégats ou d'agglomérats par analyse d'image.

Il a par ailleurs été possible de mettre en évidence le fait que selon les domaines de recherche, les termes « *agrégat* » ou « *agglomérat* » étaient parfois interchangeables ou pouvaient être définis de différentes manières. En particulier, NICHOLS et al. [18] proposent une revue bibliographique de ces deux termes ainsi qu'une nomenclature (peu suivie d'effet) à utiliser dans le domaine de caractérisation des poudres notamment. Ainsi, et dans toute la suite de ce manuscrit, un agrégat désigne un assemblage de particules primaires (ou élémentaires) indivisibles, et un agglomérat correspond à un assemblage d'agrégats.

2.2.2 Caractéristiques morphologiques les plus populaires

La *caractérisation* morphologique d'un agrégat ou d'un agglomérat correspond à la mesure morphométrique de plusieurs caractéristiques propres à celui-ci. Selon le domaine de recherche et le type d'objets à caractériser, les caractéristiques mesurées peuvent grandement différer. La SLR a permis de définir un ensemble de 45 caractéristiques morphologiques différentes pour un total de 110 définitions. En premier lieu, il a pu être possible de distinguer quatre grandes catégories de caractéristiques morphologiques correspondant à plusieurs niveaux de description de cette dernière, comme l'illustre la Fig. 2.2a : *taille*,

forme, angularité et texture. Une cinquième catégorie, regroupant les caractéristiques dites de *structure*, comprenant notamment le nombre de coordination ou encore la porosité, permet plutôt de caractériser la structure interne des agrégats. La Fig. 2.2b montre que les caractéristiques de taille et de forme sont les plus représentées, ce qui est naturel car ce sont celles qui sont les plus faciles à mesurer par des dispositifs optiques.

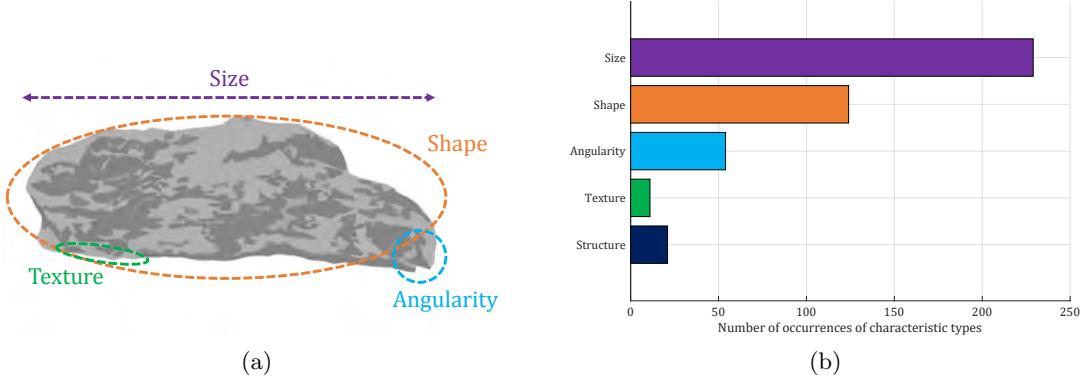


FIGURE 2.2 – Caractérisation morphologique d'un agrégat : taille, forme, angularité et texture (a) et taille moyenne des agrégats ou agglomérats étudiés parmi les articles de recherche sélectionnés (b).

Il a par ailleurs également été possible de déterminer quelles étaient les caractéristiques morphologiques les plus utilisées en fonction de la taille des objets étudiés. Les résultats sont présentés de manière partielle par la Fig. 2.3, une version plus détaillée étant disponible dans l'article de référence [15]. En particulier, aux échelles qui nous intéressent, c'est à dire pour des agrégats de latex de l'ordre de la centaine de micromètres au minimum, c'est le diamètre du cercle équivalent (ECD) qui est la caractéristique de taille la plus populaire, l'élongation de l'ellipse équivalente ou l'aspect ratio pour la caractéristique de forme, et la circularité et la convexité pour ce qui est de l'angularité des objets.

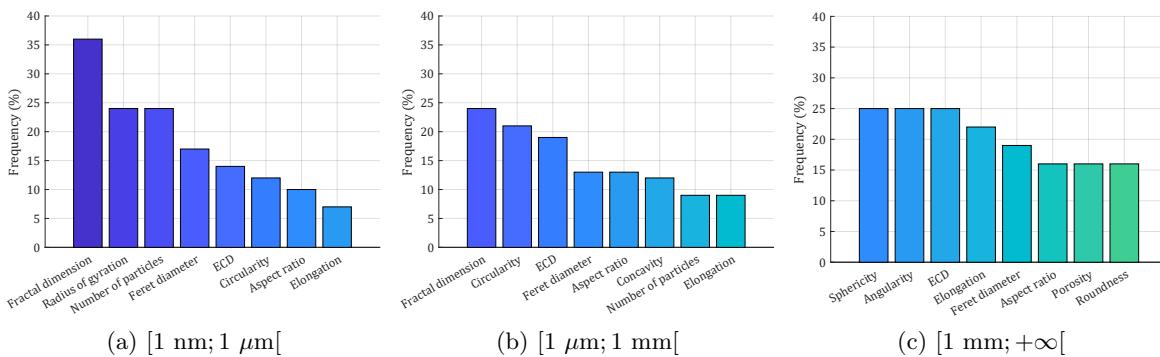


FIGURE 2.3 – Caractéristiques morphologiques les plus courantes pour les agrégats et les agglomérats dont la taille moyenne se situe dans différentes fourchettes.

2.2.3 Dispositifs d'imagerie

2.2.3.1 Vue d'ensemble

En ce qui concerne les dispositifs d'imagerie, les microscopes électriques et optiques représentent la grande majorité d'entre eux. Le Tableau 2.2 en donne un bref aperçu, en

indiquant notamment leur nombre d'occurrences parmi les articles de recherche consultés ainsi que la taille moyenne des agrégats à caractériser pour lesquels ils sont utilisés.

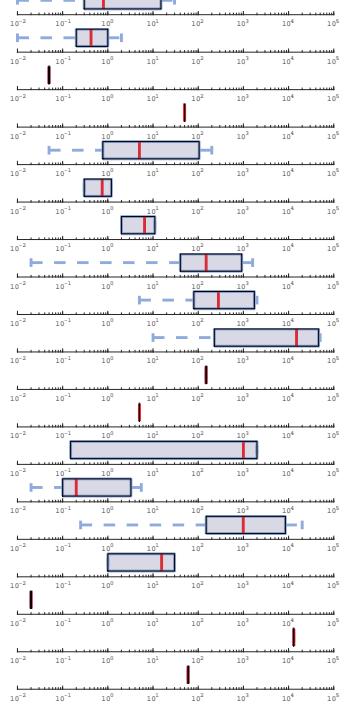
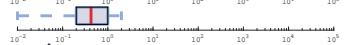
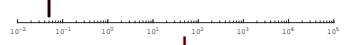
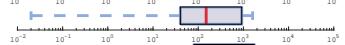
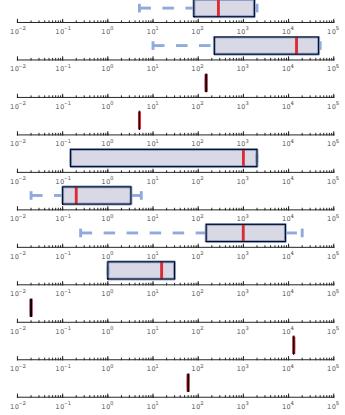
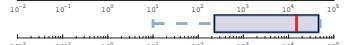
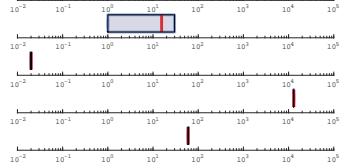
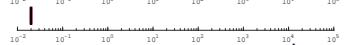
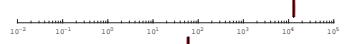
Dispositif d'imagerie	Nb. d'occurrences	Répartition des tailles (μm)
Microscopie électronique	82	
TEM	47	
HR-TEM	1	
Cryo-TEM	1	
SEM	35	
FE-SEM	2	
ESEM : Wet-SEM	2	
Microscopie optique	40	
Caméra haute vitesse	5	
Caméras multiples	4	
Stéréomicroscopie	1	
Shadowgraph	1	
Analyse de suivi des particules	2	
Microscopie à force atomique	13	
Tomographie	13	
Microscopie confocale à fluorescence laser (LCFM)	2	
Microscopie à ions hélium	1	
Interférométrie à transformée de Fourier	1	
Holographie numérique en ligne	1	

TABLE 2.2 – Liste des dispositifs d'imagerie utilisés dans les 145 articles de recherche sélectionnés.

En général, on peut observer que les techniques d'imagerie électronique sont utilisées pour les objets les plus petits (moins de 100 micromètres), la microscopie électronique à transmission (TEM) étant largement utilisée pour les petits agrégats tels que les particules de suie [19, 20] ou les aérosols [21, 22] ainsi que des agrégats de nanoparticules de métaux tels que l'argent [23, 24], l'or [25, 26] ou le titane [27, 28], et le microscope électronique à balayage (MEB) pour les objets légèrement plus grands, tels que les agrégats cristallins [29, 30]. À plus petite échelle, la microscopie à force atomique (AFM) est également bien représentée et est particulièrement utilisée dans le domaine biomédical, notamment pour sa capacité à fournir des données de manière non-invasive [31, 32].

La microscopie optique, quant à elle, est principalement utilisée pour des objets dont la taille varie de quelques dizaines de micromètres à quelques centimètres. Elle offre notamment une grande souplesse d'utilisation sur une très large gamme d'échelles de taille et présente l'avantage d'être relativement facile à mettre en place par rapport aux techniques de microscopie électronique. Enfin, les techniques de tomographie sont principalement utilisées pour sonder la structure des « *grands* » objets, c'est-à-dire de quelques centaines de micromètres à quelques centimètres.

2.2.3.2 Dispositifs d'imagerie optique

Dans le cadre qui nous intéresse, à savoir la caractérisation morphologique d'agrégats de latex par analyse d'image, seuls des dispositifs optiques seront utilisés, que ce soit pour capturer des images in-situ ou ex-situ. Parmi les différents articles étudiés, plusieurs dispositifs optiques ne se contentent pas de produire des images mais proposent également

d'effectuer eux-mêmes les mesures de caractéristiques morphologiques souhaitées.

C'est par exemple le cas du microscope optique (OM) *Malvern Instruments Morphologi G3* utilisé par GUÉRIN et al. [33, 34] pour la caractérisation morphologique d'agrégats de latex ou encore par ATALAR et al. [35] qui étudient l'impact de la morphologie d'agrégats de lactose, sucre, ou encore maltodextrine, sur la qualité et le goût de produits agroalimentaires. Le *Patvis APA* est utilisé par MEHLE et al. [3, 36] pour étudier l'impact de la morphologie d'agrégats de granulés de sucre ou de granulés pharmaceutiques sur le goût, l'esthétique, l'odeur, et, de manière générale, la qualité du produit final, ainsi que sa stabilité physicochimique. Enfin, le *QICPIC - Sympatec* est utilisé par OMAR [37] pour déterminer la distribution de taille d'agglomérats de cristaux d'acide adipique.

Ces dispositifs sont un moyen relativement simple d'observer les agrégats et les agglomérats et d'obtenir rapidement des distributions de caractéristiques morphologiques essentiellement 2D. Néanmoins, parce que ces derniers ne sont pas disponibles, ne sont pas adaptés à certaines expériences, ou encore parce que ce mode d'observation peut être considéré comme invasif, d'autres dispositifs optiques sont également utilisés. Les mesures de caractéristiques morphologiques doivent alors être effectuées sur des images de qualité variable, qui peuvent nécessiter l'application de traitements spécifiques.

Caméras Haute Cadence

L'utilisation de caméras haute cadence en microscopie optique est particulièrement courante lorsqu'il s'agit d'observer des phénomènes transitoires tels que des flammes ou des systèmes en évolution rapide. C'est le cas, par exemple, de MAGGI et al. [38], JIN et al. [39] et COHEN et al. [40], qui étudient les performances des carburants composites, et de BLANDIN et al. [41] et BLANDIN et al. [42], qui étudient la cinétique d'agglomération des microcristaux et des particules d'acide salicylique.

Caméras Multiples

L'utilisation de plusieurs caméras est une technique stéréoscopique qui permet d'observer un même objet sous plusieurs angles afin d'obtenir davantage d'informations quant à sa morphologie 3D. Cette technique est plus facile à mettre en œuvre à l'échelle du millimètre. KUO et al. [43] et KAMANI et al. [44] utilisent une configuration à deux caméras pour caractériser les granulats de roche ou grossiers, OCHSENBEIN et al. [45] pour les cristaux d'acide L-glutamique, et HUO et al. [46] pour les cristaux de KDP. Un avantage majeur de ces dispositifs d'imagerie est qu'ils permettent également des mesures in-situ, et par conséquent, non-invasives, de même qu'ils permettent plus aisément d'estimer des caractéristiques morphologiques 3D plutôt que 2D, ce que font KUO et al. [43] et KAMANI et al. [44], en particulier.

Stéréomicroscopie

La stéréomicroscopie permet de visualiser un objet avec un effet tridimensionnel en produisant deux images différentes pour chaque œil. La structure et la morphologie d'un objet capturées par stéréomicroscopie peuvent donc être vues plus clairement et avec plus de précision. MÜLLER et al. [47] utilisent ce dispositif d'imagerie pour caractériser la morphologie d'agglomérats de pastilles fongiques.

Shadogramme

L'imagerie par ombres portées (*shadowgraph*) peut produire des images d'une excellente résolution qui sont généralement faciles à binariser. Ce sont les ombres projetées des objets qui sont observées et apparaissent complètement noires, permettant ainsi de les distinguer facilement de l'arrière-plan illuminé. LOWE et al. [48] proposent d'utiliser un *shadowgraph* à haute résolution combiné à une caméra haute cadence pour observer l'impact d'un agglomérat de mannitol contre un mur et pour capturer avec précision le processus de désagglomération.

Analyse de Suivi des Particules

Les dispositifs d'analyse de suivi des particules (PTA) permettent de suivre l'évolution spatiale des objets dans une série d'images consécutives. Cela permet notamment d'obtenir des informations supplémentaires sur la morphologie des objets, leur distribution spatiale et leur cinétique, et peut parfois être utilisé pour déduire des caractéristiques tridimensionnelles. ZHALEHRAJABI et al. [49] utilisent la PTA combinée à la tessellation de Voronoï pour étudier l'efficacité du processus d'agrégation de particules d'urée et BARTCZAK et al. [50] utilisent la PTA pour suivre le processus d'agglomération de nanoparticules de silice, en la combinant à des images TEM et à des techniques de diffusion des rayons X aux petits angles (SAXS).

2.2.4 Techniques d'analyse d'image et de caractérisation morphologique

La mesure de caractéristiques morphologiques d'agrégats ou d'agglomérats par analyse d'images nécessite parfois le développement de techniques novatrices. Cette section donne un bref aperçu des méthodes les plus originales et/ou les plus utilisées dans l'état de l'art.

2.2.4.1 Segmentation d'image et caractérisation : Méthodes classiques

La segmentation ou la binarisation d'une image permet d'isoler les régions d'intérêt correspondant à la forme des objets pouvant ensuite être mesurées et caractérisées. Dans la grande majorité des cas (comme le font TOHNO et al. [51]), la segmentation est effectuée par seuillage global basé sur la méthode d'Otsu [52]. Cependant, un seuil global ne permet pas de saisir toutes les subtilités de certains contours et se révèle sensible aux légères différences de luminosité qui peuvent exister parmi différentes régions d'une image. Pour cette raison, le seuillage local est généralement préférable, bien qu'il présente souvent les inconvénients d'un temps de calcul accru et la nécessité d'ajuster certains paramètres [53]. Par exemple, pour segmenter des images d'agrégats de coke (matériau carboné solide), ERSHOV et al. [54] proposent une méthode de segmentation locale et adaptative basée sur la division de l'image selon une grille de taille variable. Une autre méthode proposée par PONS et al. [55], qui ne nécessite pas la définition d'un seuil local ou global, est la segmentation par ligne de partage des eaux (*watershed segmentation*), qui permet de détecter les lignes de contact entre différents objets.

2.2.4.2 Transformée de Hough

Pour obtenir la distribution de taille des agrégats de particules d'aérosols, EINAR KRUIS et al. [21] proposent d'utiliser la *Sparse Hough Transform*, qui est très efficace lorsque les

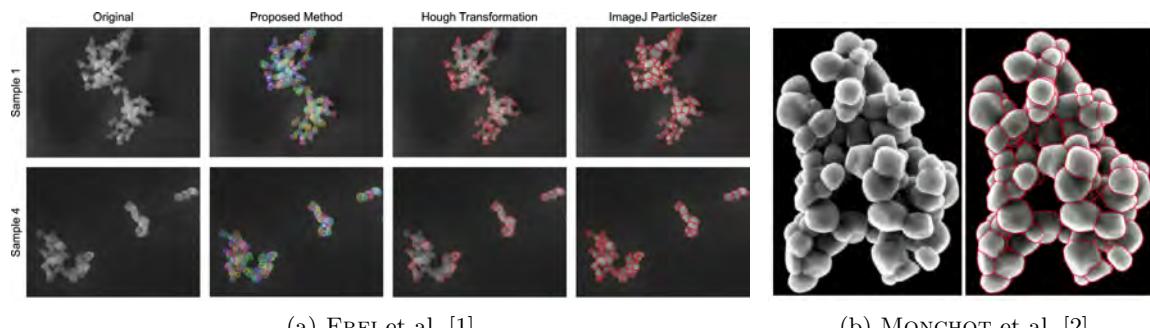
particules à détecter sont quasi-sphériques, comme c'est souvent le cas à l'échelle nanométrique. Bien que cette technique de détection de cercles soit assez ancienne, elle est encore très efficace et souvent utilisée.

2.2.4.3 Segmentation d'image et caractérisation : Deep-Learning

Avec l'augmentation constante de la puissance de calcul disponible, de plus en plus d'articles récents proposent d'utiliser non seulement des techniques d'apprentissage automatique pour la classification des objets, mais aussi des techniques d'apprentissage profond pour le traitement d'images et la reconnaissance des formes, comme l'indique le Tableau 2.3 et l'illustre la Fig. 2.4.

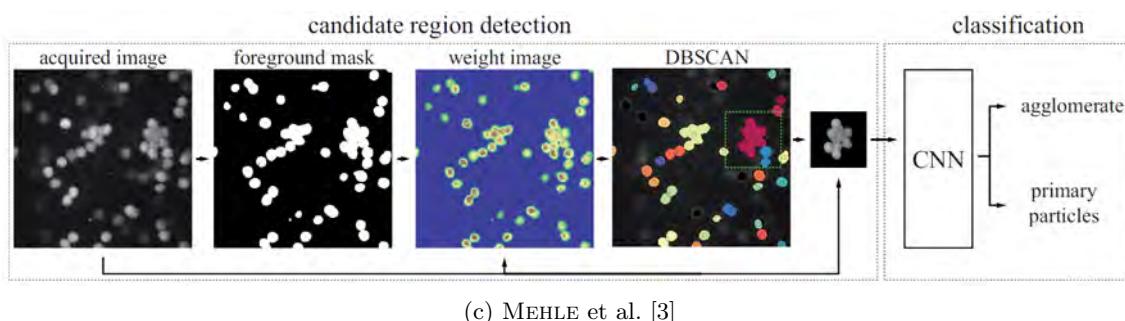
Apprentissage profond & Apprentissage automatique						
Référence	Année	Modèle	Exactitude	Taille (μm)	Type	Imagerie
FREI et al. [1]	2020	Mask R-CNN	0.96	—	Nanopoudres	SEM
MONCHOT et al. [2]	2021	Mask R-CNN	0.95	$5 \cdot 10^{-1}$	TiO ₂	SEM
RÜHLE et al. [56]	2021	GAN & U-Net	0.73 – 0.90	2	TiO ₂	TEM, SEM
LINS et al. [57]	2022	Mask R-CNN	0.84	10^2	Cristaux d'alanine	OM
MEHLE et al. [3]	2017	DBSCAN & CNN	0.93	10^3	Granulés pharma.	OM

TABLE 2.3 – Liste d'articles utilisant des techniques d'apprentissage profond pour la reconnaissance, la segmentation et la classification de formes. La mesure d'exactitude (*accuracy* en anglais) est une mesure de la performance de la segmentation et la taille des agrégats correspond à la taille moyenne des objets étudiés dans chacun des articles.



(a) FREI et al. [1]

(b) MONCHOT et al. [2]



(c) MEHLE et al. [3]

FIGURE 2.4 – Illustration des méthodes de caractérisation d'agrégats de TiO₂ proposées par FREI et al. [1] (a) et MONCHOT et al. [2] (b) en utilisant un modèle de segmentation Mask R-CNN et de la méthode de segmentation et de classification proposée par MEHLE et al. [3] (c) pour des granulés pharmaceutiques en utilisant des réseaux de neurones convolutifs.

Ces méthodes sont presque exclusivement basées sur l'utilisation de réseaux neuronaux convolutifs (CNNs) pour la segmentation automatique d'images, l'architecture Mask R-CNN étant de loin la plus populaire (FREI et al. [1], MONCHOT et al. [2] et LINS et al. [57]). Il s'agit d'un modèle particulièrement efficace pour la détection d'objets et la segmentation par instance (chaque objet étant segmenté de manière individuelle). D'autres modèles populaires de segmentation sémantique (ou par labels/classes) et basés sur l'architecture U-Net sont également utilisés (RÜHLE et al. [56]), car leur efficacité et leur robustesse dans la détection des contours et de motifs particuliers est bien établie [58]. Dans le même article, ces modèles sont comparés à des réseaux génératifs antagonistes (ou GANs pour *Generative Adversarial Networks*), et les performances de ces derniers sont légèrement supérieures.

Pour sa part, MEHLE et al. [3] propose un flux de travail (*workflow*) dans lequel les zones d'intérêt d'une image sont déterminées à l'aide de l'algorithme DBSCAN [59]. Un CNN est ensuite utilisé pour détecter les particules primaires et classer les agrégats de granulés pharmaceutiques en fonction de leur taille et de leur morphologie.

Les techniques d'analyse et de classification d'images basées sur l'apprentissage automatique et/ou l'apprentissage profond ont de nombreuses applications dans le secteur médical, ainsi que dans les domaines pharmaceutique et agroalimentaire, où le contrôle de la qualité, les techniques non invasives et non destructives, ainsi que les applications en temps réel sont particulièrement recherchées.

2.2.4.4 Classification

La classification des objets connaît une croissance rapide. Grâce aux avancées récentes en apprentissage automatique et en apprentissage profond, de nombreuses techniques ont émergé. L'analyse d'images, qui permet de calculer diverses caractéristiques morphologiques, produit de nombreuses valeurs numériques. Parmi les méthodes couramment utilisées pour classer des agrégats ou des agglomérats au sein d'une population hétérogène, l'analyse en composantes principales (ACP) se distingue particulièrement dans la littérature.

Analyse de Composantes Principales (ACP ou PCA)

ÅLANDER et al. [60] appliquent une ACP à un ensemble de descripteurs morphologiques d'agglomérats de cristaux de paracétamol pour classer les échantillons en fonction des différents solvants utilisés, et conclut que seuls deux descripteurs (l'un 2D et l'autre 3D) sont nécessaires pour les distinguer avec précision. Parallèlement, HUO et al. [46] utilisent une ACP pour contrôler le processus d'agglomération des cristaux KDP à partir de deux images consécutives, en combinaison avec l'algorithme des plus proches voisins approximatifs (*approximate nearest neighbor* [61]) pour assurer la cohérence des résultats obtenus d'une image à l'autre. Enfin, DE TEMMERMAN et al. [62] utilisent une ACP pour réduire un ensemble de 23 caractéristiques morphologiques à un sous-ensemble de trois classes (taille, forme et topologie de surface) dans le but de différencier les agrégats de silice amorphe en fonction du processus de production et des paramètres opératoires. La mise en œuvre d'une ACP présente l'avantage de ne pas nécessiter de processus d'apprentissage. En revanche, cette technique est parfois trop lente et/ou nécessite trop de puissance de calcul pour être utilisée directement dans des applications en temps réel ou sur des systèmes embarqués.

Analyse Factorielle Discriminante (AFD ou DFA)

FARIA et al. [63] combinent l'analyse d'image avec une AFD [64] pour classer automatiquement des agglomérats de cristaux de saccharose en fonction de leur forme et d'autres caractéristiques morphologiques, telles que leur degré d'agglomération. Les résultats obtenus sont assez bons, avec une concordance de l'ordre de 90% entre les données classées automatiquement et manuellement. Cette technique ne nécessite pas de phase d'apprentissage et peut être facilement adaptée au contrôle de qualité dans les industries agroalimentaires et pharmaceutiques.

Réseau de neurones artificiels

Les réseaux de neurones sont également utilisés pour classer les agrégats ou agglomérats en fonction de leurs caractéristiques morphologiques (cf. ROS et al. [65]). BERNARD-MICHEL et al. [66] utilise un réseau de neurones pour classer des cristaux de chlorure de potassium en fonction de leur morphologie, en utilisant les descripteurs de Fourier et des descripteurs de concavité morphologique comme caractéristiques principales. En particulier, le modèle proposé distingue les différentes formes de cristaux et de cristaux agglomérés. Pour leur part, FREI et al. [67] proposent d'entraîner des réseaux de neurones pour classer des images de TEM en fonction de la morphologie des agrégats de particules avec différentes PSD (distribution de la taille des particules), coefficients de transmission ou de déformation.

Machine à vecteurs de support (SVM)

OCHSENBEIN et al. [45] proposent d'utiliser des techniques de classification basées sur les caractéristiques morphologiques des agrégats de cristaux d'acide L-glutamique pour les détecter automatiquement et contrôler le processus d'agglomération. La classification mise en œuvre est basée sur la technique d'apprentissage automatique appelée *Support Vector Machine* (SVM) et permet de caractériser les agglomérats en estimant leur volume. La méthode semble particulièrement efficace en raison de la nature non-linéaire de la séparation des données permise par un modèle de classification.

HUO et al. [68] utilisent une *Spectral Regression Kernel Discriminant Analysis* (SRKDA), la *linear minimum distance classification* (LMDS) ainsi qu'une ACP pour définir un modèle de classification des agglomérats de cristaux d'acide L-glutamique. De nombreuses caractéristiques morphologiques et descripteurs de Fourier sont calculés et une ACP est appliquée pour réduire la dimensionnalité du problème. Le modèle utilisé pour classer les agglomérats en fonction de leur forme est un SVM, avec un taux de précision de 96% pour la reconnaissance des agglomérats, ce qui est dans la moyenne haute, et un temps de traitement d'environ 8 s sur une machine personnelle, ce qui est relativement rapide.

Arbre de décision

FERNANDEZ MARTINEZ et al. [69] proposent une méthode originale de classification des agrégats de nanoparticules de noir de carbone (*carbon black*) par analyse d'image, basée sur leurs caractéristiques morphologiques. De nombreuses caractéristiques de taille et de forme sont mesurées, ainsi que des descripteurs de Fourier. Une ACP est réalisée pour réduire la dimensionnalité du problème, et les agrégats sont ensuite classés à l'aide d'arbres

de décision utilisant des algorithmes évolutionnistes (*evolutionary algorithms* [70]). L'exactitude des résultats est de l'ordre de 75%, ce qui est considéré comme plutôt satisfaisant.

Dans le cas très spécifique des agrégats de nanoparticules de *carbon black*, la norme ASTM D3849-07 identifie un certain nombre de caractéristiques qui ont un effet significatif sur les propriétés physiques des agrégats. Les agrégats de nanoparticules de noir de carbone sont alors généralement classés en quatre groupes différents en fonction de leur morphologie (sphéroïdale, ellipsoïdale, linéaire et ramifiée). FERNANDEZ MARTINEZ et al. [69] adoptent également cette classification définie par LÓPEZ-DE-URALDE et al. [71], et qui propose une catégorisation automatique par apprentissage automatique avec une exactitude allant de 49% à 84%.

2.2.4.5 Caractérisation & Évaluation du processus d'agrégation

Réseau complexe

MACHADO et al. [72] proposent une approche basée sur l'utilisation de réseaux complexes pour analyser le processus d'agglomération d'agrégats de nanoparticules d'or. Les réseaux complexes sont représentés par des graphes, où chaque sommet est une particule primaire et où deux sommets sont connectés s'ils font partie du même agrégat. La structure des agrégats est donc étroitement liée à la topologie des graphes, et de nombreux indicateurs de structure sont définis, tels que la silhouette, qui est calculée en fonction du nombre de sommets adjacents et de la distance par rapport aux graphes voisins. Une mesure de la cohésion interne des agrégats et de leur séparation dans l'espace est ainsi définie. La méthode est robuste même lorsqu'il y a un grand nombre de particules primaires, ce qui est une limitation courante des méthodes conventionnelles.

Indice d'agglomération

D'un point de vue théorique, MATSUTANI et al. [73] proposent un nouvel indice géométrique appelé γ_{agg} , lié au nombre d'Euler et obtenu par analyse d'image, pour estimer le degré d'agglomération d'un ensemble de particules primaires. L'avantage de cette méthode est qu'elle peut être appliquée entièrement à partir de mesures globales obtenues par analyse d'image et ne nécessite de connaître la position des centres des particules, comme c'est le cas pour l'indice de Clark-Evans PETRERE [74], qui est également associé au degré d'agglomération.

2.2.5 Discussion

De manière générale, ce sont majoritairement les caractéristiques morphologiques 2D qui sont mesurées, les mesures de caractéristiques 3D étant principalement réalisées par Tomographie à rayons X, comme le proposent JIN et al. [75] pour des granulats de roche ou PASHMINEHAZAR et al. [76] pour des agglomérats de maltodextrine, ou par des méthodes stéréoscopiques à prises de vues multiples, comme les dispositifs à deux caméras évoqués à la section 2.2.3.2 ou ZHAO et al. [77] qui proposent d'utiliser trois caméras afin de créer un indice de forme à partir des mesures morphométriques 3D pour classer des granulats de roche dans une base de données.

En ce qui concerne les articles s'intéressant plus particulièrement aux agrégats de latex, ces derniers se focalisent principalement sur la dimension fractale, comme c'est le cas de LIAO et al. [78] qui étudient des images réalisées par microscopie fluorescente

confocale (CLSM), MARTÍNEZ-PEDRERO et al. [79] avec des images de TEM ou encore TANG et al. [80] qui utilisent un microscope optique à haute définition. Les agrégats de latex étudiés sont alors de l'ordre de quelques micromètres, ce qui explique ce choix de caractéristique morphologique. Pour ce qui est de GUÉRIN et al. [33, 34], les agrégats de latex sont caractérisés directement par un dispositif *Malvern Instruments Morphologi G3*, qui n'effectue également que des mesures 2D.

2.3 Géométrie stochastique et stéréologie

Dans cette section, différents outils basés sur des méthodes stéréoscopiques ou de géométrie stochastique utilisées dans la littérature afin d'estimer les caractéristiques 3D d'un objet ou d'une population d'objets à partir d'information 2D sont présentés.

La stéréologie [81] est une discipline qui englobe un ensemble de techniques utilisées pour quantifier des structures de dimension $n+1$ (où $n \in \mathbb{N}$) à partir de données obtenues en dimension n ou inférieure. Par exemple, en utilisant des images de coupes planes ou des projections d'un objet 3D, la stéréologie permet d'estimer des propriétés telles que le volume ou la surface de cet objet. Ces méthodes sont particulièrement utiles dans le cas d'images issues de tomographie (stéréologie en coupe) ou de projections orthographiques 2D produites, par exemple, par un *shadowgraph* (stéréologie projective).

2.3.1 Stéréologie en coupe

Une méthode courante pour estimer le volume d'un objet 3D est la méthode de Cavalieri [82, 83]. Cette méthode consiste à diviser l'objet en n tranches d'épaisseur T , puis à calculer le volume total V en sommant les volumes V_i de chaque tranche, où $V_i = A_i \times T$. Le volume total est donné par :

$$V = \sum_{i=1}^n T \times A_i \quad (2.1)$$

Bien que cette méthode soit avantageuse car elle ne fait aucune hypothèse sur la forme de l'objet, elle est invasive, nécessitant des coupes séries, et suppose que l'on n'a pas déformé l'objet en le découplant.

Il est également possible d'obtenir des estimations du volume à partir de coupes aléatoires, avec des relations analytiques dans le cas d'objets simples comme des sphères. Par exemple, pour une sphère de rayon R , une coupe produit un disque de rayon $r \leq R$. La densité de probabilité des rayons des disques obtenus est donnée par :

$$f_R(r) = \frac{1}{R} \frac{r}{\sqrt{R^2 - r^2}} , \quad r \in [0; R[\quad (2.2)$$

Cette approche indique que les plus grands rayons des disques sont probablement égaux à R , bien que cela ne permette pas de déterminer de manière certaine le rayon R à partir d'une coupe aléatoire.

Pour des objets sphériques monodisperses de rayon R , les rayons des disques obtenus par coupe sont tous inférieurs ou égaux à R . Pour des objets polydisperses, la distribution des tailles peut être estimée par la méthode itérative de Saltykov [84, 85].

Enfin, des études ont également été menées sur des objets non sphériques. SAHAGIAN et al. [86] ont étudié des systèmes d'objets parallélépipédiques et ellipsoïdaux, utilisant le diamètre de Feret moyen comme descripteur. JAGNOW et al. [87] ont estimé la distribution de taille d'objets 3D non convexes en utilisant l'aire comme descripteur et HIGGINS [88] a utilisé la longueur de la boîte englobante pour des objets parallélépipédiques.

2.3.2 Stéréologie projective

La stéréologie projective vise à relier les propriétés d'un objet en dimension $n+1$ à des mesures effectuées sur des projections, et donc, en dimension n . Par exemple, UNDERWOOD [89] a montré que le volume V d'un objet 3D pouvait être estimé à partir de mesures effectuées sur des projections 2D. Ainsi, le volume V , la surface S et la longueur moyenne d'interception (MIL) L_3 de lignes aléatoires à travers l'objet (selon une loi uniforme) sont reliés par l'équation suivante :

$$L_3 = \frac{4V}{S} \quad (2.3)$$

Pour les objets convexes, la surface S peut être exprimée en fonction de l'aire projetée moyenne \bar{A} à l'aide de la formule de Cauchy [90] :

$$S = 4\bar{A} \quad (2.4)$$

Ainsi, le volume V d'un objet convexe peut être calculé à partir de \bar{A} et L_3 :

$$V = \bar{A} \times L_3 \quad (2.5)$$

Toutefois, L_3 n'est pas une mesure obtenue directement à partir de projections, mais d'interceptions dans l'espace. Par exemple, pour une sphère, L_3 peut être reliée au diamètre de Feret projeté moyen \bar{F} [91] et s'exprime de la manière suivante :

$$L_3 = \frac{2}{3}\bar{F} \quad (2.6)$$

et le volume d'une sphère de rayon R peut ainsi être estimé par :

$$V = \frac{2}{3}\bar{F} \times \bar{A} \quad \text{c'est-à-dire} \quad \frac{2}{3} \times (2R) \times (\pi R^2) = \frac{4}{3}\pi R^3 \quad (2.7)$$

En effet, dans le cas monodispersé, la distribution de taille est facile à obtenir, le rayon R des sphères est égal à r , le rayon des disques projetés. Dans le cas polydispersé, les rayons des disques projetés donnent de la même manière celui des sphères correspondantes, et des algorithmes tels que la transformée de Hough [21] ou d'autres méthodes de détection de cercles [92], peuvent se révéler efficaces.

2.3.2.1 Méthodes avec a priori sur la forme des objets

Dans le cas où l'on suppose la forme des objets 3D connues (sphères, ellipsoïdes, pyramides, etc...) il est parfois possible de complètement caractériser la morphologie 3D de ces derniers à partir de projections 2D. Par ailleurs, des relations analytiques peuvent parfois être établies. En effet, la distribution de taille d'un ensemble de particules sphériques peut être déterminée à partir d'images de projections si le taux de recouvrement n'est pas trop élevé, et qu'il est possible de distinguer chacun des disques. En revanche, pour des objets non sphériques, l'estimation du volume à partir de projections est plus complexe et nécessite souvent des modèles spécifiques pour prendre en compte les différentes formes possibles.

Pour des objets convexes tels que des pyramides, des pavés ou encore des ellipsoïdes, PRESLES et al. [93] et PRESLES et al. [94] proposent une méthode pour estimer leur taille et leur forme à partir de projections 2D en utilisant des mesures géométriques et morphométriques des ombres projetées, suivies d'une estimation par maximum de vraisemblance.

En ce qui concerne les cylindres et les ellipsoïdes, VICKERS [95] dérive la distribution de l'aire projetée et propose des formules adaptées pour le calcul numérique. LANGLARD

et al. [96, 97] se basent sur ces formules pour proposer une méthode pour estimer les caractéristiques d'un sphéroïde aléatoire à partir de ses projections 2D. Cette dernière repose sur l'utilisation d'un polynôme aléatoire de degré deux et d'une inférence Bayésienne, et permet de déduire les paramètres 3D des sphéroïdes avec un faible biais et une variance raisonnable, à partir de mesures géométriques effectuées sur leurs ellipses projetées.

2.3.2.2 Méthodes sans *a priori* sur la forme des objets

Dans le cas où aucune hypothèse n'est effectuée quant à la forme des objets 3D, l'estimation des caractéristiques morphologiques 3D est bien plus complexe, et n'est en général possible que pour des objets de l'ordre de la centaine de micromètres au minimum. En effet, les méthodes disponibles commencent généralement par obtenir une distribution granulométrique de référence par tamisage, qui est ensuite utilisée pour convertir les mesures des images de projections en distribution granulométrique correspondante. L'objectif est de déterminer la distribution en masse des objets 3D à partir des images projetées.

OUTAL et al. [98] ont utilisé cette méthode pour les fragments de roches, en les caractérisant par leur aire projetée, tout comme KING [99] et VALLEBUONA et al. [100]. De leur côté, KING [101] et LIN et al. [102] ont mesuré des distributions de longueur de corde. Enfin, pour améliorer les méthodes de conversion, AL-THYABAT et al. [103] ont utilisé le diamètre de Feret moyen et le diamètre du cercle équivalent (ECD), tandis que KEMENY [104] a utilisé les axes principaux de l'ellipse équivalente.

Dans le cas qui nous intéresse, à savoir les agrégats de latex, les objets 3D sont de forme inconnue et complexe. Néanmoins, les méthodes proposées ci-dessus se révèlent plutôt inadaptées, car elles supposent qu'il est possible d'effectuer un éventuel tamisage, et de mesurer les caractéristiques projetées des objets à l'aide de techniques souvent invasives. Pour cette raison, d'autres méthodes probabilistes, et basées sur l'utilisation de modèles sont proposées.

2.3.2.3 Utilisation d'un modèle 3D

Cette troisième approche suppose à nouveau de faire des hypothèses quant à la forme générale des objets 3D. Néanmoins, en utilisant des modèles géométriques stochastiques, les objets générés sont aléatoires, ainsi que leur forme.

MAERZ [105] et SCHLEIFER et al. [106] modélisent par exemple des granulats de roches par des sphères et utilisent respectivement le diamètre du cercle équivalent (ECD) et le diamètre du disque inscrit comme descripteurs. KEMPKES et al. [107] et EGGLERS et al. [108] étudient des cristaux d'acides ascorbique modélisés par des parallélépipèdes rectangles de longueurs caractéristiques $H = W < L$, leurs projections étant caractérisées par les diamètres de Feret maximum et minimum et l'utilisation de deux caméras orthogonales par KEMPKES et al. [109] permet d'éliminer l'hypothèse $H = W$. LARSEN et al. [110] développent une méthode pour estimer la distribution granulométrique de cristaux de glycine, modélisés par des parallélépipèdes rectangles surmontés de pyramides.

Une autre application des techniques utilisant un modèle géométrique stochastique 3D a été proposée par LANGLARD et al. [111]. Cette dernière combine la modélisation stochastique 3D d'un écoulement diphasique par une population d'ellipsoïdes avec une optimisation numérique pour générer des images analogues aux acquisitions expérimentales, obtenant ainsi des informations géométriques statistiquement équivalentes. Cette approche a été enrichie par DIA et al. [112], qui ont développé une méthode pour extraire des informations 3D à partir de projections 2D de particules sphériques. En utilisant un modèle

géométrique stochastique et un réseau de neurones convolutif (CNN), cette technique prédit avec précision les distributions de taille de objets 3D, même dans des environnements denses, tout en restant efficace sur le plan computationnel.

2.3.3 Discussion

Dans le cadre de cette thèse, traitant de la caractérisation morphologique d'agrégats de nanoparticules de latex, caractérisés par leur complexité et variabilité morphologique, l'approche basée sur l'utilisation de modèles géométriques stochastiques s'avère la plus adaptée pour l'estimation des caractéristiques 3D à partir de mesures 2D projetées. Contrairement aux autres méthodes proposées, qui nécessitent souvent des hypothèses simplificatrices sur la forme des objets ou des dispositifs de mesure invasifs ou destructifs, les modèles géométriques stochastiques permettent de capturer la diversité morphologique des agrégats de manière plus réaliste et précise, à condition qu'ils soient suffisamment flexibles. En effet, l'idée sous-jacente est qu'il est possible d'ajuster les paramètres des modèles afin de faire correspondre les caractéristiques 2D projetées des objets générés à celles des projections 2D des objets réels, assurant ainsi une représentation fidèle des propriétés géométriques des agrégats.

2.4 Modélisation d'agrégats et d'objets granulaires

Cette section propose un bref aperçu de l'état de l'art concernant les modèles permettant de modéliser des agrégats et/ou des agglomérats les plus adaptés à une approche géométrique stochastique. En particulier, on se concentrera sur deux types de modèles : les modèles par empilement de particules primaires, et les modèles proposant un maillage obtenu par déformation et/ou subdivision d'un objet de base.

2.4.1 Modélisation par empilement

Dans le domaine de la modélisation d'agrégats ou d'agglomérats, de nombreuses méthodes existent. L'une des plus populaires consiste à empiler des particules primaires, soit par un processus itératif, soit en faisant appel à des interactions entre particules.

Simulation de type Monte Carlo

MORÁN et al. [4] proposent un modèle basé sur les simulations de dynamique de Langevin pour définir une nouvelle distance persistante λ_p et un pas de temps Δ_t correspondant, ainsi qu'une probabilité p_i de déplacement des particules, ces dernières étant des sphères dures. Ces améliorations visent à accroître la précision des méthodes de Monte Carlo pour simuler l'agglomération de nanoparticules en suspension. De leur côté, CHAKRABARTY et al. [113] présentent un code de simulation d'agrégats appelé FracMAP, utilisé pour générer des agglomérats quasi-fractals en 3D et ainsi que leurs projections 2D pixelisées. La méthode repose sur une simulation de Monte Carlo, qui permet de construire des agglomérats en contrôlant la dimension fractale, le préfacteur, la densité et la distribution de taille des particules élémentaires. Elle permet également d'analyser les propriétés morphologiques des images projetées. KADOTA et al. [114] utilisent des simulations de type Monte Carlo pour modéliser l'agrégation de particules de carbonate de calcium. Le modèle examine comment les conditions de carbonatation influencent la formation et la morphologie des agrégats. En particulier, il simule la transition de particules nanométriques rhombiques

à des granulés en forme de fuseau, reliant ainsi l'agrégation des particules primaires aux conditions expérimentales. Enfin, SCHMID et al. [115] utilisent un modèle de simulation Monte Carlo pour étudier la formation d'agrégats, que l'on retrouve dans les processus de fabrication de nanoparticules, en intégrant simultanément les processus de coagulation et de frittage. Le modèle repose également sur l'agrégation cluster-cluster contrôlée par la diffusion pour la coagulation et modélise le frittage par le chevauchement successif des particules primaires sphériques, tout en conservant la masse totale des agrégats.

Algorithmes d'agrégation de type cluster-cluster

MORÁN et al. [5] se basent sur un algorithme d'agrégation de type *cluster-cluster* pour générer des structures fractales de particules primaires polydispersées, permettant d'ajuster la dimension fractale et le préfacteur avec une erreur relativement faible, tout en étant efficace sur le plan computationnel. THOUY et al. [116] présentent un modèle d'agrégation cluster-cluster pour construire des agrégats fractals aléatoires avec une dimension fractale ajustable sur un réseau d-dimensionnel. Le modèle permet de contrôler la dimension fractale en agglomérant des agrégats de même taille à des distances spécifiques, couvrant une gamme de dimensions fractales dépendant de la dimension du réseau. MEAKIN [117] développe un modèle 3D d'agrégation cluster-cluster limité par la diffusion (*Diffusion-Limited Aggregation* [118]), où les particules et les clusters peuvent se déplacer et s'agréger, pour étudier l'agrégation de particules métalliques. Deux versions du modèle sont explorées : dans la première, le coefficient de diffusion des clusters est indépendant de leur taille, tandis que dans la seconde, seuls les plus petits clusters peuvent diffuser. L'intérêt de ces deux versions réside dans l'analyse comparative de l'influence de la taille des clusters sur les propriétés géométriques et la dynamique de l'agrégation des agrégats formés. Un modèle proposé par ALVES et al. [119] utilise l'agrégation cluster-cluster pour simuler la croissance des cellules animales en culture. Les particules se reproduisent de manière aléatoire et se déplacent en réponse à des signaux chimiques, ce qui influence les lois d'évolution de la taille et du nombre de clusters.

Modèles de Croissance

Un modèle de croissance proposé par GUESNET et al. [7] génère des structures d'agrégats poreux et fractals en ajustant la probabilité d'inactivation des particules, permettant de reproduire diverses propriétés microstructurales (rayon de giration et dimension fractale) d'agrégats de silice mesurées par diffusion de rayons X aux petits angles. De leur côté, NICOLÁS-CARLOCK et al. [120] proposent un modèle d'agrégation de particules capable de générer une variété d'agrégats naturels avec des dimensions fractales définies en amont, en révélant les contributions entropiques et énergétiques spécifiques à la fractalité et la morphologie des agrégats.

Modèles basés sur la dynamique moléculaire

DONG et al. [121] utilisent la dynamique moléculaire (MD) pour modéliser et analyser l'interface entre l'asphalte et les agrégats minéraux dans le béton bitumineux. Le modèle, basé sur des sphères dures monodispersées, simule les interactions moléculaires à l'interface. La simulation permet de comprendre comment les molécules ayant des pôles électriques influencent la stabilité de l'interface et les mécanismes de dégradation dus à l'humidité.

ZHELEZNYAKOVA [122] proposent également un modèle basé sur la dynamique moléculaire pour générer des grains 3D de formes irrégulières par agglomération dynamique de sphères polydisperses, avec un paramètre permettant de contrôler le chevauchement entre les particules pour ajuster la morphologie. Les agrégats générés, représentant du gravier de quartz fin et du sable de silice, sont empaquetés aléatoirement dans un conteneur complexe et validés expérimentalement via des tests de l'angle de repos pour s'assurer de leur correspondance avec les matériaux granulaires réels. Néanmoins, bien que cette approche soit intéressante, elle est peu adaptée dans un contexte géométrique stochastique en raison de la lenteur de génération d'une population d'objets statistiquement représentative.

Modèles Géométriques

Contrairement aux autres méthodes, les modèles géométriques stochastiques sont pensés pour pouvoir générer rapidement et efficacement des objets aléatoires à la morphologie contrôlée. MOREAUD et al. [123] proposent d'utiliser des modèles stochastiques multi-échelles pour analyser les images 3D de matériaux complexes tels que des nanocomposites de *carbon black* ou encore des microstructures de nanoplaquettes d'alumine, en fournissant une caractérisation précise de leur morphologie. Un autre modèle proposé par MOREAUD et al. [124] permet d'ajuster la dimension fractale d'objets composés de grands systèmes

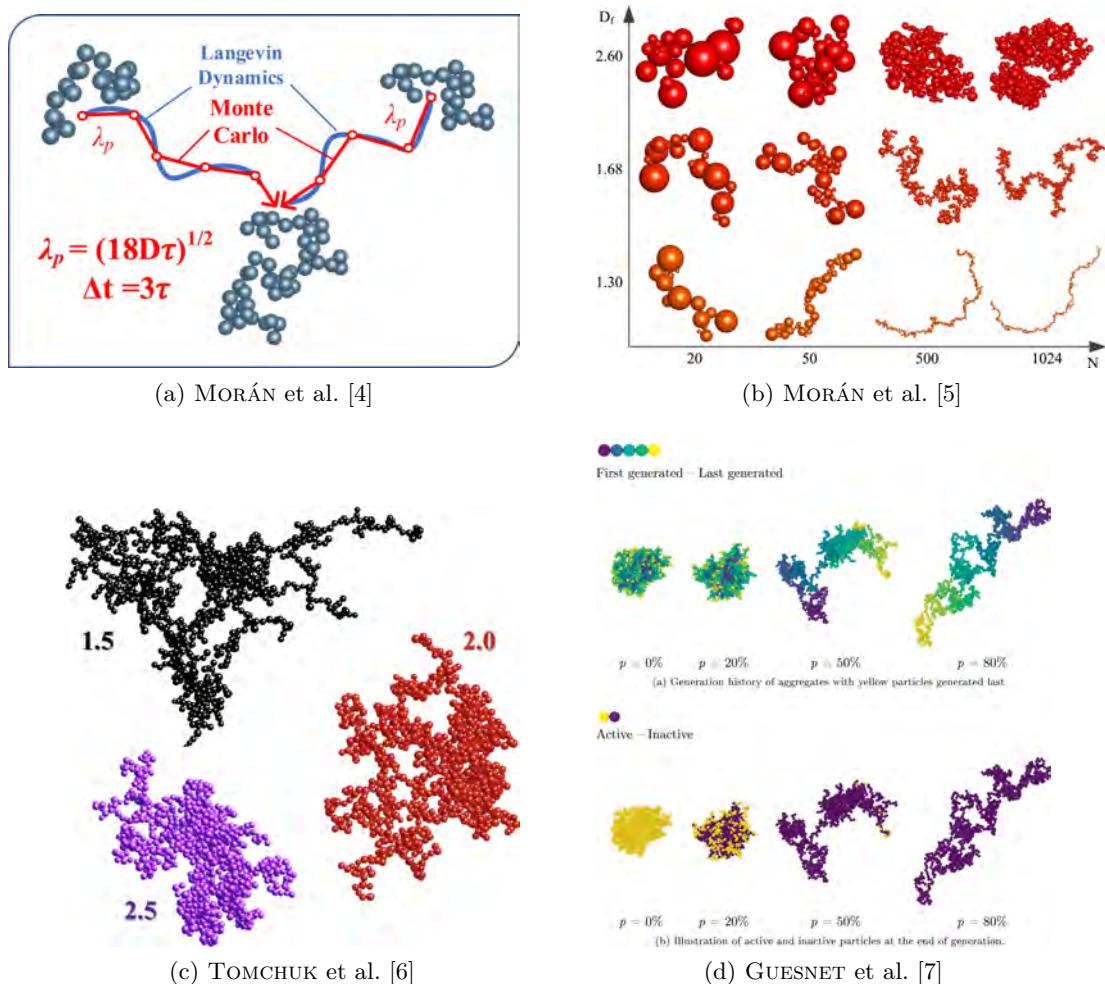


FIGURE 2.5 – Illustration d'agrégats générés par les modèles d'empilement de sphères dures proposés par MORÁN et al. [4, 5], TOMCHUK et al. [6] et GUESNET et al. [7].

de particules agrégées (plusieurs milliers de particules) en fonction des paramètres du modèle, permettant une simulation efficace des propriétés morphologiques et texturales des solides poreux. Ce dernier modèle utilise tant des sphères dures polydisperses que des plaquettes comme particules primaires, une version optimisée de l'algorithme étant disponible dans le cas de sphères monodisperses. JEULIN [125] propose un modèle basé sur le modèle des feuilles mortes pour générer des empilements denses de grains non chevauchants, permettant de simuler des milieux aléatoires avec des grains convexes. Même si ce modèle n'est pas initialement conçu pour des agrégats, il offre une approche géométrique pour l'empilement efficace de particules.

Un autre modèle proposé par TOMCHUK et al. [6], utilisant un algorithme non-cinétique hors-lattice pour construire des clusters fractals stochastiques et permettant d'ajuster la dimension fractale des objets, génère des agrégats de particules polydisperses, fournissant une description précise des données de diffusion aux petits angles. WOZNIAK et al. [126] comparent deux méthodes pour dériver les paramètres morphologiques des échantillons multi-fractals d'agrégats de particules d'aérosols à partir d'images TEM. Leur étude se concentre sur les agrégats formés par empilement de sphères dures en utilisant un modèle d'agrégation de type limitée par la diffusion (DLA), analysant la dimension fractale et les propriétés morphologiques résultantes à travers des méthodes de comptage multi-échelles et de corrélation.

2.4.2 Modélisation par déformation et/ou subdivision

Cette section explore diverses méthodes de modélisation des agrégats et agglomérats par déformation et subdivision, permettant de générer des structures complexes et réalistes.

Descripteurs de Fourier

MOLLON et al. [11] proposent une méthode combinant la théorie des champs aléatoires et les descripteurs de Fourier pour générer des particules granulaires 3D avec des morphologies complexes et contrôlées. La méthode utilise la tessellation de Voronoï contrainte pour empaqueter les particules, permettant une caractérisation précise des formes et de leurs distributions. Une autre méthode proposée par MOLLON et al. [8] consiste à générer aléatoirement des grains de sable 3D en utilisant à nouveau les descripteurs de Fourier. La méthode crée la surface externe de la particule à partir de trois contours 2D orthogonaux et a été validée sur plusieurs types de sable, montrant sa capacité à reproduire des formes réalistes d'objets granulaires.

Tessellation de Voronoï

ZHANG et al. [10] présentent une méthode numérique pour générer un modèle mésoscale de béton armé, contenant des agrégats de tailles et formes aléatoires basés sur la tessellation de Voronoi. Ce modèle inclut également des armatures, offrant une simulation réaliste des propriétés structurales du béton armé. ZHANG et al. [127] développent des modèles numériques pour générer virtuellement la microstructure 3D d'un mélange d'asphalte. Utilisant un diagramme de Voronoi, ces modèles simulent la conductivité thermique du mélange, tenant compte des caractéristiques morphologiques des phases dispersées (granulats grossiers et poches d'air). Un modèle 2D proposé par MOLLON et al. [128] utilisent

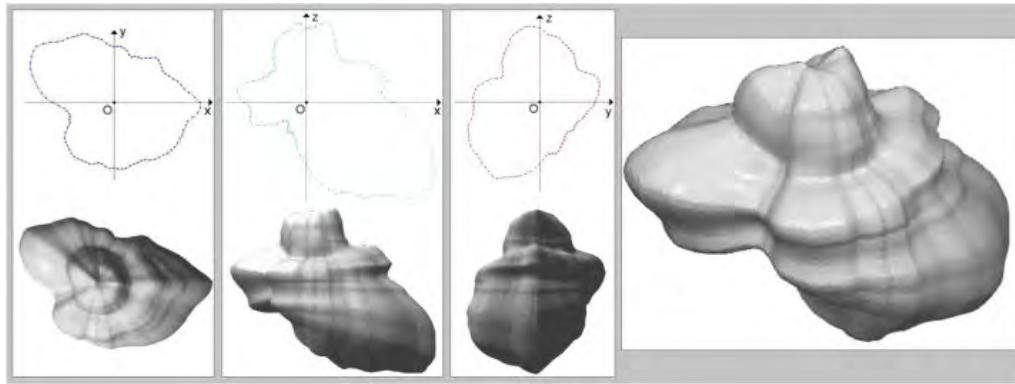


FIGURE 2.6 – Méthode proposée par MOLLON et al. [8] pour la génération 3D de particules aléatoires, basée sur trois contours 2D aléatoires générés à partir de descripteurs de Fourier et utilisés comme coupes transversales orthogonales.

une méthode basée sur les descripteurs de Fourier et la tessellation de Voronoi pour générer des échantillons réalistes pour la modélisation discrète de matériaux granulaires. Cette méthode permet de reproduire des caractéristiques spécifiques des particules telles que la distribution de taille, la densité, l'orientation, ainsi que des descripteurs de forme comme l'élongation ou encore la circularité.

Méthodes de subdivision de surface

WEI et al. [9] proposent une méthode de génération d'agrégats 3D basée sur la subdivision de surface, permettant de contrôler la concavité et la texture des agrégats. En partant de formes convexes de base calculées à partir de l'enveloppe convexe [129] d'un ensemble de points aléatoires, la méthode applique des subdivisions répétées pour ajouter des détails géométriques. Des simulations par éléments finis montrent que l'augmentation de la concavité améliore le module dynamique du béton bitumineux.

Harmoniques sphériques

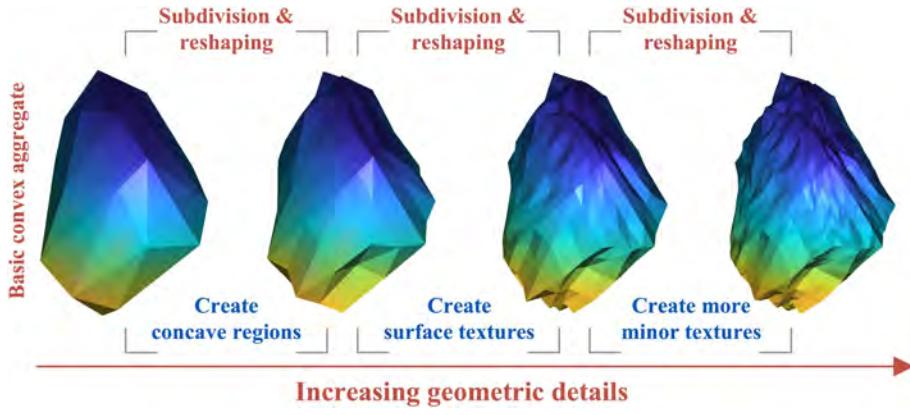
WEI et al. [12] décrivent une méthode de génération de formes de particules utilisant les harmoniques sphériques, permettant de créer des particules avec des caractéristiques morphologiques spécifiques à différentes échelles. Cette méthode rapide et robuste facilite l'étude des effets de la forme des particules sur les propriétés mécaniques des matériaux granulaires.

2.4.3 Discussion

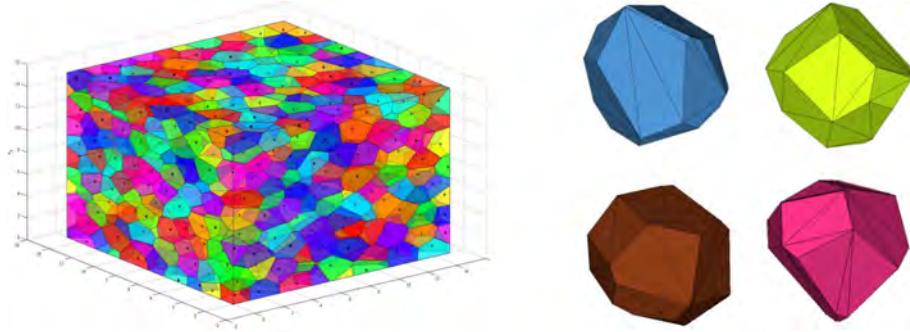
De manière générale, de très nombreux types de modèles existent pour modéliser des agrégats ou des agglomérats. Lors du choix d'un modèle, plusieurs questions se posent :

1. La modélisation des particules élémentaires est-elle nécessaire ?
2. La prise en compte de l'interaction entre les particules est-elle importante ?
3. La dimension fractale des objets à modéliser est-elle élevée ?

En effet, les agrégats de nanoparticules de latex étudiés sont composés de plusieurs milliers de particules élémentaires au minimum, et leur dimension fractale (cf. Chapitre 3) est en général assez élevée. Par conséquent, les modèles basés sur des empilements de sphères dures, par exemple, ne sont pas nécessairement les plus adaptés. En effet, il est

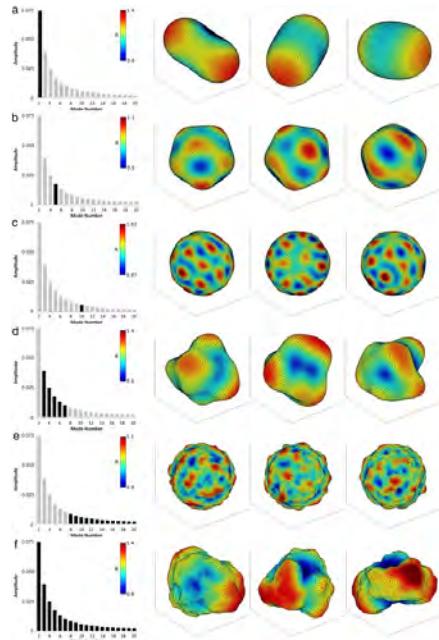


(a) WEI et al. [9]

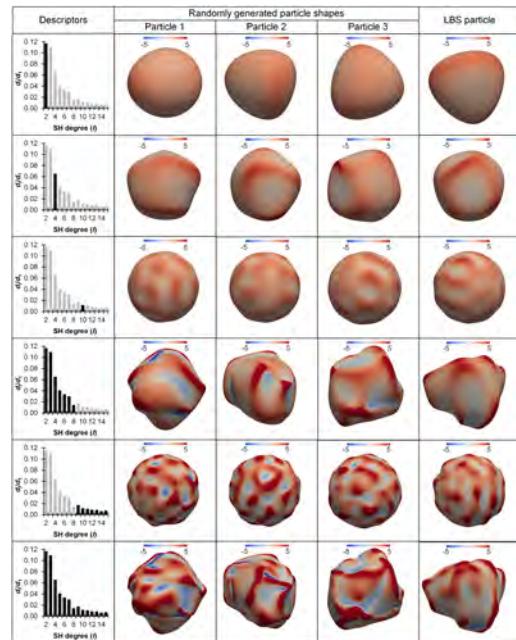


(b) ZHANG et al. [10]

FIGURE 2.7 – Illustration d'agrégats générés par la méthode de subdivision de surfaces proposée par WEI et al. [9] (a) et par le modèle basé sur une tessellation de Voronoi de ZHANG et al. [10] (b).



(a) MOLLON et al. [11]



(b) ZHANG et al. [10]

FIGURE 2.8 – Illustration d'agrégats générés par le modèle proposé par MOLLON et al. [11] mêlant descripteurs de Fourier et champs Gaussiens aléatoires (a) et par le modèle utilisant le concept d'harmoniques sphériques proposée par WEI et al. [12] (b).

rare qu'ils permettent de générer rapidement des agrégats de plusieurs milliers de particules élémentaires [124], et un compromis est souvent de considérer qu'une particule élémentaire du modèle représente un ensemble de particules élémentaires d'un agrégat réel, la finesse de la modélisation s'en trouvant réduite d'autant. Une autre raison de favoriser les modèles de déformation est le fait que la prise en compte des interactions entre les particules n'est pas nécessaire dans le cas d'un modèle géométrique stochastique, quel que soit son type. En revanche, les modèles par empilement sont particulièrement adaptés pour intégrer ces interactions, au prix d'un temps de calcul bien plus élevé.

Néanmoins, toujours dans le cadre d'une approche géométrique stochastique, le nombre de paramètres nécessaires au contrôle de la morphologie des objets est un critère de choix extrêmement important. Par conséquent, certaines approches, comme celles basées sur les descripteurs de Fourier [11] ou les harmoniques sphériques [12], qui utilisent un nombre très important de paramètres, peuvent poser problème et se révéler également inadaptées dans le cas de l'ajustement de ces derniers par un processus d'optimisation. De plus, les objets générés par les modèles basés sur des subdivisions de surface [9] ou une tessellation de Voronoi [10] peuvent être trop simples pour permettre de simuler la morphologie complexe des agrégats de latex.

Pour toutes ces raisons, trois modèles différents ont été développés dans le cadre de cette thèse. L'un basé sur un empilement de sphères dures monodisperses [130], l'autre sur la déformation d'un ellipsoïde à l'aide de champs gaussiens aléatoires [131], et le dernier proposant une approche duale [132], mêlant empilement de voxels et génération d'un maillage à la morphologie contrôlée, l'idée étant de proposer des modèles flexibles et capables de générer des objets 3D représentatifs des agrégats de latex le plus rapidement possibles.

2.5 Conclusion générale

L'analyse de l'état de l'art permet d'établir plusieurs constats.

- Il n'existe pas de consensus ni de nomenclature en ce qui concerne les caractéristiques à utiliser pour étudier la morphologie des agrégats, que ce soit par rapport à leur dénomination ou même leur définition, et ce, même au sein d'une même communauté scientifique. De grandes catégories peuvent être établies pour la classification de ces dernières : taille, forme, angularité et texture, même si les frontières sont parfois floues entre les trois dernières catégories.
- De nombreux types de modèles existent, avec des approches très différentes, certaines s'appuyant principalement sur les phénomènes physiques, et d'autres ayant une approche purement géométrique. Là encore, deux grandes catégories peuvent se dégager : les modèles consistant à agréger et/ou agglomérer des particules élémentaires, le plus souvent sphériques, et les modèles permettant de générer des objets aléatoires dans leur globalité, généralement sous forme d'un maillage, par des techniques de déformation et/ou de subdivision d'une forme de base. Cette thèse visant à utiliser des outils issus de la géométrie stochastique pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D de populations d'agrégats, les deux types d'approche peuvent être envisagées, les deux conditions nécessaires pour qu'un modèle soit utilisé dans ce cadre étant la rapidité d'une part, et la flexibilité d'autre part.
- En ce qui concerne la caractérisation d'agrégats par analyse d'image, de nombreuses techniques existent, l'étude bibliographique menée par THÉODON et al. [15] a permis de montrer que le domaine est en plein essor, notamment du fait

de l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, permettant de traiter aisément des images et des ensembles de données de grande taille, en particulier depuis l'avènement des techniques d'apprentissage automatique et d'apprentissage profond. Néanmoins, il est apparu que l'écrasante majorité des techniques proposées se limitaient à l'estimation de caractéristiques géométriques 2D, ce qui montre l'intérêt de la proposition de méthodes permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D.

Il est ainsi possible de constater que l'approche géométrique stochastique pour la caractérisation de la morphologie d'agrégats, et en particulier d'agrégats de nanoparticules de latex, devrait permettre de proposer une méthode nouvelle permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D à partir d'images 2D projetées. En ce qui concerne l'analyse d'image et la caractérisation morphologique 2D des images projetées, les nouvelles techniques basées sur l'utilisation de réseaux de neurones convolutifs développées ces dernières années (cf. Tableau 2.3) proposent de meilleurs résultats que les méthodes directes de segmentation ou de détection d'objets. L'approche géométrique stochastique se basant sur un modèle 3D pour estimer les caractéristiques morphologiques à partir de mesures 2D semble être la méthode la plus appropriée, les agrégats étudiés ayant une morphologie trop complexe pour être approximée par des objets simples tels que des sphéroïdes, pyramides, etc... ce qui disqualifie automatiquement la plupart des autres approches stéréoscopiques, sauf à simplifier grandement la forme des objets 3D.

Chapitre 3

Éléments théoriques

Contenu du chapitre

3.1	Introduction	30
3.2	Analyse d'image & Morphométrie	30
3.2.1	Caractérisation morphométrique	30
3.2.1.1	Caractéristiques de taille	30
3.2.1.2	Caractéristiques de forme	33
3.2.1.3	Caractéristiques d'angularité et de texture.	34
3.2.1.4	Caractéristique de structure	35
3.2.1.5	Choix de nomenclature	35
3.2.2	Mesures géométriques	36
3.2.2.1	Cas continu	36
3.2.2.2	Cas discret	37
3.2.3	Segmentation	39
3.2.3.1	Segmentation par la méthode d'Otsu	40
3.2.3.2	Seuillage adaptatif par filtre médian	40
3.2.3.3	Segmentation par un modèle d'apprentissage profond	41
3.3	Stéréologie projective	42
3.4	Génération d'objets aléatoires	43
3.4.1	Par empilement de particules élémentaires	43
3.4.1.1	Random Close Packing (RCP)	43
3.4.1.2	Modèles de Croissance (Growth Models)	43
3.4.1.3	Sequential Addition and Migration	44
3.4.2	Par déformation d'un maillage	44
3.4.2.1	Objets étoilés	45
3.4.2.2	Génération d'un champ Gaussien aléatoire	45
3.4.2.3	Déformation d'un maillage convexe par un champ Gaussien 3D aléatoire	47
3.4.2.4	Autres modes de déformation	47
3.5	Conclusion générale	48

3.1 Introduction

Ce chapitre propose un aperçu des définitions et des concepts théoriques nécessaires pour aborder avec sérénité les chapitres suivants. En particulier, les techniques classiques d'analyse d'image et de reconnaissance de forme sont présentées dans une première partie, ainsi que les caractéristiques morphologiques qui seront utilisées pour étudier les agrégats de latex. Des concepts généraux de stéréologie projective seront ensuite définis, et la dernière partie s'intéressera aux différents outils permettant de générer des objets aléatoires par empilement de particules primaires ou par déformation d'objets de base.

3.2 Analyse d'image & Morphométrie

3.2.1 Caractérisation morphométrique

Dans cette section, on s'intéresse à la façon dont la morphologie d'une forme 2D ou 3D peut être caractérisée de manière quantitative à travers des mesures géométriques. Lors de l'étude bibliographique réalisée sur 145 articles de recherche selon la méthode SLR, un certain nombre de caractéristiques morphologiques couramment utilisées pour caractériser des agrégats de latex ou des objets similaires ont été identifiées.

Par conséquent, les caractéristiques morphologiques qui seront considérées par la suite sont répertoriées dans le Tableau 3.1. Par ailleurs, la catégorie à laquelle appartient chacune des caractéristiques est indiquée dans la dernière colonne, cette classification étant discutée à la section 3.2.1.5. Ainsi, par exemple, on pourra parler de caractéristiques d'angularité ou de texture pour faire allusion à la circularité C et à la convexité Co lorsque l'on s'intéressera à la morphologie d'une forme 2D.

Pour une liste plus exhaustive des 45 caractéristiques morphologiques répertoriées durant l'étude bibliographique, le lecteur est renvoyé à l'Annexe A ainsi qu'à l'article de référence [15] dont le matériel supplémentaire (*Supplementary Materials*) contient l'ensemble des 145 définitions.

3.2.1.1 Caractéristiques de taille

Aire projetée – A

L'aire projetée est la mesure de la surface d'un objet 2D, obtenue en projetant un objet 3D sur un plan (cf. Fig. 3.1a).

Diamètre du Cercle Équivalent – ECD

Le diamètre du cercle équivalent (ECD) ou *Waddel Disk Diameter* est, par définition, la longueur du diamètre d'un disque ayant la même aire que l'objet 2D. Il est calculé à partir de l'aire projetée en utilisant la formule suivante :

$$\text{ECD} = 2 \times \sqrt{A/\pi} \quad (3.1)$$

Aire convexe – A_c

L'aire convexe est la mesure de la surface de l'enveloppe convexe d'un objet 2D.

Caractéristiques	Symbole	Définition et équation	Catégorie
Diamètre de Feret max.	F_{\max}	Longueur projetée maximale	Taille
Diamètre de Feret min.	F_{\min}	Longueur projetée minimale	Taille
Aspect Ratio	AR	F_{\min}/F_{\max}	Forme
Caractéristiques 2D			
Aire Projetée	A	Aire de l'objet	Taille
Aire Convexe	A_c	Aire de l'enveloppe convexe	Taille
Périmètre	P	Longueur du contour de l'objet	Taille
Diamètre de Cercle Équivalent	ECD	$2 \times \sqrt{A/\pi}$	Taille
Axe Majeur Projété	a_p	Axe majeur de l'ellipse équivalente	Taille
Axe Mineur Projété	b_p	Axe mineur de l'ellipse équivalente	Taille
Élongation Projétée	e_p	b_p/a_p	Forme
Convexité	Co	A/A_c	Angularité/Texture
Circularité	C	$4\pi \times A/P^2$	Angularité/Texture
Caractéristiques 3D			
Volume	V	Volume de l'objet	Taille
Volume Convexe	V_c	Volume de l'enveloppe convexe	Taille
Aire de la Surface	S	Aire de la surface de l'objet	Taille
Diamètre de Sphère Équivalent	ESD	$2 \times \sqrt[3]{3 \times V/(4\pi)}$	Taille
Axe Majeur	a	Axe majeur de la forme de base	Taille
Axe Mineur	b	Axe mineur de la forme de base	Taille
Élongation	e	b/a	Forme
Solidité	SLD	V/V_c	Angularité/Texture
Sphéricité	Φ_S	$6\pi^2 \times V/(\sqrt{\pi}S)^3$	Angularité/Texture
Volume Poreux	V_p	Volume des pores internes de l'objet	Taille
Porosité	ε_{cp}	$1 - V_p/(V + V_p)$	Structure
Dimensions Fractales			
Loi de Puissance	D_2^{PL}	$A \propto F_{\max}^{D_2^{PL}}$	Forme
Box-Counting	$D_{2,3}^{BC}$	Voir FALCONER [133]	Forme
Diffusion Laser	D_3^{LS}	Données expérimentales [134]	Forme

TABLE 3.1 – Liste des caractéristiques morphologiques utilisées dans cette thèse.

Périmètre – P

Le périmètre est la longueur totale du contour de l'objet 2D, mesurée en suivant les contours de l'objet (cf. Fig. 3.1a).

Diamètre de Feret – F

Le diamètre de Feret est une mesure utilisée pour quantifier la taille, la longueur ou la largeur d'un objet (Fig. 3.1b). Il est calculé en projetant une forme 2D dans différentes directions. Le diamètre de Feret maximal F_{\max} est défini comme la longueur projetée maximale, et le diamètre de Feret minimal F_{\min} comme la longueur projetée minimale. Une définition équivalente est la distance maximale (minimale) entre deux points extrêmes de l'enveloppe convexe de l'objet.

Volume – V

Le volume est la mesure de l'espace occupé (phase solide) par un objet 3D.

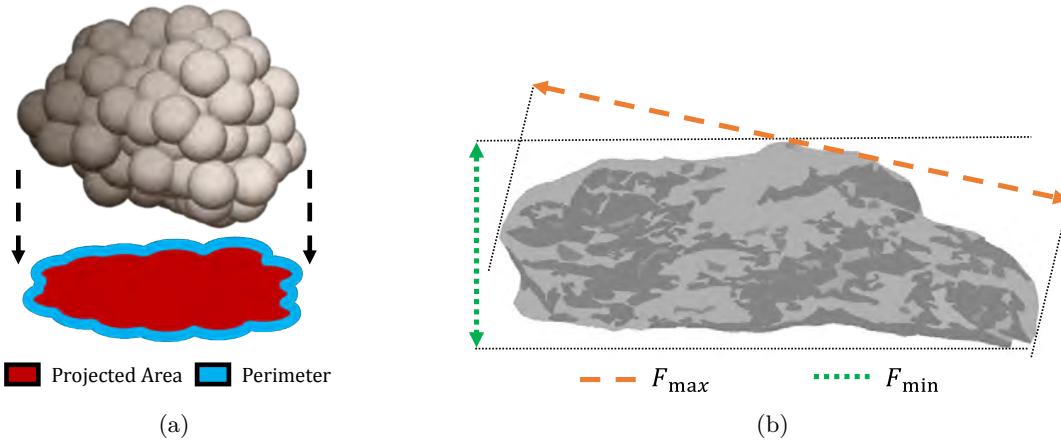


FIGURE 3.1 – Illustration de l'aire et du périmètre de la projection 2D d'un objet 3D (a), et du calcul des diamètres de Feret maximum et minimum (b).

Diamètre de la Sphère Équivalente – ESD

Le diamètre de la sphère équivalente (ESD) est, par définition, le diamètre d'une sphère ayant le même volume que l'objet 3D. Il est l'équivalent 3D de l'ECD. Il est calculé à partir du volume V en utilisant la formule suivante :

$$\text{ESD} = \left(\frac{6 \times V}{\pi} \right)^{1/3} \quad (3.2)$$

Volume Convexe – V_c

Le volume convexe est le volume de l'enveloppe convexe d'un objet 3D.

Volume Poreux – V_p

Le volume poreux, ou volume des pores internes, est défini comme la mesure de l'espace vide contenu à l'intérieur d'un objet. Il représente le volume total des cavités et des interstices présents au sein de la structure de l'objet.

Aire Surfacique – S

L'aire surfacique est la mesure de la surface totale d'un objet 3D.

Rayon de Giration – R_g

Le rayon de giration R_g est défini comme

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N_p} \sum_i^{N_p} (r_i - r_M)^2} \quad (3.3)$$

où N_p est le nombre de particules primaires, r_i est la position de la i -ème particule primaire, et r_M est la position du centre de masse de l'objet. Il peut également être adapté aux images binaires 2D, en traitant chaque pixel formant la projection 2D d'un objet comme une particule primaire [51, 135].

Ellipse Équivalente

L'ellipse équivalente d'un objet 2D est une ellipse ayant les mêmes moments de second-ordre que celui-ci. Ses longueurs d'axe sont notées a_p et b_p avec $a_p > b_p$.

Ellipsoïde Équivalent

L'ellipsoïde équivalent d'un objet 3D est un ellipsoïde ayant les mêmes moments d'inertie principaux que celui-ci. Les longueurs d'axe sont notées a , b et c avec $a > b > c$ et sont définis de la même manière que pour l'ellipse équivalente.

3.2.1.2 Caractéristiques de forme

Aspect Ratio – AR

L'aspect ratio est une caractéristique de forme, et plus précisément d'élongation, dont la définition classique est le rapport entre les diamètres de Feret minimal et maximal.

$$AR = \frac{F_{\min}}{F_{\max}} \quad (3.4)$$

Élongation Projétée – e_p

L'élongation projetée e_p est définie comme le rapport entre l'axe mineur projeté b_p et l'axe majeur projeté a_p de l'ellipse équivalente d'une forme 2D obtenue par projection d'un objet 3D.

$$e_p = \frac{b_p}{a_p} \quad (3.5)$$

Élongation – e

L'élongation e est le rapport entre l'axe mineur projeté b_p et l'axe majeur a de l'ellipsoïde équivalent.

$$e = \frac{b}{a} \quad (3.6)$$

Dimension de Minkowski-Bouligand ou Box-Counting – $D_{2,3}^{BC}$

La dimension de Minkowski-Bouligand, ou dimension de Box-Counting, peut être estimée sur des objets 2D ou 3D discrétilisés en divisant successivement l'espace en boîtes carrées de côté ϵ . La quantité $N(\epsilon)$ indique alors le nombre de boîtes nécessaires pour couvrir le contour de l'objet. Elle est définie comme suit :

$$D_{2,3}^{BC} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\epsilon)}{\log 1/\epsilon} \quad (3.7)$$

Dimension Fractale définie par une Loi de Puissance – D_2^{PL}

Cette dimension fractale est calculée en reliant l'aire des objets à l'une de leurs longueurs caractéristiques par une relation de type loi de puissance. Elle est définie par FLORIO et al. [136] comme suit :

$$A \propto l_c^{D_2^{PL}} \quad (3.8)$$

où l_c est la longueur caractéristique des objets. Dans toute la suite, la longueur caractéristique choisie est le diamètre de Feret maximal F_{\max} , ce qui donne la définition présentée dans le Tableau 3.1.

Dimension Fractale de Masse – D_3^{LS}

La dimension fractale de masse D_3^{LS} est obtenue par diffusion laser, comme décrit par SOOS et al. [137] et SORENSEN [138], et est une fonction de l'intensité de diffusion $I(k)$, où k est le vecteur d'onde. Elle est définie dans le régime fractal (c'est-à-dire pour $R_g^{-1} \ll k \ll r_0^{-1}$ avec R_g le rayon de giration de l'objet et r_0 le rayon des particules primaires) comme suit :

$$I(k) \propto k^{-D_3^{LS}} \quad (3.9)$$

Elle sera calculée par simulations numériques (voir Chapitre 5) et comparée à des mesures expérimentales.

3.2.1.3 Caractéristiques d'angularité et de texture

Circularité – C

La circularité C est une mesure de la similitude de la forme d'un objet avec un cercle parfait. Elle est définie par la formule :

$$C = \frac{4\pi A}{P^2} \quad (3.10)$$

où A est l'aire projetée et P est le périmètre de l'objet.

Convexité – Co

La convexité Co est le rapport entre l'aire projetée A de l'objet et l'aire de son enveloppe convexe A_c . Elle est donnée par la formule :

$$Co = \frac{A}{A_c} \quad (3.11)$$

Sphéricité – Φ_S

La sphéricité Φ_S est une mesure de la similitude de la forme d'un objet avec une sphère parfaite. Il s'agit de l'équivalent 3D de la circularité. Elle est définie par la formule :

$$\Phi_S = \frac{6\pi^2 V}{(\sqrt{\pi S})^3} \quad (3.12)$$

où V est le volume de l'objet et S est l'aire de la surface de l'objet.

Solidité – SLD

La solidité SLD est le rapport entre le volume V de l'objet et le volume de son enveloppe convexe V_c . Il s'agit de l'équivalent 3D de la convexité. Elle est donnée par la formule :

$$SLD = \frac{V}{V_c} \quad (3.13)$$

3.2.1.4 Caractéristique de structure

Porosité – ε_{cp}

La porosité ε_{cp} est une mesure de la fraction du volume total d'un objet 3D (phases solides et poreuses confondues) qui est occupée par des pores. Elle est définie comme le rapport entre le volume des pores V_p et la somme du volume des pores et du volume solide V , donné par la formule :

$$\varepsilon_{cp} = \frac{V_p}{V + V_p} \quad (3.14)$$

3.2.1.5 Choix de nomenclature

Le choix des caractéristiques retenues pour caractériser la morphologie des objets a été déterminé par l'analyse de l'état de l'art en termes de caractérisation morphologique d'agrégats ou d'agglomérats par analyse d'image. Un ensemble de caractéristiques couramment utilisées pour des objets de même nature a été ainsi constitué.

Néanmoins, il est apparu que certaines caractéristiques comme la *circularité* et la *sphéricité* étaient souvent classées comme des caractéristiques de forme. Pour des raisons évoquées par PIRARD et al. [139] et illustrées par la Fig. 3.2, il apparaît clairement que les frontières entre les catégories intitulées « forme », « angularité » et « texture » sont poreuses. En effet, deux objets peuvent avoir la même forme générale, à savoir un cercle ou une ellipsoïde, mais une circularité radicalement différente si la texture des contours est très différente. Inversement, deux objets peuvent avoir les mêmes circularités et des formes générales très différentes (Fig. 3.2b et Fig. 3.2c).

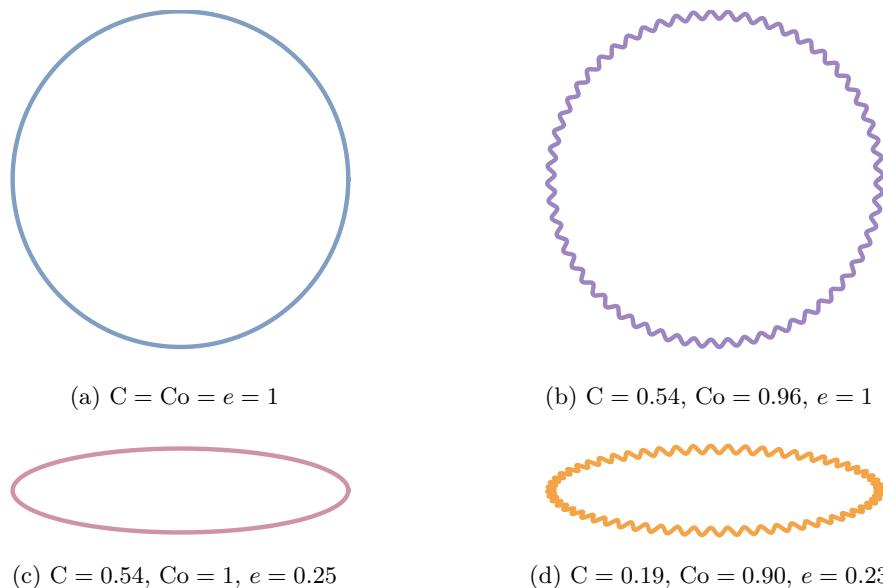


FIGURE 3.2 – Exemples d'objets 2D ayant la même « forme » mais pas la même circularité : (a-b) et (c-d) ; Et d'objets ayant la même circularité $C = 0.54$ mais pas la même « forme » : (b-c).

Par ailleurs, la circularité étant calculée à partir d'une valeur de périmètre, la valeur de cette dernière est particulièrement sensible au mode de calcul choisi pour le périmètre [139, 140] et peut varier grandement pour des formes binaires, notamment en fonction de la qualité de la segmentation des objets étudiés.

Pour toutes ces raisons, il a semblé judicieux de parler de caractéristiques d'angularité et/ou de texture en ce qui concerne la circularité, plutôt que de caractéristique de forme, et de réserver cette dernière catégorie à des critères d'elongation tels que l'aspect ratio ou l'elongation de l'ellipse équivalente. Enfin, le calcul de la convexité ne se basant que sur des mesures d'aire aux définitions non-ambigües et de manière bien plus robuste que celle du périmètre, l'adjonction de cette dernière à l'ensemble des caractéristiques considérées permet de proposer une caractérisation morphométrique plus complète des objets.

Les mêmes remarques peuvent être appliquées à la sphéricité et à la solidité pour des objets 3D, ce qui explique la nomenclature et la classification des caractéristiques proposées par le Tableau 3.1.

3.2.2 Mesures géométriques

La caractérisation morphométrique d'un objet 2D ou 3D implique la possibilité de mesurer avec précision les différentes caractéristiques listées par le Tableau 3.1. En pratique, la géométrie des objets étudiés peut être représentée informatiquement de deux manières : soit par un maillage (ou un contour en 2D), soit par un ensemble discret (ie. une image binaire 2D ou 3D).

3.2.2.1 Cas continu

Dans le cas *continu*, la mesure des caractéristiques de taille, à partir desquelles la quasi-intégralité des autres caractéristiques sont définies, est non-ambigüe, et dépend seulement du choix du maillage (voir l'Annexe B pour plus d'information sur les types de mailles et leur influence sur les mesures morphométriques).

- **Contour (2D)** : Dans ce cas, le contour de l'objet est représenté par un ensemble de points successifs $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ avec, $\mathbf{p}_{n+1} = \mathbf{p}_1$, connectés par des segments, formant un polygone fermé non-croisé. Les mesures géométriques d'aire et de périmètre sont calculées comme suit :

- **Périmètre** : Le périmètre P est la somme des longueurs de tous les segments formant le contour :

$$P = \sum_{i=1}^n \|\mathbf{p}_{i+1} - \mathbf{p}_i\|. \quad (3.15)$$

- **Aire** : L'aire d'un polygone de contour $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ est calculée en utilisant la formule de l'aire de Shoelace [141] (ou formule de Gauss) :

$$\text{Aire} = \frac{1}{2} \left| \sum_{i=1}^n (x_i y_{i+1} - y_i x_{i+1}) \right|. \quad (3.16)$$

- **Maillage (3D)** : Dans ce cas, la géométrie de l'objet est représentée par un ensemble de sommets (points) reliés par des arêtes, formant ainsi des faces (polygones). Les mailles peuvent être régulières ou irrégulières mais peuvent toujours être ramenées à un maillage triangulaire. Les mesures géométriques de volume et de surface sont obtenues de la manière suivante :

- **Surface** : La surface totale d'un maillage 3D est obtenue en sommant les aires de toutes les faces. Chaque face triangulaire a une aire calculée à partir des coordonnées de ses sommets. Pour un triangle T de sommets $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$, l'aire A_T est donnée par :

$$A_T = \frac{1}{2} \|(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \times (\mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_1)\| \quad (3.17)$$

où \times représente le produit vectoriel. La surface totale S est alors la somme des aires de tous les triangles :

$$S = \sum_{T \in \mathbb{T}} A_T \quad (3.18)$$

où \mathbb{T} est une triangulation de l'objet 3D.

- **Volume** : Le volume d'un maillage 3D composé de tétraèdres, obtenu à partir d'un maillage triangulaire, est calculé en sommant les volumes de chaque tétraèdre. Le volume d'un tétraèdre τ avec des sommets $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \mathbf{v}_4$ est donné par :

$$V_\tau = \frac{1}{6} \left| \det \begin{pmatrix} \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_4 - \mathbf{v}_1 \end{pmatrix} \right| \quad (3.19)$$

où \det représente le déterminant de la matrice formée par les vecteurs. Le volume total V est alors défini de la manière suivante :

$$V = \sum_{\tau \in \mathcal{T}} V_\tau \quad (3.20)$$

où \mathcal{T} est un maillage tétraédrique de l'objet 3D.

Les caractéristiques telles que l'aire convexe ou le volume convexe se calculent de la même manière, mais à partir de l'enveloppe convexe de l'ensemble des sommets.

3.2.2.2 Cas discret

Le cas discret propose plus de difficultés. En effet, bien que le calcul de l'aire ou du volume consistent à sommer l'ensemble des pixels (ou voxels) constituant la forme binaire, les mesures de périmètre et d'aire surfacique sont bien plus complexes, et les différentes définitions peuvent donner des résultats parfois très éloignés [142] (plus de 10% d'écart).

Plusieurs définitions du périmètre (en 2D) et de l'aire surfacique (en 3D) dépendent de la connectivité choisie (4 ou 8 en 2D, et 6, 18 ou 26 en 3D). La Fig. 3.3 illustre les deux connectivités possibles en 2D dont dépendent deux définitions du périmètre différentes. Une troisième définition, plus robuste, est celle du périmètre de Crofton, et sera présentée par la suite.

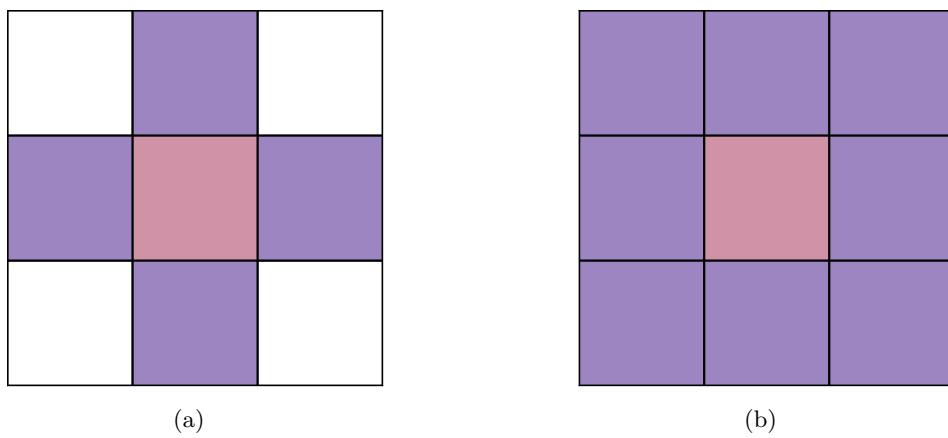


FIGURE 3.3 – Illustration de la 4-connectivité (a) et de la 8-connectivité (b).

Périmètre avec 4-Connectivité

En 4-connectivité, chaque pixel est connecté uniquement à ses voisins immédiats horizontalement et verticalement (Fig. 3.3a). Pour chaque paire de pixels adjacents (x_i, y_i) et (x_j, y_j) sur le contour, on note :

$$d_{ij} = \sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}$$

Dans le cas de 4-connectivité, les distances entre les pixels sont toujours égales à 1, et on a ainsi :

$$P_4 = \sum_{i=1}^{N-1} d_{ij} = \sum_{i=1}^{N-1} 1 = N \quad (3.21)$$

où N est le nombre total de segments horizontaux et verticaux sur le contour.

Périmètre avec 8-Connectivité

En 8-connectivité, chaque pixel est connecté à ses voisins immédiats horizontalement, verticalement et diagonalement (Fig. 3.3b). Les distances entre les pixels peuvent être égales à 1 (pour les connexions horizontales et verticales) ou à $\sqrt{2}$ (pour les connexions diagonales), et on a cette fois :

$$P_8 = N_h \cdot 1 + N_d \cdot \sqrt{2} \quad (3.22)$$

où N_h est le nombre de segments horizontaux ou verticaux, et N_d est le nombre de segments diagonaux.

Formule de Crofton – Cas général

La formule de Crofton permet d'estimer le périmètre des objets en 2D et la surface des objets en 3D en comptant les interceptions de la frontière de l'objet avec un ensemble de lignes isotropiques. Dans le cas général, étudié notamment par LEHMANN et al. [143], elle permet de calculer la surface d'un objet en dimension d de la manière suivante :

$$S_{(d-1)}(X) = d \cdot \frac{v_d}{v_{d-1}} \int_{L^d} \chi(X \cap L) dL \quad (3.23)$$

où X est un objet d -dimensionnel, v_d est le volume de la boule unité d -dimensionnelle, et L^d est l'ensemble de toutes les lignes dans l'espace d -dimensionnel.

La fonction χ est la caractéristique d'Euler [144]. En dimension 2, elle est définie pour un ensemble X par :

$$\chi(X) = (\text{nombre de composantes connexes}) - (\text{nombre de "trous"}).$$

Ainsi, le périmètre d'un objet 2D et l'aire surfacique d'un objet 3D s'expriment comme suit :

$$P(X) = \pi \int_{L^2} \chi(X \cap L) dL \quad (3.24)$$

$$S(X) = 4 \int_{L^3} \chi(X \cap L) dL \quad (3.25)$$

Ces formules générales ne sont pas adaptées à une évaluation numérique. Par ailleurs, dans le cas d'un objet discréte, elles peuvent être approximées pour fournir une mesure relativement précise et toujours très rapide.

Formule de Crofton – Cas d'un objet 2D discrétilisé

Dans le cas d'un objet discrétilisé X , représenté par une image binaire, la formule de Crofton peut être décomposée en une intégrale sur un ensemble fini de directions et une intégrale sur toutes les lignes parallèles à une direction donnée. C'est cette méthode qui est implémentée dans les fonctions `regionprops` et `regionprops3` de MATLAB®.

Si X est un objet 2D représenté par une image binaire, le périmètre est estimé en considérant des lignes dans quatre directions : horizontale, verticale et les deux diagonales principales ($\pi/4$ et $3\pi/4$). La formule discrète est :

$$P(X) \approx \pi \sum_{k=1}^4 \frac{c_k}{\lambda_k} \chi(X \cap L_k) \quad (3.26)$$

avec c_k le poids de discrétilisation associé à la direction k , λ_k la densité des lignes discrètes dans la direction k , L_k est l'ensemble de toutes les lignes discrètes dans la direction k et $\chi(X \cap L_k)$ est le nombre d'interceptions de la frontière de X avec les lignes L_k . En pratique, dans le cas de 4 directions, les poids explicites sont les suivants.

- **Direction horizontale** ($k = 1$) :

$$c_1 = \frac{1}{4}, \quad \lambda_1 = 1$$

- **Direction verticale** ($k = 2$) :

$$c_2 = \frac{1}{4}, \quad \lambda_2 = 1$$

- **Direction diagonale d'angle $\pi/4$** ($k = 3$) :

$$c_3 = \frac{1}{4\sqrt{2}}, \quad \lambda_3 = 1$$

- **Direction diagonale d'angle $3\pi/4$** ($k = 4$) :

$$c_4 = \frac{1}{4\sqrt{2}}, \quad \lambda_4 = 1$$

Ainsi, la formule discrète pour le périmètre d'un objet bidimensionnel X est :

$$P(X) \approx \frac{\pi}{4} \left[\chi(X \cap L_1) + \chi(X \cap L_2) + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi(X \cap L_3) + \frac{1}{\sqrt{2}} \chi(X \cap L_4) \right]$$

La formule (3.25) de Crofton de l'aire surfacique S d'un objet 3D discrétilisé se simplifie également de la même manière selon le nombre de directions choisies pour l'intersection.

3.2.3 Segmentation

Pour être capable de caractériser efficacement la morphologie d'un objet 2D projeté par des mesures morphométriques, il est nécessaire d'être capable d'en obtenir une représentation précise, ce qui passe nécessairement par une étape de **segmentation** d'images.

La **segmentation** correspond à la division d'une image en plusieurs régions distinctes, chaque région isolée représentant idéalement un objet à étudier. Pour ce faire, plusieurs méthodes existent, avec notamment des méthodes directes de traitement d'image classique basées sur des analyses d'histogrammes ou l'application de filtres, ainsi que des méthodes basées sur des modèles d'apprentissage profond. Cette section propose un bref aperçu de ces différentes méthodes.

3.2.3.1 Segmentation par la méthode d’Otsu

La méthode d’Otsu est une technique de segmentation automatique qui propose une valeur de seuil optimale pour séparer une image à niveaux de gris en deux classes : objets et fond. Proposée par OTSU [52] en 1979, cette méthode cherche à maximiser la variance inter-classe $\sigma_b^2(t)$ (la dispersion entre les niveaux de gris moyens des deux classes séparées par le seuil) en se basant sur une analyse d’histogramme. Cette dernière est définie par :

$$\sigma_b^2(t) = \omega_1(t) [\mu_1(t) - \mu_T]^2 + \omega_2(t) [\mu_2(t) - \mu_T]^2 \quad (3.27)$$

avec :

- $\omega_i(t)$ la proportion de pixels dans la classe i .
- $\mu_i(t)$ la moyenne des pixels dans la classe i .
- μ_T la moyenne de l’ensemble des pixels de l’image.

En essence, cette méthode vise à séparer au mieux les objets du fond, et à faire en sorte que les niveaux de gris au sein de chaque classe soient les plus homogènes possibles. La Fig. 3.4b illustre le résultat obtenu par son application à une image d’agrégats de latex capturée in-situ.

3.2.3.2 Seuillage adaptatif par filtre médian

La segmentation par seuillage adaptatif permet de segmenter des images avec des variations locales d’éclairage. Cette méthode calcule un seuil local pour chaque pixel en utilisant une valeur de référence des pixels au sein d’un voisinage (moyenne, médiane, médiane, ...), réduisant ainsi les effets du bruit et des variations d’éclairage. L’utilisation de la médiane permet généralement d’obtenir les meilleurs résultats, au prix de temps de calculs beaucoup plus longs, la médiane ne pouvant être calculée par filtrage linéaire (contrairement à une moyenne éventuellement pondérée).

Étapes de l’algorithme

1. **Définition de la Fenêtre** : Choisir une taille de fenêtre $n \times n$ autour de chaque pixel. La taille de la fenêtre doit être adaptée à la taille des objets à segmenter.
2. **Calcul de la Médiane Locale** : Pour chaque pixel de coordonnées (i, j) , calculer la médiane m_{ij} des pixels dans la fenêtre $W_{(i,j)}$ centrée sur (i, j) .
3. **Application du Seuil** : Comparer la valeur de chaque pixel $I(i, j)$ à la médiane locale m_{ij} :

$$I(i, j) = \begin{cases} 1 & \text{si } I(i, j) > k \cdot m_{ij} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où k est un facteur de seuil à ajuster.

BRADLEY et al. [145] ont proposé une méthode similaire utilisant une image intégrale pour un calcul rapide du seuil adaptatif, permettant un traitement accéléré. De manière générale, les méthodes locales (ou adaptatives) permettent d’obtenir de meilleurs résultats que les méthodes globales comme celle d’Otsu. La Fig. 3.4c propose par exemple une illustration des résultats obtenus par un seuillage local avec un filtre médian. Néanmoins, ces bonnes performances viennent avec un temps de calcul considérablement plus élevé (plusieurs dizaines de secondes pour une image 1024×1024 avec l’exemple proposé par la Fig. 3.4 contre moins d’une seconde pour la méthode d’Otsu), et un ajustement nécessaire des méta-paramètres pour des images avec des niveaux de bruit, de flou et de conditions d’éclairage différentes.

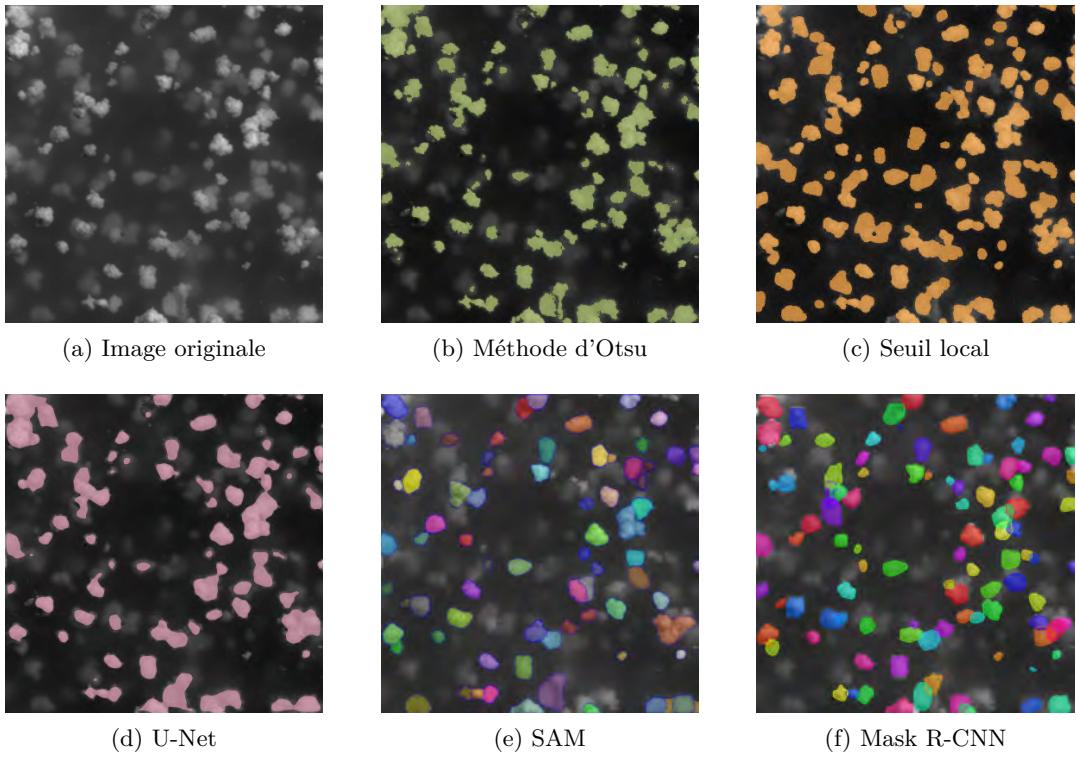


FIGURE 3.4 – Comparaison de différentes techniques de segmentation avec en particulier des méthodes directes (b-c) et des modèles d'apprentissage profond (d-f).

3.2.3.3 Segmentation par un modèle d'apprentissage profond

Avec l'augmentation des puissances de calcul et des capacités de traitement de données, le développement de modèles d'apprentissage profond pour la segmentation automatique d'images a été rendue possible. On peut classer ces modèles dans deux grandes catégories :

- **La segmentation sémantique** classifie chaque pixel d'une image en une catégorie, permettant de comprendre globalement la scène. Elle est en général relativement simple à mettre en œuvre et des modèles tels que U-Net [146] (Fig. 3.4d) se montrent particulièrement efficaces pour détecter certaines textures. En revanche, ce type de segmentation ne distingue pas individuellement les différents objets d'une même catégorie et peut se révéler inadaptée quand les ces derniers sont trop proches ou se recouvrent.
- **La segmentation par instance** identifie chaque objet individuellement, même au sein de la même classe. Elle a l'avantage d'être par conséquent bien plus précise que les autres méthodes de segmentation et permet de travailler sur des images complexes avec une forte densité d'objets. En revanche, cela nécessite généralement des capacités de calcul bien plus importantes, ainsi que de grandes bases de données d'entraînement de qualité. L'architecture Mask R-CNN [147] (Fig. 3.4f) ou encore le modèle SAM [148] (Fig. 3.4e) proposent une segmentation par instance des images.

On notera par ailleurs que les modèles d'apprentissage profond, contrairement à la plupart des méthodes classiques, proposent d'obtenir des résultats en quasi-temps réel, là où un seuillage local de qualité peut nécessiter plusieurs minutes de traitement. Enfin, une fois entraînés, ces modèles peuvent être utilisés en l'état et ne nécessitent pas d'ajuster de nombreux meta-paramètres. Le principal obstacle à leur mise en œuvre est la constitution d'un ensemble de données d'entraînement suffisamment large et représentatif.

3.3 Stéréologie projective

Quelques résultats généraux de stéréologie en coupe et de stéréologie projective ont été présentés à la section 2.3 et sous-section 2.3.2. En ce qui concerne la stéréologie projective, VICKERS [95] a proposé des expressions analytiques pour les distributions d'aires projetées de cylindres et d'ellipsoïdes lorsque les objets sont projetés dans des directions choisies aléatoirement de manière uniforme sur la sphère unité. La stéréologie en coupe ne sera pas abordée dans cette thèse.

Estimation des caractéristiques des ellipsoïdes

Selon VICKERS [95], un ellipsoïde de révolution peut être décrit par l'équation cartésienne suivante :

$$\frac{x^2}{c^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{a^2} = 1, \quad \text{avec} \quad a \geq c \geq b > 0. \quad (3.28)$$

Lorsque cet ellipsoïde est projeté orthogonalement sur un plan perpendiculaire à un vecteur unitaire $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$, la forme projetée est une ellipse. Les carrés des demi-axes de cette ellipse, à savoir $(a_p/2)^2$ et $(b_p/2)^2$ de cette ellipse sont les racines du polynôme :

$$Q(\lambda) = \lambda^2 - \alpha\lambda + \beta \quad (3.29)$$

où les coefficients α et β sont donnés par :

$$\begin{cases} \alpha = u_x^2(b^2 + a^2) + u_y^2(a^2 + c^2) + u_z^2(c^2 + b^2) \\ \beta = u_x^2b^2a^2 + u_y^2c^2a^2 + u_z^2c^2b^2 \end{cases}$$

Le vecteur unitaire \mathbf{u} étant uniformément distribué sur la sphère unité S^2 de \mathbb{R}^3 , en supposant $b = c = e \times a$ avec $e \in [0, 1]$ l'élargissement de l'ellipsoïde de révolution, les équations pour α et β se simplifient comme suit :

$$\begin{cases} \alpha = a^2[1 + e^2 + u_z^2(e^2 - 1)] \\ \beta = e^2a^2(\alpha - e^2a^2) \end{cases}$$

Les racines λ_1 et λ_2 de $Q(\lambda)$ sont des variables aléatoires, dépendant de manière continue de α et β , et correspondant aux carrés des demi-axes de l'ellipse projetée. Ainsi, LANGLARD et al. [97] proposent une approche Bayésienne pour estimer les longueurs des axes principaux de l'ellipsoïde de révolution à partir de mesures de longueur d'axes principaux d'ellipses projetées, sous les hypothèses de projection dans des directions aléatoires distribuées uniformément sur la sphère unité, et avec $b = c$.

Ces résultats sont ensuite étendus par LANGLARD et al. [97] à des populations d'ellipsoïdes aléatoires, avec des résultats variables selon les lois de probabilité régissant les longueurs d'axe des ellipsoïdes, et des erreurs obtenues sur les valeurs moyennes pouvant aller jusqu'à 20% et ce, même en considérant des échantillons de plusieurs milliers d'ellipses projetées.

Étant donné que les agrégats de latex étudiés dans cette thèse ont une morphologie bien plus complexe et aléatoire qu'un cylindre ou un ellipsoïde, la possibilité d'établir ou d'utiliser des relations analytiques existantes est limitée. En effet, dans le contexte de ce travail, l'idée est de s'approcher au plus près de la géométrie des agrégats de latex, et non de les modéliser par des objets simples tels que des ellipsoïdes, des prismes ou encore des cylindres, comme il est parfois possible de le faire avec des bulles de gaz dans un fluide [111] ou des objets cristallins [66].

3.4 Génération d'objets aléatoires

De par l'approche géométrique stochastique que l'on souhaite utiliser pour estimer les caractéristiques 3D d'agrégats de latex à partir d'images 2D, il est nécessaire de s'intéresser aux différentes façons de modéliser des agrégats ou agglomérats. Deux grandes catégories de modèles sont étudiées : les modèles qui considèrent les objets comme des empilements de particules élémentaires, et les modèles qui proposent de générer un maillage de l'objet.

3.4.1 Par empilement de particules élémentaires

Dans la section suivante on propose de présenter le fonctionnement de plusieurs types de modèles « par empilement » couramment utilisés.

3.4.1.1 Random Close Packing (RCP)

L'empilement aléatoire dense (RCP) consiste à placer des particules sphériques de rayons identiques de manière aléatoire et dense sans chevauchement [149], atteignant une densité maximale de 63-64%. La densité de l'empilement, ϕ , est définie par :

$$\phi = \frac{N \cdot v_{\text{sphère}}}{V} = \frac{N \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{V} \quad (3.30)$$

avec $v_{\text{sphère}}$ le volume des N particules élémentaires.

Par exemple, le protocole de Lubachevsky-Stillinger [150] est une méthode de simulation utilisée pour générer des empilements denses de particules. Dans ce protocole, les particules commencent par être petites et sans interpénétration. Leur taille croît progressivement et elles peuvent se déplacer pour minimiser les intersections en cas de collision. Le taux de croissance des particules est modélisé par l'équation :

$$\frac{dv_p}{dt} = \gamma v_p \quad (3.31)$$

où γ est le taux de croissance et v_p le volume des particules élémentaires.

3.4.1.2 Modèles de Croissance (Growth Models)

Les modèles de croissance sont utilisés pour générer des arrangements de particules en simulant des processus de croissance naturels. Ils tentent de simuler des phénomènes tels que la croissance de cristaux, la formation de clusters de particules ou les colonies biologiques.

Diffusion-Limited Aggregation (DLA)

Le modèle d'agrégation limitée par diffusion [118] (DLA) est un processus de croissance où les particules se déplacent aléatoirement (par diffusion) et s'agrègent lorsqu'elles touchent une grappe de particules existante.

Pour générer un objet aléatoire, les étapes suivantes sont suivies :

1. Une particule initiale est ajoutée.
2. À chaque étape, une nouvelle particule est placée à une certaine distance du cluster en cours de génération et diffuse aléatoirement jusqu'à ce qu'elle l'atteigne et y adhère.

3. Le processus est répété avec de nouvelles particules jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit rempli.

Ce modèle génère des structures fractales et est utilisé pour simuler des processus tels que la formation de dendrites et la croissance de colonies bactériennes.

Eden Growth Model

Le modèle de croissance d'Eden [151] simule la croissance de clusters par ajout successif de particules à la frontière d'un cluster existant.

Pour générer un objet aléatoire, les étapes suivantes sont suivies :

1. Une particule initiale est placée au centre d'une grille.
2. À chaque étape, une nouvelle particule est ajoutée à un site vacant adjacent à une particule existante du cluster.
3. Le processus est répété avec de nouvelles particules jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit rempli.

Contrairement au DLA, le modèle d'Eden ne prend pas en compte la diffusion aléatoire des particules mais ajoute des particules directement aux sites voisins de la frontière du cluster.

3.4.1.3 Sequential Addition and Migration

Les méthodes d'addition et de migration séquentielles [152] combinent l'ajout séquentiel de particules avec leur migration pour éviter le chevauchement. Ces méthodes sont souvent utilisées pour générer des structures plus homogènes et denses par rapport aux méthodes d'empilement aléatoire pur.

La procédure à suivre pour générer un objet est la suivante :

1. **Addition** : Une particule est ajoutée aléatoirement dans le volume.
2. **Migration** : Si la particule chevauche une autre particule, elle est déplacée de manière aléatoire jusqu'à trouver une position sans chevauchement.
3. **Répétition** : Le processus post-initialisation est répété jusqu'à ce que le volume soit rempli de manière dense sans chevauchement.

Bien que ces méthodes soient utilisées pour remplir des volumes avec des assemblages denses de particules, ils peuvent être adaptés pour créer des objets aléatoires, le volume correspondant alors à l'objet en cours de génération, et le processus s'arrêtant quand un critère d'arrêt est rempli.

3.4.2 Par déformation d'un maillage

Dans la section suivante, on propose de détailler une procédure permettant de générer des objets « étoilés » (Fig. 3.5) par déformation d'un maillage d'un objet convexe, tel qu'une sphère ou un ellipsoïde, en utilisant des champs Gaussiens aléatoires 3D à l'instar de ce que MOLLON et al. [11] proposent, par exemple, avec des champs aléatoires 2D. Bien que d'autres techniques existent comme les subdivisions de surface [9], l'utilisation d'harmoniques sphériques [12] ou encore d'autres types de champs ou de bruits aléatoires, le choix a été fait de se concentrer sur ce type de procédure, cette dernière étant utilisée par l'un des principaux modèles développés durant cette thèse, à savoir le modèle SPHERE [131].

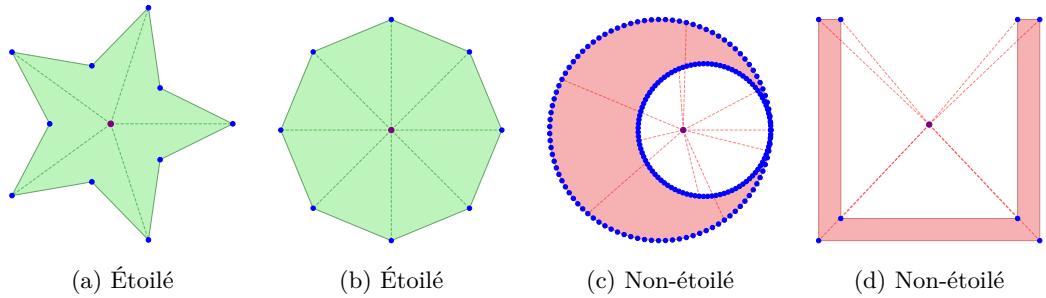


FIGURE 3.5 – Exemple d’objets étoilés avec une étoile à cinq branches (a) et un octogone régulier (b), et non-étoilés avec un croissant de lune (c) et une forme en « U » (d).

3.4.2.1 Objets étoilés

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ un ensemble (objet 3D) et soit $M \in \mathbb{R}^3$ un point fixé. Alors, Ω est dit étoilé par rapport à un point M (appelé son centre) si la condition suivante est satisfaite :

$$\forall P \in \Omega, \quad \forall \lambda \in [0; 1], \quad \lambda M + (1 - \lambda)P \in \Omega. \quad (3.32)$$

Autrement dit, l’ensemble Ω est étoilé par rapport à M si pour tout point $P \in \Omega$, le segment $[MP]$ est inclus dans Ω . Par ailleurs, si $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ est un ensemble étoilé représentant le maillage d’un objet 3D, M le centre de Ω , alors :

$$\forall P \in \Omega, \quad \forall \lambda \in [-1; \infty[, \quad \Omega \setminus \{P\} \cup \{P + \lambda \overrightarrow{MP}\} \quad \text{est étoilé par rapport à } M. \quad (3.33)$$

Ainsi, si Ω est un ensemble de points de \mathbb{R}^3 correspondant au maillage d’un objet 3D **convexe** de centre M , alors une translation d’un point $P \in \Omega$ de vecteur $\lambda \overrightarrow{MP}$, avec $\lambda > -1$ assure que le maillage résultant est également étoilé [153].

Cette propriété, souvent exploitée dans des domaines tels que la modélisation géométrique et la synthèse d’images, permet d’assurer que des objets générés en déformant de manière contrôlée des maillages d’objets convexes, tels que des sphères ou des ellipsoïdes, soient étoilés.

3.4.2.2 Génération d’un champ Gaussien aléatoire

Une méthode efficace pour générer un champ Gaussien 3D repose sur les travaux de ADLER et al. [154] et LIANG et al. [155], qui expriment le champ aléatoire comme la convolution d’un bruit blanc Gaussien avec une fonction de poids symétrique et normalisée. LANG et al. [156] montrent ensuite qu’éviter le calcul du produit de convolution en passant dans l’espace de Fourier non seulement accélère considérablement le calcul, mais réduit également les erreurs de manière significative.

Le processus de génération d’un champ Gaussien 3D aléatoire en utilisant une FFT (Fast Fourier Transform) peut être décrit comme suit :

1. Une fonction de covariance $C(\vec{r})$, telle qu’un noyau gaussien (ou noyau RBF pour *Radial Basis Function*), doit être définie.

$$C(\vec{r}) = \exp \left(\frac{\|\vec{r}\|^2}{2\ell^2} \right) \quad (3.34)$$

avec $\vec{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ et ℓ une longueur d’échelle appelée *longueur de corrélation*.

2. La densité spectrale de puissance $\hat{C}(\vec{k})$ est définie comme la transformée de Fourier de la covariance.

$$\hat{C}(\vec{k}) = FFT(C(\vec{r})) \quad (3.35)$$

3. Le champ Gaussien aléatoire $G(\vec{r})$ est obtenu en appliquant la transformée de Fourier inverse au produit de la racine carrée de $\hat{C}(\vec{k})$ et de la transformée de Fourier $\hat{\mathcal{N}}(\vec{k})$ d'un bruit blanc Gaussien $\mathcal{N}(\vec{r})$.

$$G(\vec{r}) = FFT^{-1} \left[\hat{\mathcal{N}}(\vec{k}) \times \sqrt{\hat{C}(\vec{k})} \right] \quad (3.36)$$

Cette méthode est particulièrement efficace pour la génération rapide de champs aléatoires 3D. Par exemple, sur une machine équipée d'un processeur Intel(R) Core(TM) i9-12900KF à 3.19Ghz et 64GB de RAM utilisant MATLAB® (2023b), il faut environ 10^{-2} s pour générer un champ gaussien aléatoire 3D sur une grille de 50^3 px. En particulier, la Fig. 3.6 montre l'évolution du temps de calcul nécessaire pour générer un champ gaussien aléatoire 3D sur des grilles de différentes tailles.

Enfin, un champ gaussien aléatoire est complètement déterminé par sa fonction de covariance, et en particulier par la longueur de corrélation ℓ . La Fig. 3.7 illustre l'influence de ce paramètre sur la structure du champ aléatoire.

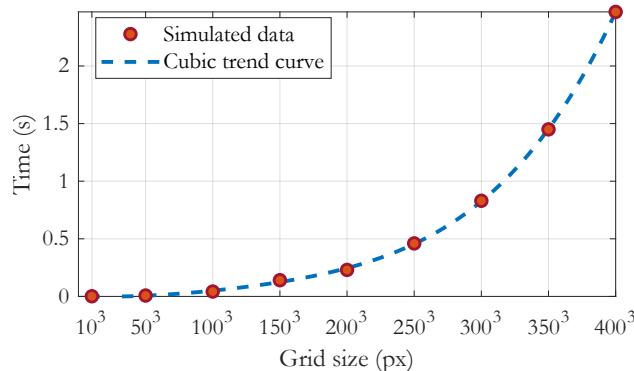


FIGURE 3.6 – Temps nécessaire pour générer un champ Gaussien aléatoire 3D sur des grilles de différentes tailles en utilisant la méthode proposée. Les données simulées sont moyennées sur 20 simulations.

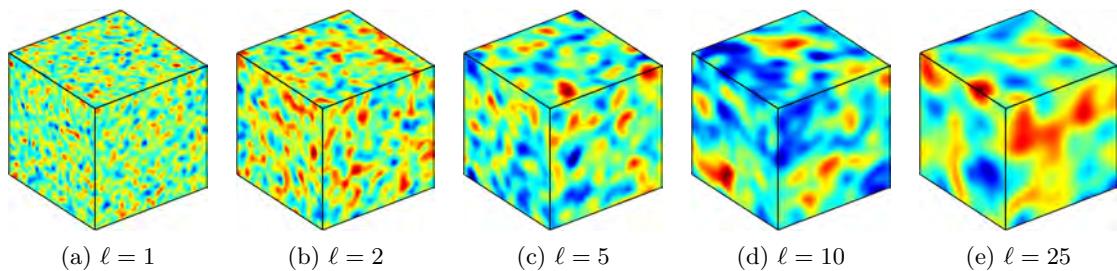


FIGURE 3.7 – Exemple de champs Gaussiens aléatoires 3D générés sur une grille de 50^3 px avec différentes longueurs de corrélation ℓ et avec la fonction de corrélation donnée par l'équation (3.34). Les couleurs représentent l'intensité du champ (bleu foncé = 0 et rouge foncé = 1).

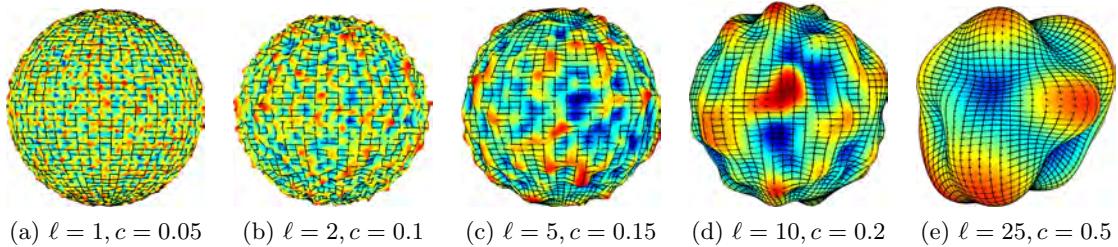


FIGURE 3.8 – Exemple de déformation du maillage d'une sphère par des champs Gaussiens aléatoires 3D générés sur une grille de 50^3 px avec différentes longueurs de corrélation ℓ et coefficient d'intensité c , à partir de la fonction de corrélation donnée par l'équation (3.34).

3.4.2.3 Déformation d'un maillage convexe par un champ Gaussien 3D aléatoire

Pour générer des objets 3D aléatoires, une méthode simple consiste à déformer le maillage d'une forme convexe de manière aléatoire. Pour ce faire, les champs aléatoires tels que les champs Gaussiens 3D sont particulièrement adaptés. Une manière classique de procéder est la suivante :

1. Un maillage convexe \mathcal{M} correspondant à un ensemble de points dans \mathbb{R}^3 est généré ; Par exemple, une sphère, un ellipsoïde, ou tout autre objet convexe, peut convenir.
2. Un champ Gaussien 3D aléatoire $G(\vec{r})$ avec des valeurs normalisées dans $[-1; 1]$ est généré.
3. Chaque point $\vec{r} = (x, y, z) \in \mathcal{M}$ du maillage est affecté par un déplacement de vecteur $c \times G(\vec{r}) \times \vec{u}(\vec{r})$, où $\vec{u}(\vec{r}) = \frac{\vec{r} - \vec{b}}{\|\vec{r} - \vec{b}\|}$ est un vecteur unitaire dirigé du barycentre \vec{b} du maillage \mathcal{M} vers le point \vec{r} , et $c \in [0; 1]$ est un coefficient d'intensité.

Étant donné que le champ gaussien $G(\vec{r})$ est discrétilisé, sa valeur en tout point de l'espace peut être calculée par interpolation spline cubique [157], par exemple. La Fig. 3.8 montre les résultats de la déformation d'un maillage sphérique avec des champs Gaussiens 3D aléatoires de différentes longueurs de corrélation ℓ et pour différents coefficients d'intensité c .

À l'opposé des techniques utilisant des champs aléatoires 2D, comme le font MOLLON et al. [11], l'utilisation de champs 3D permet de s'affranchir de nombreux problèmes, comme la nécessité de générer un champ périodique, ou de s'assurer que certaines conditions au bord soient bien respectées. Cela permet aussi d'adapter la méthode à n'importe quel type de maillage sans que les résultats des mesures géométriques en soient grandement affectés (voir Annexe B).

3.4.2.4 Autres modes de déformation

Il est possible d'utiliser d'autres types de champs ou bruits aléatoires pour déformer des objets, qu'ils soient 2D ou 3D. En effet, bien que les champs Gaussiens soient particulièrement adaptés du fait de la possibilité de relier certaines propriétés des champs à la longueur de corrélation [158] ou que leur génération soit particulièrement rapide, de nombreuses autres techniques existent.

- **Les champs Markoviens** peuvent en théorie se substituer aux champs Gaussiens. En pratique, il sont générés par des méthodes itératives comme des chaînes de Markov [159] ou à l'aide de convolutions utilisant des noyaux Markoviens [160]. Par conséquent, ils ne proposent pas les mêmes avantages que les champs Gaussiens,

notamment en terme de temps de calcul, bien qu'il permettent également d'obtenir des rendu convaincants, comme le montre la Fig. 3.9a.

- **Les bruits pseudo-aléatoires** tels que Perlin [161], Simplex [162], ou Open-Simplex, permettent d'obtenir rapidement un champ de déformation continu et aisément paramétrable. Cependant, ils sont en général complexes à implémenter, coûteux en temps de calcul, nécessitent un grand nombre de paramètres pour un rendu de qualité, et sont en réalité pseudo-aléatoires, ce qui signifie qu'un même paramétrage produit toujours le même résultat. La Fig. 3.9b propose un exemple de déformation d'un maillage d'ellipsoïde par un bruit de Perlin.

D'autres méthodes utilisant des combinaisons d'harmoniques sphériques [12] peuvent être considérées comme des méthodes de déformation de maillage. Néanmoins, elles reposent en général sur un empilement de nombreuses harmoniques sphériques, modulées par des intensités aléatoires, méthode pouvant être appliquée à n'importe quel type de champ de déformation, et nécessitant de nombreux paramètres pour contrôler la morphologie de l'objet résultant.



FIGURE 3.9 – Exemple de déformation d'un ellipsoïde d'élongation $e = 0.8$ par un champ aléatoire Markovien 3D (a) et par un bruit de Perlin (b).

3.5 Conclusion générale

Pour répondre à la problématique de cette thèse, à savoir la caractérisation morphométrique d'agrégats de latex par analyse d'image, l'approche géométrique stochastique s'appuyant sur le développement de modèles est retenue. Cela passe notamment par le développement de modèles, certains basés sur des empilements de particules élémentaires, parfois inspirés par les modèles de croissance, et d'autres utilisant des techniques de déformation de maillages convexes à l'aide de champs aléatoires.

En ce qui concerne l'analyse d'image, ce sont des modèles d'apprentissage profond qui seront développés pour la segmentation des images et qui seront présentés plus en détail au sein des Chapitres 6 et 7.

Pour ce qui est de la caractérisation morphométrique des agrégats, les différentes caractéristiques listées dans le Tableau 3.1 seront utilisées, avec la nomenclature explicitée à la section 3.2.1.5. Ce choix de caractéristiques permet en effet d'être suffisamment complet pour discriminer efficacement des objets très différents, tout en restant relativement restreint, pour se concentrer sur l'essentiel et pouvoir caractériser chacun des aspects de la morphologie des objets, à savoir leur taille, leur forme, leur angularité ainsi que leur texture.

Enfin, dans le Chapitre 6, des modèles d'apprentissages profonds génératifs seront développés, et le vocabulaire spécifique ainsi que les éléments théoriques nécessaires seront alors présentés.

Chapitre 4

Modélisation 3D d'une population d'agrégats

Contenu du chapitre

4.1	Introduction	50
4.1.1	Contenu du chapitre	50
4.1.2	Pourquoi développer de nouveaux modèles ?	50
4.2	Modèle GRAPE	51
4.2.1	Genèse du modèle	51
4.2.2	Description générale du modèle	52
4.2.3	Description de l'algorithme	53
4.2.4	Généralisation et exemples de réalisations	55
4.2.5	Optimisation et validation sur une population synthétique	56
4.2.5.1	Génération d'une population d'agrégats synthétiques	57
4.2.5.2	Définition de la fonction de coût	57
4.2.5.3	Validation de la méthode	58
4.3	Modèle SPHERE	60
4.3.1	Genèse du modèle	60
4.3.2	Description générale du modèle	61
4.3.3	Description de l'algorithme	62
4.3.4	Exemples de réalisations et généralisation	63
4.3.5	Influence des paramètres, étude de sensibilité et estimations	65
4.3.5.1	Influence des paramètres et sensibilité	65
4.3.5.2	Estimations et prédictions	69
4.3.6	Optimisation et validation sur une population synthétique	72
4.3.6.1	Définition du processus d'optimisation	72
4.3.6.2	Génération d'une population d'agrégats synthétiques	74
4.3.6.3	Validation de la méthode	75
4.3.7	Discussion	76
4.4	Modèle VOX-STORM	79
4.4.1	Genèse du modèle	79
4.4.2	Description générale du modèle	79
4.4.2.1	Présentation du modèle	79
4.4.2.2	Définition d'une alpha-shape	80

4.4.3	Description de l'algorithme	81
4.4.4	Exemples de réalisation	82
4.4.5	Influence des paramètres du modèle et estimations	84
4.4.6	Optimisation et validation sur une population synthétique	88
4.4.6.1	Définition du processus d'optimisation	88
4.4.6.2	Génération d'une population d'agrégats synthétiques et validation	89
4.4.7	Discussion	91
4.5	Conclusion générale	92

4.1 Introduction

4.1.1 Contenu du chapitre

Le but de cette partie est de présenter en détail trois des modèles géométriques stochastiques 3D développés durant cette thèse, ces derniers étant basés sur des empilements de sphères dures pour l'un (GRAPE), des déformations de maillages pour l'autre (SPHERE) et une approche hybride pour le troisième (VOX-STORM). En particulier, la philosophie et les raisons pour lesquelles ces modèles ont été mis au point sont discutées. On trouvera également des exemples de réalisations, une étude de l'influence des paramètres de ces différents modèles, une description du processus d'ajustement des paramètres des modèles pour faire correspondre les distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées des objets synthétiques à des distributions mesurées sur des images projetées (cf. méthode illustrée par la Fig. 5.2), ainsi que des validations numériques de ce processus d'optimisation. Une étude comparative des performances des différents modèles sera proposée dans le chapitre suivant (Chapitre 5), à partir d'images ex-situ, capturées par un morphogranulomètre.

4.1.2 Pourquoi développer de nouveaux modèles ?

Bien que de nombreux modèles géométriques existent déjà dans la littérature, qu'ils soient basés sur des empilements de particules élémentaires (TOMCHUK et al. [6], GUESNET et al. [7] et MOREAUD et al. [124]) ou des déformations de maillages (WEI et al. [9] et MOLLON et al. [11]), ces derniers ne sont pas nécessairement adaptés à notre problématique, à savoir la génération d'objets dont les caractéristiques morphologiques 3D sont représentatives d'une population dont seules les caractéristiques morphologiques 2D projetées sont connues. Par exemple, des modèles tels que ceux proposés par GUESNET et al. [7] ou encore MOREAUD et al. [124] sont particulièrement efficaces si l'on souhaite générer rapidement des objets ayant une dimension fractale spécifique.

Néanmoins, ces derniers ne permettent pas l'intégration de la connaissance des distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées de la population étudiée pour l'ajustement des paramètres afin de faire correspondre au mieux les distributions des objets synthétiques. Pour cette raison, le développement de nouveaux modèles géométriques stochastiques 3D permettant d'utiliser l'intégralité de l'information recueillie sur les images 2D projetées lors de la phase d'ajustement des paramètres, et ayant pour objectif principal de faire correspondre les distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées mesurées sur les images avec celles des objets synthétiques, nous a semblé nécessaire.

De manière plus prosaïque, supposons que l'on souhaite modéliser une population \mathcal{A} d'agrégats dont la distribution jointe $f_{A,P,E}$ de caractéristiques morphologiques 2D (aire projetée, périmètre et élongation, par exemple) est connue. Pour ce faire, on peut utiliser un modèle géométrique 3D à n paramètres $\{x_1; \dots; x_n\}$. La solution optimale permettant de modéliser la population \mathcal{A} s'écrit alors comme un ensemble de variables aléatoires dépendant d'une distribution jointe g_{x_1, \dots, x_n} . Or, en pratique, cette distribution jointe g_{x_1, \dots, x_n} peut être particulièrement complexe, et n'est pas nécessairement décrite par une expression analytique. Ainsi, il est courant d'utiliser des lois connues (normales, log-normales, beta, etc...) pour certains des paramètres, sans considérer les éventuelles corrélations, au prix d'une augmentation du nombre de paramètres à optimiser (notamment les paramètres de chacune des lois considérées), ou à l'inverse, d'utiliser des scalaires fixes plutôt que des variables aléatoires, au détriment de la complexité du modèle.

Une autre approche consiste à exploiter la distribution $f_{A,P,E}$ afin d'estimer tout ou partie de la distribution g_{x_1, \dots, x_n} . C'est par exemple cette méthode qui est utilisée par THEODON et al. [163] où, pour modéliser un flux multiphasé (bulles de gaz dans un fluide) par une population d'ellipses, la distribution jointe de grand axe et d'élongation de ces dernières est directement obtenue par analyse d'image, ce qui permet de limiter considérablement le nombre de paramètres à optimiser et d'obtenir des distributions de caractéristiques morphologiques correspondant parfaitement à la réalité. Ainsi, il nous est apparu nécessaire d'adopter une approche similaire, et de concevoir des modèles permettant d'utiliser au mieux les informations recueillies par analyse d'image afin de générer des populations d'agrégats synthétiques aussi représentatives que possible des populations réelles.

4.2 Modèle GRAPE

4.2.1 Genèse du modèle

Le premier modèle développé s'appelle GRAPE (Geometrical Random Aggregation of Particles Emulation). L'idée originelle était de réfléchir à la façon dont un modèle basé sur un empilement de sphères dures, technique très populaire lorsqu'il s'agit de modéliser des agrégats, pouvait être adapté à la problématique de cette thèse. En effet, ce modèle devait répondre à plusieurs impératifs : flexibilité, rapidité, et bonne correspondance entre les distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées mesurées sur les images et celles des projections des objets synthétiques.

Si nombreux de modèles existants sont capables de générer des objets 3D avec, par exemple, une dimension fractale pré-déterminée (MORÁN et al. [5], GUESNET et al. [7] et MOREAUD et al. [124]), l'ajustement des paramètres du modèle par la minimisation d'une fonction de coût devient nécessaire lorsqu'il s'agit de générer des populations aux distributions de caractéristiques morphologiques 2D (aire, périmètre, etc...) souhaitées. Pour ce type de modèles, l'ajustement est alors trop complexe et trop lent pour être utilisé de manière efficace.

Par conséquent, GRAPE considère les distributions de caractéristiques morphologiques 2D ciblées comme des paramètres du modèle, de sorte que les caractéristiques des objets synthétiques générés correspondent parfaitement à celles-ci. Cela permet de considérablement simplifier le processus d'optimisation, et de conserver un nombre de paramètres relativement restreint. Dans la section suivante, le modèle est décrit en détail et des exemples de réalisation sont proposés.

4.2.2 Description générale du modèle

Dans sa forme originale, le modèle GRAPE est conçu pour générer des agrégats par empilement de particules sphériques dont le nombre est de l'ordre de quelques centaines, et ce, afin de conserver de *bonnes* performances. En effet, comme avec tout processus itératif, le temps nécessaire pour générer un objet augmente avec le nombre d'itérations, c'est-à-dire, dans ce cas, le nombre de particules à empiler. Une étude comparative des temps de calcul des différents modèles sera proposée dans le chapitre suivant (Chapitre 5), sachant que la génération d'un objet de quelques centaines de particules primaires est de l'ordre d'un dixième de seconde.

La première étape dans la génération d'un objet consiste à fixer des objectifs à atteindre. Il peut s'agir d'une dimension fractale, d'une aire projetée, d'un nombre de coordination moyen ou encore d'une tortuosité. Dans le cadre de cette thèse, ces objectifs seront principalement des caractéristiques 2D projetées. À chaque itération, une nouvelle particule primaire est ajoutée à l'agrégat. Pour définir la position de cette nouvelle particule, un grand nombre de configurations est testé, et la configuration permettant de se rapprocher au mieux des objectifs fixés à l'avance est retenue. Le processus itératif prend fin lorsqu'un critère d'arrêt a été atteint. Il peut s'agir d'un nombre d'itération maximum ou encore d'un volume critique, par exemple.

Bien que la définition première du modèle GRAPE soit très générale, de par la diversité des fonctions d'objectifs et des critères d'arrêt qu'il est possible de définir, son application est en fait restreinte dans le contexte qui nous intéresse. En effet, notre but étant de faire correspondre des caractéristiques 2D projetées, la fonction d'objectif sera construite en conséquence et sera définie comme la somme des erreurs relatives de l'aire, du périmètre, et de l'aspect ratio de l'agrégat en cours de génération par rapport aux caractéristiques souhaitées. De plus, le choix du critère d'arrêt est crucial pour éviter les cas dégénérés où l'agrégat synthétique a les bonnes propriétés 2D projetées mais contient trop ou trop peu de particules élémentaires (Fig. 4.1).

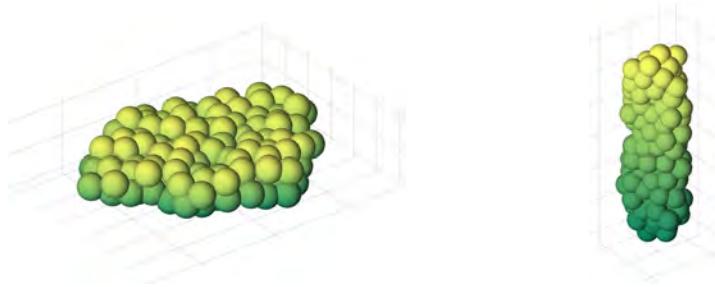


FIGURE 4.1 – Exemple de deux cas dégénérés d'agrégats ayant les mêmes caractéristiques 2D projetées (aire, aire convexe, périmètre et aspect ratio). Seul le rayon r des particules élémentaires et de nombre total de particules N_p diffère.

Le choix du critère d'arrêt retenu est un volume critique, à savoir une estimation \hat{V} du volume de l'agrégat cible, calculé à partir du volume de l'ellipsoïde équivalente. En effet, en observant de premières images ex-situ réalisées à partir d'un morphogranulomètre (Fig. 4.2), il est possible de constater que les agrégats sont relativement compacts et convexes. Les agglomérats (assemblages d'agrégats) présentent une plus grande concavité, mais demeurent relativement compacts et pourraient éventuellement être générés par assemblage d'agrégats, avec une approche multi-échelle. Fort de ce constat, il a semblé naturel d'émettre comme hypothèse que le volume V d'un agrégat 3D observable sur ces

images pouvait être estimé à partir du volume \hat{V} de l'ellipsoïde équivalente, lui-même estimé à partir des axes principaux de l'ellipse équivalente de sa projection 2D. Ainsi, le processus itératif prend fin lorsque le volume de l'agrégat synthétique dépasse l'estimation du volume \hat{V} .

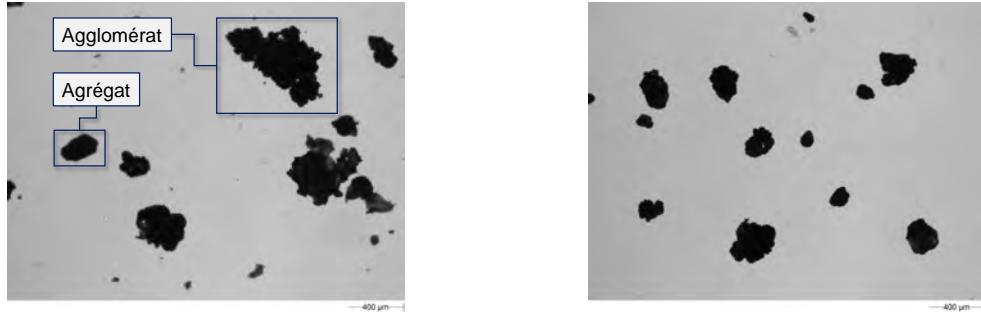


FIGURE 4.2 – Images d'agrégats et agglomérats en milieu dilué, à l'issue du processus d'agglomération, capturées à l'aide d'un morphogranulomètre.

Le tableau 4.1 liste les différents paramètres d'entrée du modèle GRAPE utilisés dans le cadre de cette thèse, c'est-à-dire, dans le cas où la fonction d'objectif est calculée à partir d'erreurs relatives d'aires, de périmètres et d'aspect ratio, et où le critère d'arrêt est une estimation du volume \hat{V} . Dans la section suivante, une description plus formelle de l'algorithme utilisé pour générer un agrégat est proposée.

Paramètres	Définition
r	Rayon des particules élémentaires
d_i	Distance minimum entre les centres de deux particules élémentaires
N_c	Nombre de configurations à tester à chaque itération
A	Aire projetée
A_c	Aire convexe projetée
P	Périmètre
AR	Aspect Ratio
\hat{V}	Estimation du volume

TABLE 4.1 – Liste des paramètres utilisés par le modèle GRAPE.

4.2.3 Description de l'algorithme

Les étapes principales de l'algorithme utilisé (résumées par l'algorithme 1) sont détaillées ci-dessous :

1. Initialisation des paramètres r , d_i et N_c du modèle et définition d'un ensemble d'objectifs à atteindre (une aire projetée A , une aire convexe projetée A_c , un périmètre P et un aspect ratio AR), ainsi qu'une estimation \hat{V} du volume.
2. La fonction d'objectif f_{obj} est définie de la manière suivante :

$$f_{\text{obj}}(c_k) = \Delta(A) + \Delta(A_c) + \Delta(P) + \Delta(\text{AR}) \quad (4.1)$$

avec Δ l'erreur relative entre la caractéristique morphologique mesurée sur l'objet synthétique dans la configuration c_k et les objectifs fixés correspondants. Les ca-

ractéristiques morphologiques 2D de chaque configuration seront calculées sur des images projetées avec une direction choisie lors de l'initialisation de l'algorithme.

3. Une première particule élémentaire est placée et, à chaque itération j , un nombre N_c de configurations aléatoires pour le placement d'une nouvelle particule élémentaire est testé. Chaque nouvelle particule doit être adjacente à au moins une particule existante (les centres doivent être situés à une distance inférieure à $2r$), et à une distance au moins égale à d_i de toutes les particules. Les positions candidates sont choisies aléatoirement de manière uniforme, parmi toutes les positions possibles.
4. Le score $f_{\text{obj}}(c_k)$, avec $k \in \llbracket 1; N_c \rrbracket$, de chaque configuration éligible est calculé, et la configuration de score minimal est choisie.
5. L'algorithme s'arrête lorsque le volume critique \hat{V} est atteint.

Algorithm 1 Génération d'un agrégat par le modèle GRAPE

```

1: Initialiser les paramètres et  $f_{\text{obj}}$ 
2: Placer une première particule élémentaire
3: Calculer le volume  $V$ 
4: tant que  $V < \hat{V}$  faire
5:   pour  $k < N_c$  faire
6:     Essayer une particule dans la configuration  $c_k$ 
7:     Calculer  $f_{\text{obj}}(c_k)$ 
8:     si  $f_{\text{obj}}(c_k)$  est minimal alors
9:       Garder la configuration courante  $c_k$ 
10:      fin si
11:    fin pour
12:    Recalculer le volume  $V$ 
13:  fin tant que

```

On pourra remarquer que les erreurs relatives dans la fonction d'objectif définie par l'équation 4.1 ne sont pas pondérées. L'ajout de poids pour chacun des termes a été considéré et augmenterait de fait de nombre de meta-paramètres du modèle. Néanmoins, il n'est pas apparu nécessaire d'en faire usage dans le cadre de ce travail, leur influence sur les résultats obtenus n'étant en rien remarquable.

Remarque concernant le choix du meta-paramètre N_c

Le choix de N_c est important, car si tester un nombre trop restreint de configurations entraîne de fait une dégradation des performances du modèle, une valeur de N_c trop élevée ralentira considérablement la vitesse d'exécution de l'algorithme, sans pour autant améliorer la qualité des résultats. En pratique, il est apparu que choisir $N_c = 10^3$ offrait un bon compromis entre performance et qualité du modèle, comme l'illustre la Fig. 4.3. Cette dernière propose des courbes $-\log_{10}[\Delta(C_M)]$ avec $\Delta(C_M)$ l'erreur relative sur la caractéristique morphologique $C_M \in \{A; P; AR\}$ par rapport à l'objectif fixé. L'erreur est inférieure à 2% quand l'ordonnée de la courbe est supérieure à 2, et inférieure à 1% pour une ordonnée supérieure à 1.7.

Les agrégats générés dans le contexte de ce travail comptant en général moins de 150 particules élémentaires, le choix a été fait de se limiter à 1000 configurations à tester par itération.

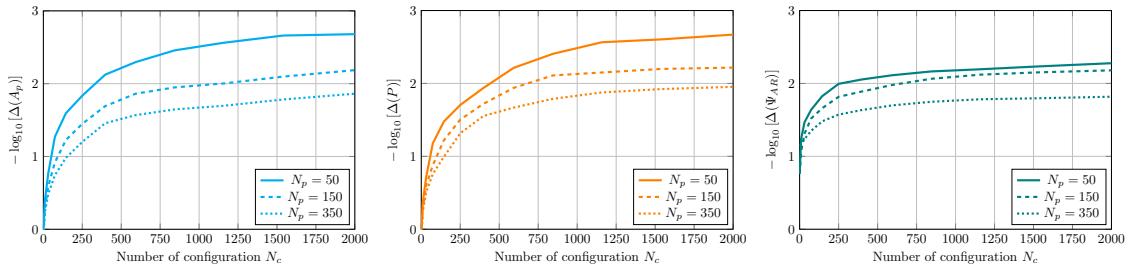


FIGURE 4.3 – Évolution des erreurs relatives en fonction du nombre de configurations à tester N_c pour des agrégats composés de différents nombres de particules N_p . Les erreurs relatives sont des moyennes calculées sur des ensembles de 200 agrégats synthétiques.

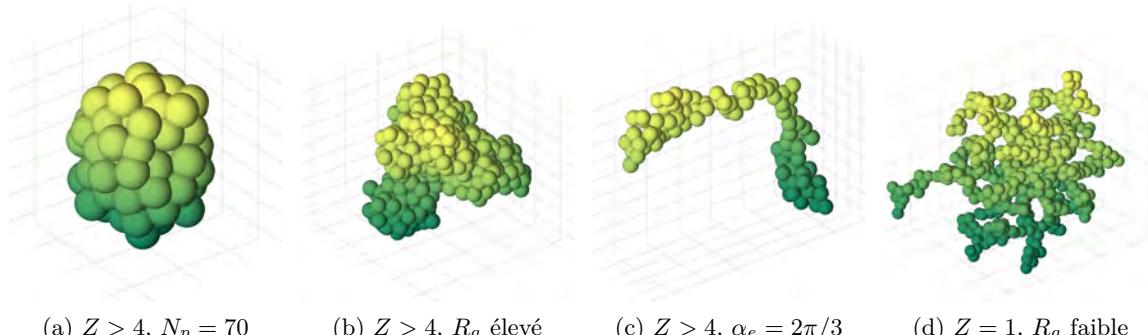
Cas d'une population d'agrégats

L'algorithme 1 décrit ci-dessus suppose que les objectifs de caractéristique morphologique à atteindre sont des scalaires et est bien adapté dans le cas où l'on cherche à *reproduire* un unique agrégat. Néanmoins, la même démarche peut être adoptée dans le cas de distributions de caractéristiques morphologiques, jointes ou non, les objectifs à atteindre devenant alors des variables aléatoires, dont la valeur est choisie aléatoirement en fonction des distributions correspondantes lors de la phase d'initialisation de l'algorithme.

4.2.4 Généralisation et exemples de réalisations

Flexibilité & diversité des objectifs

Bien que le modèle GRAPE soit uniquement utilisé pour la génération d'agrégats relativement compacts et convexes, avec une hypothèse forte sur le volume des objets à générer, ce dernier propose en réalité une grande flexibilité, et permet de générer de nombreux objets aux caractéristiques morphologiques 2D et 3D variées. Par exemple, en utilisant comme objectifs à atteindre le nombre de coordination Z (nombre de plus proches voisins), le rayon de giration R_g , ou encore l'angle α_e entre les deux points les plus éloignés de l'agrégat et son centre de gravité, il est possible de générer des objets de compacité, de convexité, de dimension fractale et d'aspect général très différents, comme l'illustre la Fig. 4.4.



(a) $Z > 4$, $N_p = 70$ (b) $Z > 4$, R_g élevé (c) $Z > 4$, $\alpha_e = 2\pi/3$ (d) $Z = 1$, R_g faible

FIGURE 4.4 – Exemple d'agrégats générés par le modèle GRAPE avec des paramètres et des objectifs différents.

Cas polydispersé

Le modèle GRAPE peut naturellement être étendu à la génération d'agrégats polydispersés, comme l'illustre la Fig. 4.5. Pour ce faire, il suffit de définir une loi de probabilité régissant la taille des particules élémentaires à travers leur paramètre de taille r . Ce cas tend naturellement à complexifier les objets ainsi que le processus d'optimisation visant à trouver une paramétrisation optimale du modèle et sort du cadre de cette étude.

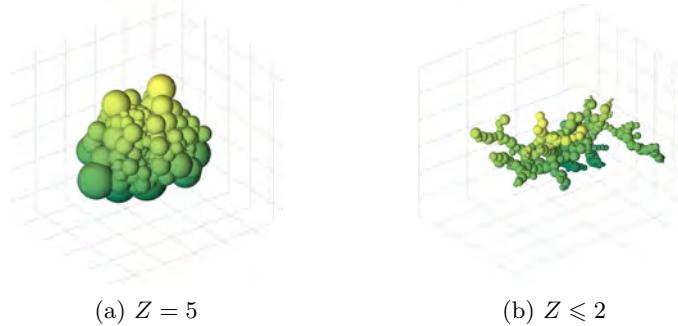


FIGURE 4.5 – Exemple d'agrégats générés par le modèle GRAPE à partir de particules élémentaires dont le rayon suit une loi log-normale et avec $N_p = 150$.

4.2.5 Optimisation et validation sur une population synthétique

Le concept clé à l'origine du développement du modèle GRAPE est sa capacité à générer des objets synthétiques calibrés, c'est-à-dire, dont les caractéristiques, morphologiques ou structurelles, 2D ou 3D, correspondent à des objectifs fixés au préalable. La problématique au cœur de cette thèse étant la caractérisation morphologique 3D d'une population d'agrégats à partir de distributions de caractéristiques morphologiques 2D obtenues par analyse d'image (cf. Fig. 5.2), il est naturel d'évaluer la capacité du modèle GRAPE à répondre à cette problématique.

En d'autres termes, étant donné une population d'agrégats de caractéristiques morphologiques 3D supposées inconnues, est-il possible d'estimer ces caractéristiques 3D à partir de mesures effectuées sur des images 2D projetées à l'aide du modèle GRAPE, et, si oui, avec quelle précision ? Pour répondre à cette question, plusieurs étapes sont nécessaires.

1. Dans un premier temps, une population d'agrégats synthétiques est générée à l'aide du modèle GRAPE.
2. Des images 2D projetées de ces objets sont acquises et des mesures de caractéristiques morphologiques 2D sont effectuées.
3. Une fonction de coût prenant en entrée une paramétrisation du modèle GRAPE est définie puis minimisée afin de déterminer une paramétrisation optimale.
4. Une nouvelle population d'agrégats synthétiques est générée à partir de la paramétrisation optimale et les caractéristiques morphologiques 3D de cette dernière sont comparées à celles de la distribution d'origine afin d'évaluer les performances de la méthode.

Par ailleurs, il faut rappeler que l'on se place toujours dans le cas où les objets étudiés sont relativement compacts et convexes (cf. Fig. 4.2). Par ailleurs, les agrégats réels étant pour l'instant observés à l'aide d'un morphogranulomètre, une hypothèse raisonnable est

que les agrégats sont toujours observés selon une direction privilégiée, et que cette direction est orthogonale au diamètre de Feret maximum. Cette dernière hypothèse permet de justifier le fait que c'est la même direction qui est utilisée tant pour l'observation que pour la génération des objets synthétiques.

4.2.5.1 Génération d'une population d'agrégats synthétiques

La première étape de ce raisonnement consiste à générer une population suffisamment large d'agrégats pour que les statistiques obtenues soient représentatives. Pour ce faire, un ensemble \mathcal{A} de 10^4 objets synthétiques est généré à l'aide du modèle GRAPE. Pour ce faire, plusieurs variables aléatoires, correspondant à des objectifs de caractéristiques morphologiques 2D doivent être définies. En particulier, une certaine corrélation entre les caractéristiques de taille (notamment aire projetée et périmètre) et de forme (aspect ratio) est introduite, afin que la population synthétique soit relativement proche d'une population d'agrégats réels. En effet, des observations qualitatives et quantitatives effectuées sur des agrégats de même type ont montré que les objets les plus gros avaient tendance à être également plus sphériques (GUÉRIN et al. [33, 34] et HAMIEH et al. [134]).

Ainsi, deux variables aléatoires ν_1 et ν_2 sont définies de la manière suivante

$$\nu_1 \sim \text{Beta}(2, 5) \quad \text{et} \quad \nu_2 \sim \text{Beta}(5, 5) \quad (4.2)$$

où Beta est la loi beta (ou loi beta de premier type).

Deux autres variables aléatoires X et Y sont ensuite définies par

$$X = 40 + 20\nu_1 \quad \text{et} \quad Y = 20 + 10\nu_2 + 30\sqrt{(\nu_1)}. \quad (4.3)$$

Enfin, quatre variables aléatoires correspondant à l'aire projetée, le périmètre, l'aspect ratio, et une estimation du volume, sont définies de la manière suivante

$$A = \frac{\pi}{4} \times X \times Y \quad (4.4)$$

$$P = 2\pi\sqrt{\frac{X^2 + Y^2}{8}} \quad (4.5)$$

$$\text{AR} = \frac{\min(X, Y)}{\max(X, Y)} \quad (4.6)$$

$$\hat{V} = \frac{4}{3}\pi \frac{\min(X, Y)^2 \times \max(X, Y)}{8} \quad (4.7)$$

Ainsi, ces quatre caractéristiques morphologiques dépendent de distributions jointes. Par exemple, la Fig. 4.6 montre les distributions jointes d'aspect ratio et d'aire projetée, qui laissent apparaître clairement le fait que les agrégats les plus petits sont plus allongés, ce qui correspond à une certaine réalité physique des objets réels étudiés. La Fig. 4.7, quant à elle, illustre clairement ce phénomène, en proposant un échantillon représentatif de la population d'agrégats synthétiques, avec notamment des objets de taille croissante.

4.2.5.2 Définition de la fonction de coût

Étant donné un sous-ensemble de paramètres $\Omega = \{r; d_i\}$ du modèle GRAPE, la fonction de coût utilisée durant le processus d'optimisation est définie par

$$F_{\text{cost}}(\Omega) = \Delta(\hat{V}) + 8 \times \Delta(A) + 4 \times \Delta(A_c) + 8 \times \Delta(P) + 3 \times \Delta(\text{AR}) \quad (4.8)$$

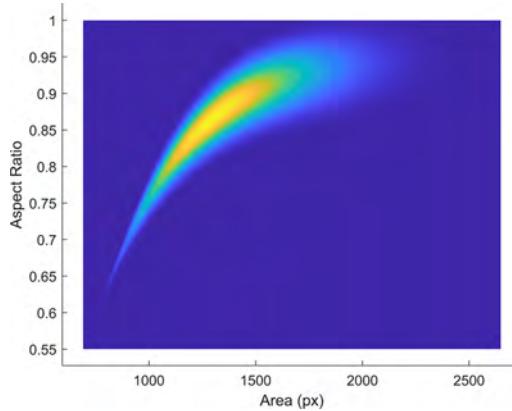


FIGURE 4.6 – Distribution jointe d'aspect ratio et d'aire projetée de la population d'agrégats synthétiques générée par le modèle GRAPE.

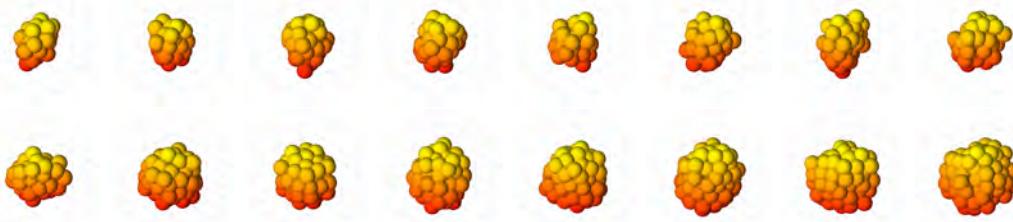


FIGURE 4.7 – Exemple d'agrégats synthétiques générés par le modèle GRAPE pour produire la population \mathcal{A} contenant 10^4 objets.

avec Δ l'erreur relative réalisée entre les différentes caractéristiques morphologiques des agrégats synthétiques générés avec la paramétrisation Ω , par rapport aux valeurs définies comme objectifs. Par ailleurs, les poids affectés à chacune des erreurs relatives ont été déterminés de manière empirique, en fonction de leur sensibilité.

Il faut également noter que l'erreur relative sur l'estimation du volume \hat{V} (c'est-à-dire l'estimation du volume de l'ellipsoïde équivalente) est intégrée à la fonction de coût car, bien que son poids soit faible, cela permet d'accélérer la convergence de l'algorithme de minimisation.

4.2.5.3 Validation de la méthode

Pour valider la méthode proposée, il convient de déterminer une estimation de l'ensemble de paramètres optimaux $\hat{\Omega}$ qui permettent au modèle GRAPE de générer une population synthétique ayant les mêmes caractéristiques morphologiques 2D et 3D que la population synthétique \mathcal{A} de 10^4 agrégats générés à partir de l'ensemble de paramètres Ω . En d'autres termes, la méthode est validée si les distributions de caractéristiques morphologiques des deux populations sont proches, mais également si l'estimation $\hat{\Omega}$ de l'ensemble de paramètres Ω est de bonne qualité. Cette estimation est réalisée en deux temps.

1. Dans un premier temps, des mesures de caractéristiques morphologiques 2D (aire projetée, aire convexe projetée, périmètre et aspect ratio), sont effectuées sur la population \mathcal{A} afin d'estimer la distribution jointe permettant de nourrir la fonction d'objectif définie par l'équation (4.1).
2. Un processus d'optimisation est appliqué à la fonction de coût définie par l'équa-

tion (4.8), l'algorithme d'optimisation utilisé étant le recuit simulé (KIRKPATRICK et al. [164]), et une estimation de la paramétrisation optimale $\hat{\Omega} = \{\hat{r}; \hat{d}_i\}$ est obtenue.

Paramètre	r	d_i
Valeurs originale (Ω)	6	9
Valeur estimée ($\hat{\Omega}$)	6.1	8.9
Erreur relative	1.6%	1.1%

TABLE 4.2 – Comparaison de l'ensemble de paramètres Ω utilisé pour générer la population \mathcal{A} de 10^4 objets synthétiques et son estimation $\hat{\Omega}$ obtenue à l'issue du processus d'optimisation.

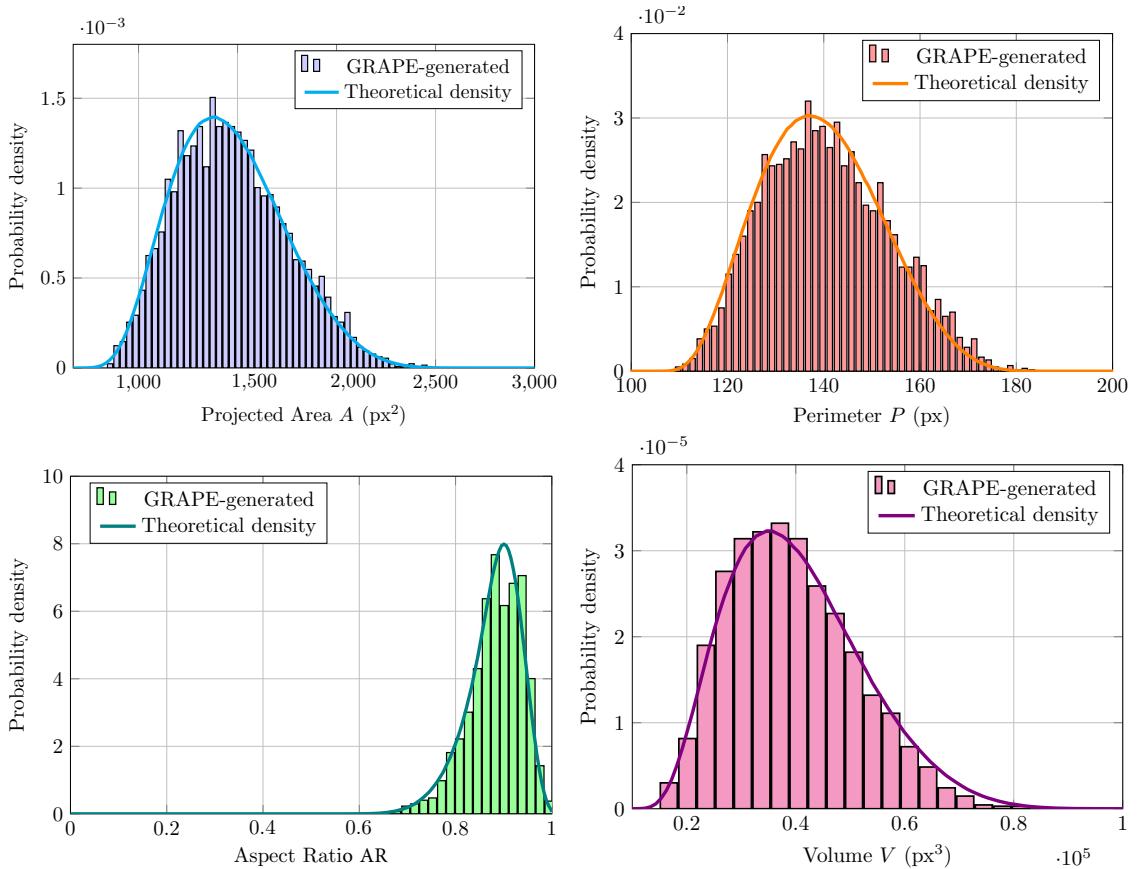


FIGURE 4.8 – Distributions marginales de la distribution jointe utilisée pour générer les agrégats synthétiques de la population \mathcal{A} comparées aux histogrammes des mesures de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des agrégats générés par le modèle GRAPE à partir de l'estimation de la paramétrisation optimale $\hat{\Omega}$ obtenue à l'issue du processus d'optimisation.

Le tableau 4.2 permet de mettre en évidence la proximité entre l'ensemble de paramètres Ω et son estimation $\hat{\Omega}$, et la Fig. 4.8 illustre la proximité entre les courbes théoriques de caractéristiques morphologiques (à savoir celles de la population originale $\hat{\Omega}$) et les prédictions proposées par le modèle GRAPE à l'issue du processus d'optimisation, ce qui tend à valider la méthode, dans le cadre restreint d'une population d'objets rela-

tivement compacts, convexes, et observés dans une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum. En particulier, non seulement les caractéristiques morphologiques 2D, telles que l'aire projetée, le périmètre ou encore l'aspect ratio, sont correctement estimées (ce qui est heureux étant donné qu'il s'agissait des objectifs à atteindre, et que cette correspondance est au cœur même du fonctionnement du modèle GRAPE), mais le volume, qui est une caractéristique morphologique 3D, l'est également.

Néanmoins, on touche ici à l'une des principales limitations de ce modèle, à savoir le fait que le critère d'arrêt du processus itératif est basé sur une estimation a priori du volume, et que, bien que cette estimation puisse être acceptable lorsque les agrégats étudiés sont relativement compacts et convexes, cette dernière n'est plus du tout valable dès que la morphologie des objets étudiés devient légèrement plus complexe. C'est notamment pour cette raison, parmi d'autres, que d'autres pistes ont été explorées, et que d'autres modèles ont été développés.

4.3 Modèle SPHERE

4.3.1 Genèse du modèle

Le modèle SPHERE (Stochastic Process for Highly Effective Radial Expansion) est né d'une réflexion sur la façon de décrire un objet géométrique 2D ou 3D à différentes échelles, en faisant le lien avec la hiérarchie utilisée pour classer les différents descripteurs morphologiques (taille, forme, angularité ou encore texture) et mise en lumière par THÉODON et al. [15]. En effet, au niveau le plus fondamental, tout objet géométrique 3D peut être réduit à une ellipsoïde et sa projection 2D à une ellipse, que ce soit à travers les concepts d'ellipsoïde et d'ellipse équivalentes, ou en ne retenant que les premières harmoniques d'une décomposition de l'objet sous forme de descripteurs de Fourier elliptiques (KUHL et al. [165] et CRAMPTON [166]). Ainsi, l'idée serait de ramener le problème à l'étude d'une population d'ellipsoïdes, et à l'estimation de leurs caractéristiques morphologiques 3D à travers l'analyse de leurs projections 2D. En effet, LANGLARD et al. [96, 97] ont montré qu'il était possible, sous certaines conditions, d'estimer les paramètres géométriques d'une population d'ellipsoïdes à partir de l'étude de leurs projections, et PRESLES et al. [93] se sont intéressés à l'estimation du volume de ce type d'objet, également à l'aide d'images 2D projetées. De même, LANGLARD et al. [111] ont étudié le problème de l'estimation des caractéristiques morphologiques de particules ellipsoïdales par analyse d'image, au moyen d'un modèle géométrique stochastique 3D, dans le cadre de l'étude d'un écoulement diphasique.

La méthode que nous proposons peut ainsi être résumée en deux points :

1. Dans un premier temps, le problème consistant à étudier des objets 3D complexes à travers des images projetées tout aussi complexes est réduit à l'étude d'une population d'ellipsoïdes dont les projections sont des ellipses.
2. En supposant que les caractéristiques morphologiques des objets 3D simplifiés, à savoir les ellipsoïdes, peuvent être correctement estimées, ces dernières sont déformées afin que leurs caractéristiques morphologiques 2D projetées correspondent à celles souhaitées.

L'approche adoptée est donc radicalement différente de celle du modèle GRAPE puisqu'il s'agit cette fois de modéliser une population d'objets très simples (des ellipsoïdes) dont la morphologie sera ensuite modifiée par l'utilisation d'un ou plusieurs bruits aléatoires d'intensités et/ou de fréquences spatiales différentes. Cela offre également l'avantage

de ne plus faire reposer la génération des objets sur un processus itératif qui peut se révéler particulièrement couteux en terme de temps de calcul, et offre un contrôle beaucoup plus fin de l'angularité ainsi que de la texture de la surface de ces derniers. Par ailleurs, la réduction du problème à l'étude d'objets simples permet de s'affranchir d'une des limitations majeures du modèle GRAPE, à savoir le choix du critère d'arrêt du processus itératif, autrement dit, une estimation a priori du volume des objets par celui de l'ellipsoïde équivalente, ce qui est une hypothèse extrêmement forte et contraignante.

4.3.2 Description générale du modèle

Le modèle proposé permet de générer des objets étoilés en déformant le maillage d'un objet convexe de base (dans ce cas, des ellipsoïdes) à l'aide de champs aléatoires. L'idée est de construire un modèle compact (peu de paramètres), flexible (possibilité de générer des objets à la morphologie complexe), et rapide (temps de génération d'un objet de l'ordre de quelques centièmes de seconde). Le mode de génération d'un objet est inspiré de la hiérarchie établie par THÉODON et al. [15] pour classer les différentes caractéristiques morphologiques utilisées pour la caractérisation d'agrégats ou d'agglomérats, et d'objets granulaires en général.

1. **Taille et forme :** Les objets de base sont des ellipsoïdes de grand axe a et dont les deux autres axes sont de même longueur $b \leq a$. La taille de l'objet est ainsi directement liée à la longueur du grand axe a , et sa forme peut être reliée à l'élongation b/a de l'ellipsoïde.
2. **Angularité et texture :** Deux champs aléatoires d'intensité différente sont utilisés pour déformer l'objet de base. Le champ de fréquence spatiale la plus faible influe sur l'angularité de l'objet, quand celui de fréquence spatiale la plus élevée (et en général de faible intensité) aura une plus grande influence sur sa texture.

Pour déformer le maillage d'une surface fermée telle qu'une ellipsoïde, de nombreuses techniques existent, et un choix doit être effectué en conservant les impératifs de flexibilité et de rapidité à l'esprit.

- **Bruits pseudo-aléatoires :** Les bruits pseudo-aléatoires comme les bruits de Perlin (HETTINGA et al. [161]), Simplex (SPJUT et al. [162]) ou encore Open-Simplex sont souvent utilisés dans le domaine des jeux vidéo pour ajouter un effet réaliste et *organique* à la texture d'un objet, à travers le calcul d'une carte de déplacement. Ces bruits ont l'avantage d'être très rapides à calculer. Néanmoins, ils peuvent se révéler complexes à implémenter dans le cas de surfaces fermées, pour lesquelles des conditions de périodicité doivent être respectées. De plus, ils sont construits à partir d'un empilement d'harmoniques de fréquences différentes, ce qui entraîne une inflation du nombre de paramètres. Enfin, leur nature pseudo-aléatoire signifie qu'une même paramétrisation produit un même résultat, ce qui peut se révéler rédhibitoire dans le cadre de la mise au point d'un modèle stochastique.
- **Champs aléatoires :** L'utilisation de champs aléatoires tels que des champs Gaussiens ou Markoviens constitue une bonne alternative aux bruits pseudo-aléatoires. Les champs Markoviens, en revanche, sont quasi-inutilisables en pratique du fait du temps nécessaire à leur génération, alors que des méthodes très efficaces existent pour la génération de champs Gaussiens aléatoires avec l'utilisation de transformées de Fourier (LANG et al. [156]). De plus, les champs Gaussiens offrent l'avantage d'être complètement décrits par une fonction de covariance et une longueur de corrélation ℓ représentant la période spatiale de ces derniers (cf. section 3.4.1).

Ainsi, le modèle SPHERE propose de déformer des ellipsoïdes à partir de deux champs Gaussiens aléatoires, ce qui en fait un modèle à 6 paramètres suffisamment flexible pour générer des objets complexes et dont chaque paramètre a une influence concrète sur la morphologique de ces derniers.

L'utilisation de champs Gaussiens aléatoires pour générer des objets étoilés n'est pas nouvelle, et c'est par exemple ce que proposent MOLLON et al. [11] pour modéliser des objets granulaires. Néanmoins, l'originalité du modèle SPHERE réside dans plusieurs aspects. Premièrement, il utilise des champs 3D dont la valeur est connue en tout point de l'espace. Ces valeurs sont calculées par interpolation sur une grille de taille réduite, entre 50 px^3 et 100 px^3 , pour conserver d'excellentes performances. Cela permet d'éviter de pré-calculer de nombreuses matrices de covariance de très grande taille. De plus, il peut s'adapter à n'importe quel type de maillage (cf. Annexe B). Deuxièmement, le nombre de paramètres du modèle SPHERE est assez faible, ce qui le rend bien adapté à l'application d'un processus d'optimisation, en évitant le fléau de la dimension (BELLMAN [167]).

4.3.3 Description de l'algorithme

Les étapes principales de l'algorithme utilisé (résumées par l'algorithme 2) sont détaillées ci-dessous :

1. Le maillage M d'une ellipsoïde dont le grand axe est de longueur a et les deux petits axes de longueur b est généré.
2. Les deux champs Gaussiens aléatoires 3D G_A et G_T de longueur de corrélation respectives ℓ_A et ℓ_T , avec $\ell_A > \ell_T$ sont générés. Les champs aléatoires sont générés à partir de bruits Gaussiens de moyennes nulles et d'écart types égaux à 1. On s'assure que les valeurs des champs sont comprises dans l'intervalle $[-1; 1]$.
3. Le maillage M est déformé comme décrit à la Section 3.4.2 en fonction d'une combinaison G_C des deux champs aléatoires G_A et G_T définie de la manière suivante :

$$G_C = c_A \times G_A + c_T \times G_T \quad (4.9)$$

où les coefficients c_A et c_T contrôlent l'intensité de la déformation, avec $c_A + c_T < 1$.

Le modèle SPHERE dépend ainsi de six paramètres, rappelés par le tableau 4.3. Les paramètres a et b contrôlent la taille et la forme des objets générés, à travers notamment le rapport b/a . Les deux paramètres ℓ_A et c_A contrôlent l'angularité, et les deux paramètres ℓ_T et c_T contrôlent la texture de la surface et du contour de l'objet. La Fig. 4.9 illustre de manière visuelle le processus de génération d'un objet granulaire par le modèle SPHERE.

Algorithm 2 Génération d'un agrégat par le modèle SPHERE

- 1: Générer le maillage M d'une ellipsoïde de grand axe de longueur a et dont les deux autres axes sont de longueur b
 - 2: Générer les deux champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T de longueur de corrélation respectives ℓ_A et ℓ_T
 - 3: $G_C \leftarrow c_A \times G_A + c_T \times G_T$ avec $c_A + c_T < 1$
 - 4: $M \leftarrow M \cdot G$
-

Le fait de n'utiliser que deux champs aléatoires pour modifier la géométrie du maillage de la forme de base offre une bonne flexibilité tout en évitant le fléau de la dimension présent dans certains modèles. En effet, les modèles basés sur une description des objets sous forme d'harmoniques sphériques (WEI et al. [12], GARBOCZI et al. [168] et UEDA

Paramètres	Domaine	Définition
a	$]0; +\infty[$	Longueur du grand axe
b	$]0; a]$	Longueur des petits axes
ℓ_A	$]0; +\infty[$	Longueur de corrélation de G_A
ℓ_T	$]0; \ell_A[$	Longueur de corrélation de G_T
c_A	$]0; 1[$	Coefficient d'intensité de déformation du champ G_A
c_T	$]0; 1[$	Coefficient d'intensité de déformation du champ G_T

TABLE 4.3 – Liste des paramètres utilisés par le modèle SPHERE.

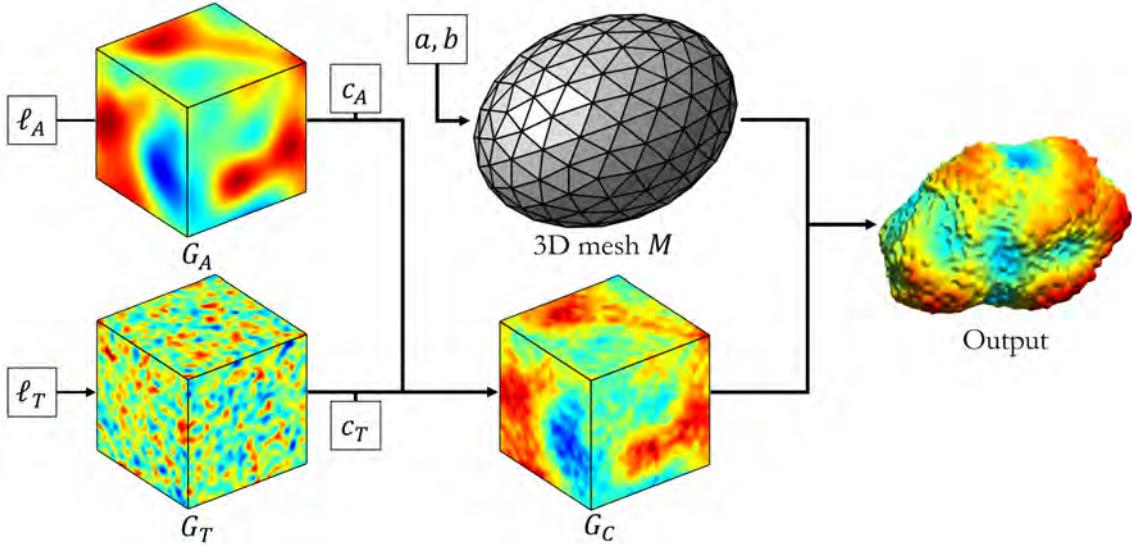


FIGURE 4.9 – Illustration du processus de génération d'un objet granulaire à partir du modèle SPHERE à 6 paramètres.

[169]) ou ceux qui combinent champs aléatoires et descripteurs de Fourier (MOLLON et al. [11]) peuvent dépendre de plus de vingt paramètres différents.

4.3.4 Exemples de réalisations et généralisation

La capacité du modèle SPHERE à générer des objets variés dans sa version à 6 paramètres est illustrée par la Fig. 4.10. En particulier, l'influence du ratio $e = b/a$ sur les caractéristiques morphologiques de forme (élongation, aspect ratio) apparaît clairement, de même que celle des paramètres régissant l'impact des champs Gaussiens aléatoires d'angularité G_A et de texture G_T .

Néanmoins, il peut être intéressant de noter que le modèle peut être naturellement étendu de sorte à le rendre encore plus flexible, afin de générer des objets à la morphologie encore plus complexe et réaliste, même si cela nécessite d'augmenter le nombre de paramètres. En pratique, cela se fait simplement par l'ajout de champs Gaussiens aléatoires de longueur de corrélation et d'intensité différentes, ceci résultant de fait en une augmentation du nombre de paramètres de deux par champ Gaussien aléatoire considéré.

En particulier, cette version étendue du modèle peut se révéler utile dans de nombreux contextes, comme la modélisation fine d'objets granulaires, qui peut permettre de construire des bases de données réalistes d'objets 3D simulés qui seront ensuite comparés

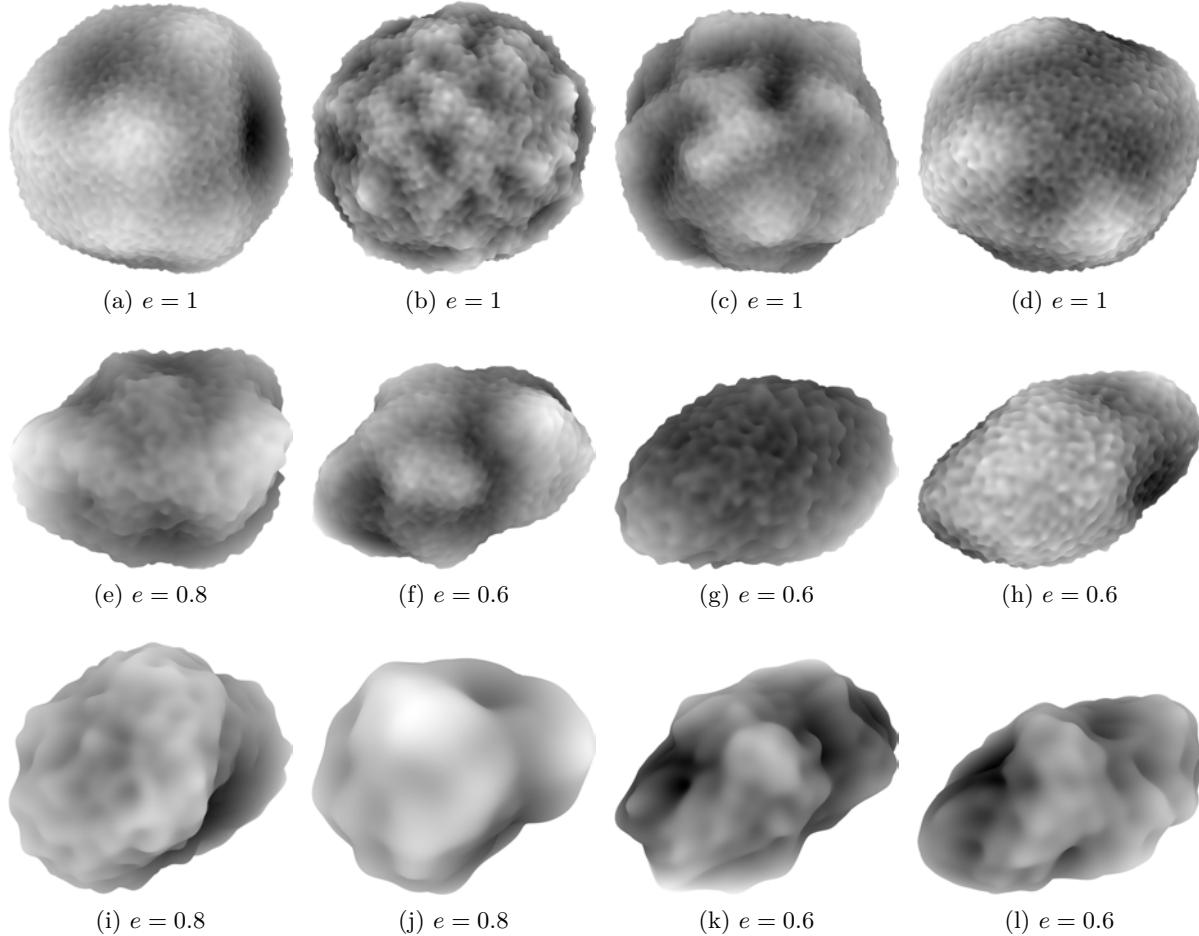


FIGURE 4.10 – Exemple d'objets générés par le modèle SPHERE, avec différentes formes, angularités et textures. Le ratio $e = b/a$ varie de 1 à 0.6 ; et les coefficients d'intensité de déformation appliqués à G_A et G_T sont $c_A \in [0.05; 0, 3]$ et $c_T \in [0.01; 10]$, respectivement.

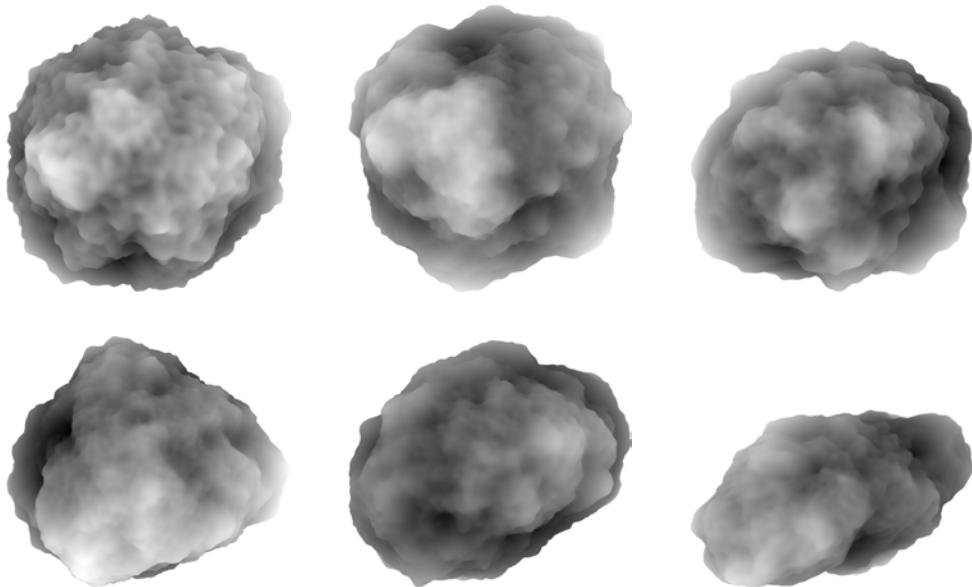


FIGURE 4.11 – Exemple d'objets générés par une extension du modèle SPHERE en utilisant quatre champs Gaussiens aléatoires plutôt que deux.

à des objets réels (ZHAO et al. [77]), ou utilisés comme données d’entraînement pour des modèles d’apprentissage profond (GIANNIS et al. [170]). La Fig. 4.11 montre des exemples d’objets synthétiques générés par une version étendue du modèle SPHERE utilisant 4 champs Gaussiens aléatoires et donc 10 paramètres. Cette extension du modèle sera utilisée pour générer des bases de données d’images photo-réalistes dans le but d’entraîner des modèles de segmentation automatique, évoqués au Chapitre 7.

4.3.5 Influence des paramètres, étude de sensibilité et estimations

Dans cette partie, l’influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 2D et 3D des objets est étudiée. On tente également d’établir des relations basées sur des modèles de régression, afin d’être en capacité d’estimer ces mêmes caractéristiques morphologiques à partir de la paramétrisation du modèle SPHERE.

4.3.5.1 Influence des paramètres et sensibilité

Le contrôle de la taille et de la morphologie 2D et 3D des objets générés par le modèle est un facteur déterminant de l’application d’un processus d’optimisation efficace permettant de faire correspondre les mesures de caractéristiques morphologiques effectuées sur une population synthétique avec celles d’une population d’agrégats réels. Ainsi, dans cette section, on s’intéressera tout particulièrement à l’influence des paramètres du modèle sur certaines caractéristiques 2D et 3D de taille (le volume V et le grand axe projeté a_p), de forme (l’elongation e), et d’angularité ou de texture (la sphéricité Φ , la solidité SLD ou encore la circularité C).

Comme, en pratique, les objets étudiés sont des agrégats observés à l’aide de dispositifs optiques (morphogranulomètre ou caméra CCD) qui produisent des images 2D, un grand nombre de caractéristiques morphologiques étudiées sont des caractéristiques 2D. De plus, dans tout ce chapitre, ainsi que dans le cadre de l’application proposée au chapitre suivant (Chapitre 5), l’intégralité des images réelles étudiées sont capturées par un morphogranulomètre. Comme il l’a été mentionné à la section 4.2.5 précédente, les objets observés à l’aide de ce dispositif ont une tendance à s’orienter dans une direction préférentielle sous l’effet de la gravité, ce qui implique qu’il est raisonnable de supposer qu’ils sont observés dans une direction orthogonale à leur diamètre de Feret maximum, hypothèse renforcée à la vue des images de la Fig. 4.2 et proposées en Annexe C. Cela signifie que pour un objet de base non déformé, on a $e = b/a = b_p/a_p$. Enfin, la Fig. 4.12 illustre la façon dont le grand axe projeté a_p et l’elongation sont calculées directement à partir de l’ellipse projetée équivalente.

Initialisation des paramètres

Afin d’étudier l’influence des paramètres du modèle sur la morphologie des objets synthétiques générés, deux types d’objets de base sont considérés : l’un sphérique (Fig. 4.13a avec $b/a = 1$) et l’autre ellipsoïdal (Fig. 4.13b avec $b/a = 0.7$). L’influence de l’intensité de la déformation appliquée au maillage par les deux champs Gaussiens aléatoires G_A (Fig. 4.13c avec $\ell_A = 25$) et G_T (Fig. 4.13d avec $\ell_T = 1$) est étudiée en faisant varier les paramètres c_A et c_T dans l’intervalle $[0; 0.6]$.

Les Fig. 4.14 et Fig. 4.15 illustrent l’influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 2D et 3D des objets synthétiques générés à partir d’une sphère et d’un ellipsoïde comme objet de base, respectivement. Lors de l’analyse des résultats, il

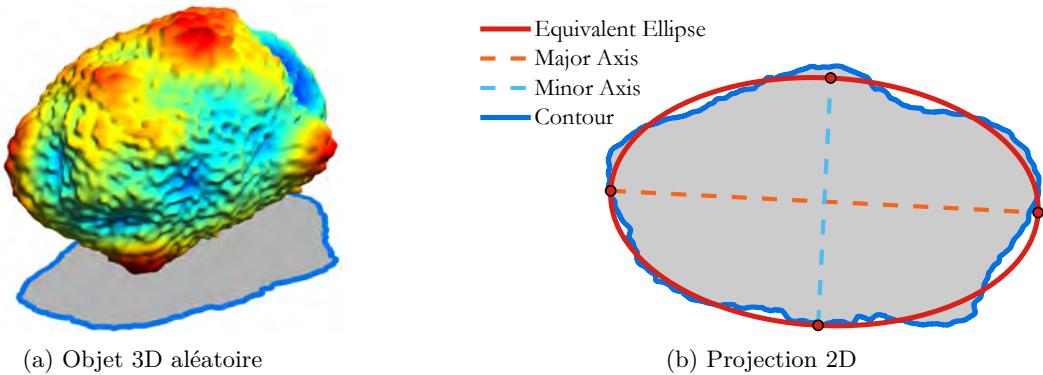


FIGURE 4.12 – Illustration du mode de calcul du grand axe projeté a_p ainsi que du petit axe projeté b_p de l'ellipse équivalente de la projection 2D d'un objet 3D selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum.

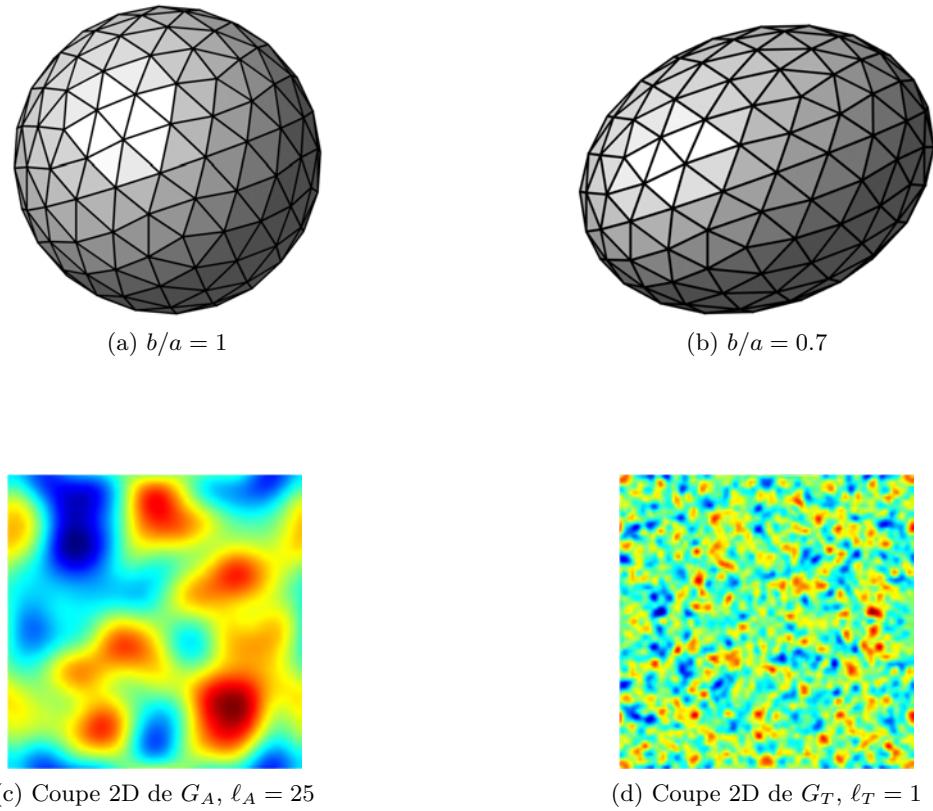


FIGURE 4.13 – Illustration des paramétrisations du modèle SPHERE utilisées pour étudier l'influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques des objets synthétiques générés. Les Fig. 4.13a et Fig. 4.13b montrent les formes de base utilisées pour générer les graphes des Fig. 4.14 et Fig. 4.15, respectivement. Les Fig. 4.13c et Fig. 4.13d montrent des coupes 2D des champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T utilisés pour modéliser l'angularité et la texture des objets, respectivement.

faut garder à l'esprit le fait qu'en pratique, dans le contexte de cette thèse, le coefficient d'intensité de déformation associé au champ Gaussien aléatoire d'angularité G_A n'excède en général pas des valeurs de l'ordre de 0.3 à 0.4, quand le coefficient associé au champ Gaussien aléatoire de texture G_T est de l'ordre de 0.01 à 0.10 tout au plus. Ces valeurs limites sont représentées à l'aide de lignes verticales pointillées pour plus de clarté dans l'analyse des diverses figures.

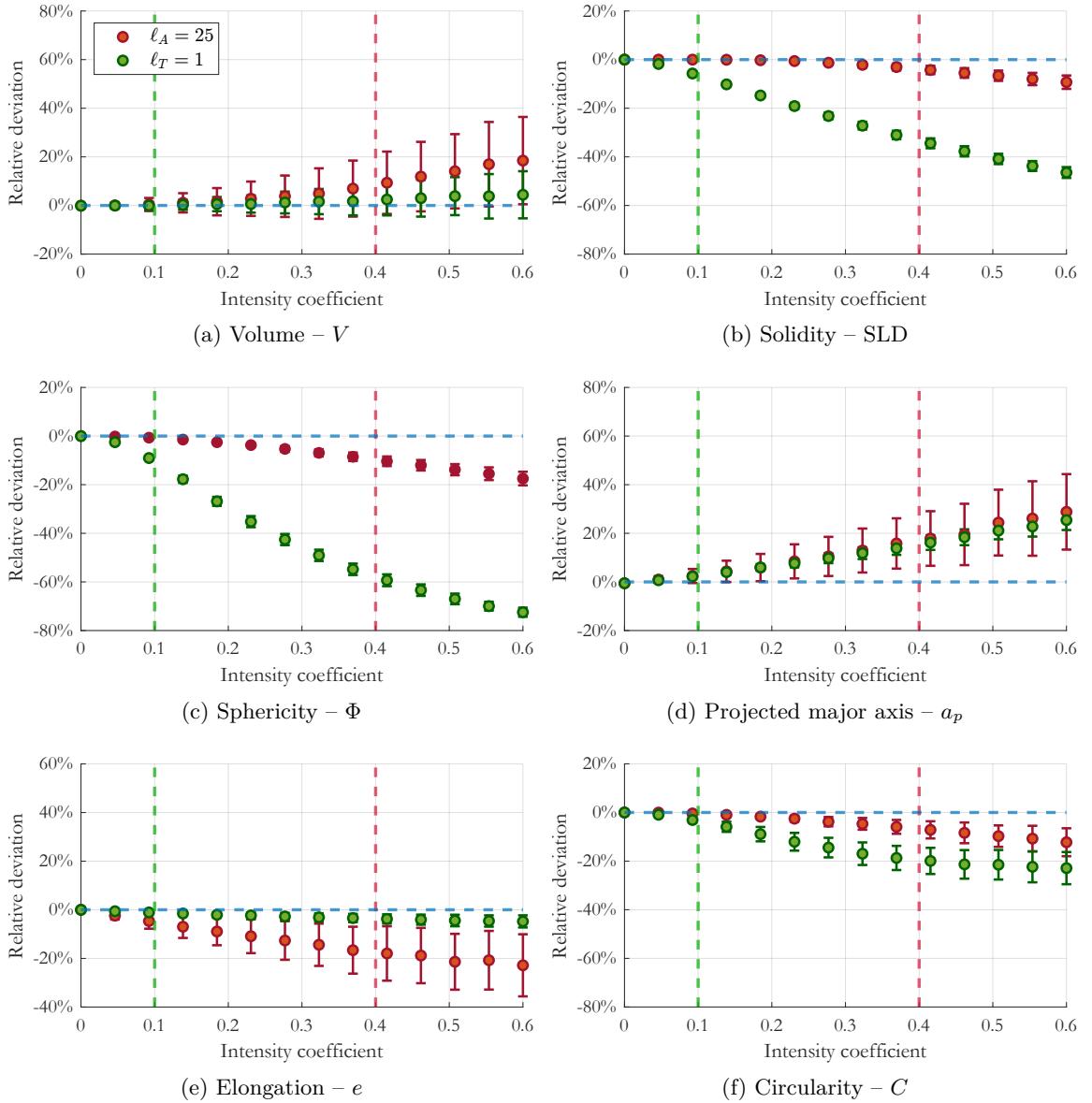


FIGURE 4.14 – Influence des coefficients d'intensité de déformations appliqués par les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T avec des longueurs de corrélation $\ell_A = 25$ et $\ell_T = 1$, respectivement, et un ratio $b/a = 1$ (voir Fig. 4.13a). Les points représentent la valeur moyenne de la déviation relative par rapport à la mesure effectuée sur la forme de base, calculée sur 500 objets synthétiques, et les barres d'erreur représentent $+/-$ un écart-type.

- *Volume* : Quel que soit l'objet de base considéré, le coefficient d'intensité c_A associé au champ aléatoire d'angularité a un impact modéré sur le volume de l'objet (en général moins de 20% d'écart relatif), et le coefficient c_T associé au champ aléatoire

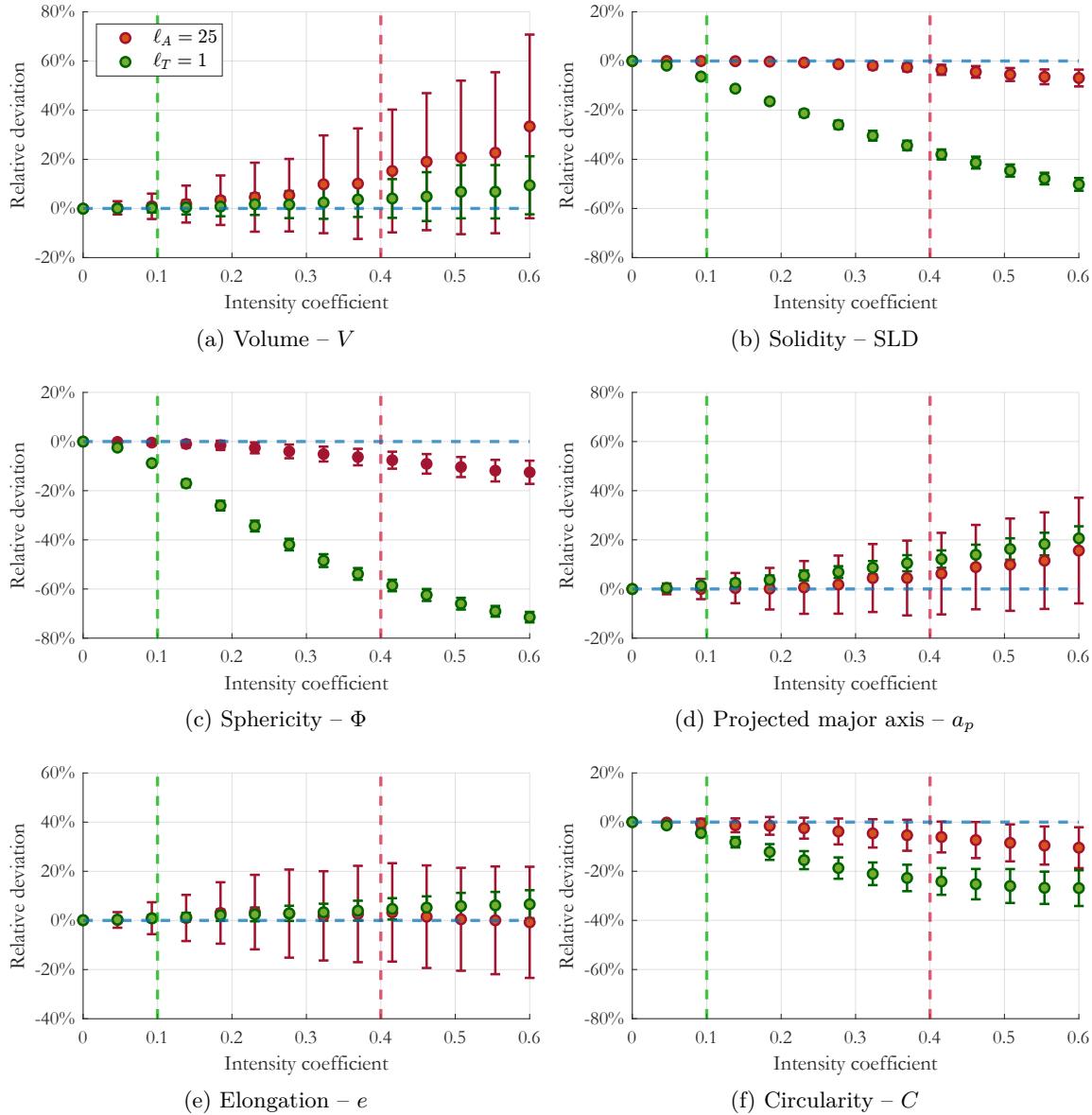


FIGURE 4.15 – Influence des coefficients d'intensité de déformations appliqués par les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T avec des longueurs de corrélation $\ell_A = 25$ et $\ell_T = 1$, respectivement, et un ratio $b/a = 0.7$ (voir Fig. 4.13b). Les points représentent la valeur moyenne de la déviation relative par rapport à la mesure effectuée sur la forme de base, calculée sur 500 objets synthétiques, et les barres d'erreur représentent $+/-$ un écart-type.

de texture a un impact négligeable. De manière générale, les champs aléatoires étant générés à partir de bruit Gaussiens de moyenne nulle, les déformations du maillage induites par les champs aléatoires associés se *compensent* de fait, tant que la *période spatiale*, déterminée par la longueur de corrélation, est suffisamment faible par rapport à la dimension des objets (en l'occurrence, le paramètre de taille a).

- *Solidité & Sphéricité* : Que ce soit pour des objets de base sphériques ou ellipsoïdaux, le coefficient d'intensité c_A a un effet relativement faible sur ces caractéristiques (moins de 5% d'écart relatif dans la plupart des cas), tandis que le coefficient c_T a une influence considérable (quasi-linéaire pour la solidité, et similaire pour la

sphéricité pour des valeurs inférieures à 0.35 environ).

- *Grand axe projeté* : Les coefficients d'intensité c_A et c_T ont un impact relativement faible sur l'écart relatif de la mesure du grand axe projeté de l'ellipse équivalente par rapport à celle de l'objet de base. Pour des coefficients de déformation de l'ordre de 0.3, la déviation est inférieure à 10% et ce, quel que soit l'objet de base considéré.
- *Élongation* : L'écart relatif à la valeur mesurée sur l'objet de base est négligeable, à l'exception du cas d'un objet de base sphérique pour lequel le coefficient d'intensité c_A peut avoir un impact modeste (à peine 10% d'écart relatif pour une intensité de déformation de l'ordre de 0.3).
- *Circularité* : Tout comme pour la mesure de sphéricité en 3D, et ce, quel que soit l'objet de base considéré, l'influence de c_A est très faible (un écart relatif d'à peine 10% pour une intensité de déformation de 0.6) et plutôt modeste pour c_T (un écart relatif de l'ordre de 20% pour une intensité de déformation de 0.3).

De manière générale, les résultats sont conformes aux attentes. Le coefficient d'intensité de déformation associé à l'angularité c_A agit principalement sur la taille des objets, influençant le volume et la longueur du grand axe projeté. Cela est illustré par l'évolution des moyennes et des écarts-types des écarts aux mesures effectuées sur les formes de base. c_A a un effet modéré sur l'élongation (au regard des valeurs moyennes) et un effet particulièrement limité sur les autres caractéristiques. Inversement, le coefficient d'intensité de déformation associé à la texture c_T a un effet relativement faible sur les caractéristiques de taille et de forme (élongation), mais un impact significatif sur les autres caractéristiques telles que la circularité, la sphéricité et la solidité, en particulier étant donné ses effets évidents au niveau de la surface des objets. Enfin, les paramètres a et b , c'est-à-dire les longueurs du grand axe et des deux petits axes de l'ellipsoïde de base, sont les paramètres qui ont la plus grande influence sur la taille et la forme globale des objets (et en particulier sur son élongation en fonction du ratio b/a).

Par ailleurs, le fait que la longueur du grand axe projeté a_p et que l'élongation e , toutes deux calculées à partir de l'ellipse équivalente de la forme projetée selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum, rend relativement aisée l'estimation de la valeur moyenne des paramètres a et b , à supposer que $a = a_p$ et que $b = a_p \times e$, se révèlera particulièrement utile lors de l'ajustement des paramètres du modèle à des données réelles, en particulier dans le cadre d'un processus d'optimisation. Bien entendu, cette hypothèse ne doit être retenue que dans le cadre bien précis où les données sont recueillies à l'aide d'un morphogranulomètre. Dans le cas contraire, le problème s'étend à celui de l'estimation des caractéristiques d'une population d'ellipsoïdes à partir de projections 2D dans des directions arbitraires, ce qui est plus complexe, comme l'ont montré LANGLARD et al. [96].

4.3.5.2 Estimations et prédictions

Les Fig. 4.13a et Fig. 4.13b montrent que la variance de la solidité SLD et de la sphéricité Φ en fonction des coefficients d'intensité de déformation c_A et c_T , ainsi que des paramètres de taille a et b , est extrêmement faible. Pour cette raison, ces deux caractéristiques morphologiques 3D peuvent être prédites avec une précision relativement bonne à partir des paramètres du modèle, à l'aide de modèles de régression linéaire, comme l'illustrent les Fig. 4.16c et Fig. 4.16d.

Les modèles de régression linéaire empiriques suivants sont proposés pour la solidité

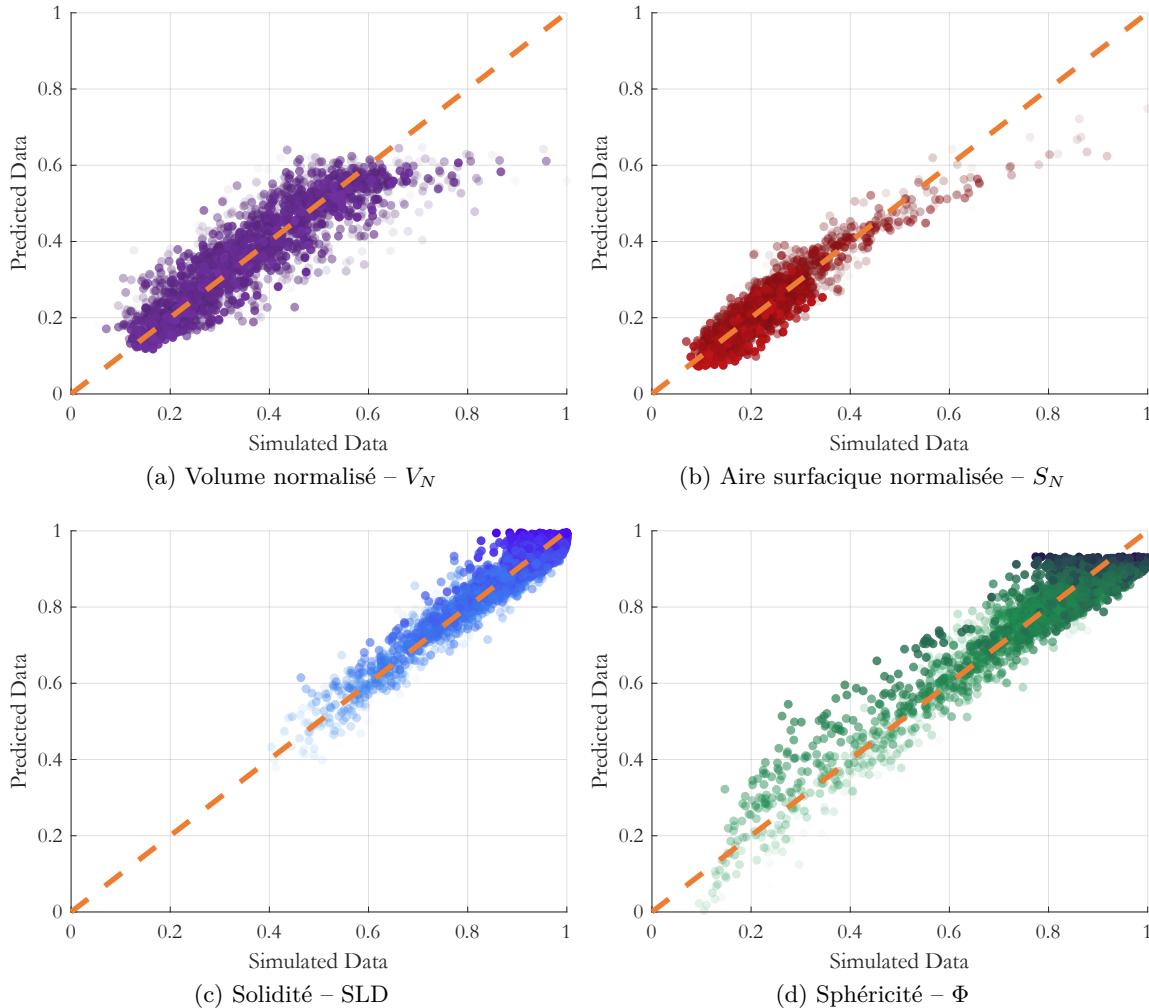


FIGURE 4.16 – Observations versus prédictions pour le volume normalisé, l'aire surfacique normalisée, la solidité et la sphéricité d'objets synthétiques générés par le modèle SPHERE. Les prédictions sont réalisées à partir de modèles de régression linéaire basés sur les paramètres du modèle. Les données sont normalisées. Les points les plus sombres indiquent des valeurs plus faibles pour le coefficient c_A (Fig. 4.16a) et pour le coefficient c_T (Fig. 4.16b, Fig. 4.16c et Fig. 4.16d). Les données synthétiques représentent un ensemble de 5000 observations.

et la sphéricité :

$$\widehat{\text{SLD}} = \alpha_0 + \alpha_1 \times c_T + \alpha_2 \times c_T \ell_T + \varepsilon \quad (4.10)$$

$$\widehat{\Phi}_S = \beta_0 + \beta_1 \times \frac{b}{a} + \beta_2 \times c_T + \beta_3 \times c_T \ell_T + \varepsilon \quad (4.11)$$

avec α_0 et β_0 les intercepts (ordonnée à l'origine) et ε l'erreur résiduelle. De la même manière, deux autres modèles de régression linéaire sont proposés afin d'estimer le volume normalisé et l'aire surfacique normalisée :

$$\widehat{V}_N = \gamma_0 + \gamma_1 \times \frac{b}{a} + \gamma_2 \times c_A \ell_A + \gamma_3 \times c_T \ell_T + \varepsilon \quad (4.12)$$

$$\widehat{S}_N = \eta_0 + \eta_1 \times \frac{b}{a} + \eta_2 \times c_T + \eta_3 \times c_T \ell_T + \varepsilon \quad (4.13)$$

avec V_N et S_N définis de la manière suivante :

$$V_N = V \times \left(\frac{4}{3} \pi a b^2 \right)^{-1} \quad \text{et} \quad S_N = \frac{S}{S_{\text{ref}}} \quad (4.14)$$

et avec S_{ref} qui est évalué à l'aide de la formule de Ramanujan pour l'estimation de l'aire surfacique d'une ellipsoïde :

$$S_{\text{ref}} \approx 4\pi \left(\frac{2a^q b^q + b^{2q}}{3} \right)^{1/q}, \quad \text{avec } q = 1.6075. \quad (4.15)$$

La Fig. 4.16 montre les résultats obtenus par ces modèles prédictifs sur une population de 5000 objets synthétiques générés par le modèle SPHERE. En particulier, les paramètres utilisés pour générer ces données sont choisis aléatoirement et uniformément à partir des intervalles listés par le tableau 4.4. Le tableau 4.5, quant à lui, présente les coefficients de détermination ajustés \bar{R}^2 , calculés à partir de l'estimateur exact de Olkin-Pratt (KARCH [171]).

Paramètres	a	b/a	ℓ_A	c_A	ℓ_T	c_T
Intervalle	[1; 10]	[0.1; 1]	[10; 25]	[0; 0.6]	[1; 10[[0; 0.6]

TABLE 4.4 – Intervalles à partir desquels les paramètres sont uniformément choisis pour l'entraînement et le test des modèles de régression linéaire de la Fig. 4.16.

Caractéristique	V_N	S_N	SLD	Φ
\bar{R}^2	0.740	0.861	0.919	0.915

TABLE 4.5 – Coefficient de détermination ajusté \bar{R}^2 pour les différents modèles de régression linéaire proposés.

En réalité, la Fig. 4.16 et la tableau 4.5 montrent clairement que la solidité et la sphéricité peuvent être prédites de manière relativement fiable à partir des paramètres du modèles en utilisant les relations des équations (4.10) et (4.11), avec un coefficient de détermination \bar{R}^2 supérieur à 0.9 dans les deux cas. Il convient également de mentionner le fait que dans ces deux cas, les paramètres contrôlant la texture des objets (ℓ_T et c_T) sont ceux qui ont le plus d'influence.

A l'inverse, les résultats obtenus par les modèles de régression pour le volume normalisé et l'aire surfacique normalisée sont plus mitigés, avec des coefficients de détermination \bar{R}^2 de 0.74 et 0.86, respectivement.

De manière générale, les caractéristiques de forme et d'angularité, qui sont sans dimensions, sont plus faciles à prédire. Cela est en partie dû à leur faible variance en fonction des paramètres du modèle, comme l'illustrent les équations (4.10) et (4.11). En revanche, les caractéristiques de taille, comme le volume V , sont bien plus difficiles à prédire avec précision, non seulement du fait de leur plus forte volatilité en fonction des paramètres du modèle, mais aussi parce qu'elles dépendent fortement de l'intervalle au sein duquel le paramètre ℓ_A est choisi. En effet, comme il l'a été dit précédemment, les déformations induites par les champs Gaussiens aléatoires, et en particulier par G_A ne se compensent plus dès lors que la longueur de corrélation ℓ_A est suffisamment élevée pour être du même ordre de grandeur que la taille des objets synthétiques générés par le modèle. A ce moment, la volatilité des caractéristiques de taille devient trop élevée pour que ces dernières puissent être prédites avec précision pour chaque objet, de manière individuelle.

4.3.6 Optimisation et validation sur une population synthétique

Dans cette partie, la méthode permettant d'ajuster les paramètres du modèle afin de générer une population d'objets synthétiques dont les caractéristiques morphologiques 2D (et si possible 3D) correspondent à celles d'une population d'objets réels est détaillée. De la même manière que dans la section 4.2.5 au sujet du modèle GRAPE, une fonction de coût sera définie, et l'on se placera dans le cadre où les images des objets réels sont capturées à l'aide d'un morphogranulomètre, en faisant l'hypothèse que ces derniers sont observés orthogonalement à leur diamètre de Feret maximum.

4.3.6.1 Définition du processus d'optimisation

Le processus d'optimisation consiste en la définition d'une fonction de coût qu'il s'agira de minimiser afin de déterminer un ensemble de paramètres optimaux qui permettent de faire correspondre les caractéristiques morphologiques des objets synthétiques générés par le modèle SPHERE avec celles des objets réels mesurées par analyse d'image. Néanmoins, certains paramètres du modèle peuvent être estimés directement à partir des caractéristiques morphologiques mesurées sur les images projetées dans des directions orthogonales au diamètre de Feret maximum. Ceci est particulièrement vrai pour la longueur du grand axe a et l'élongation e , qui peuvent être utilisées pour estimer les paramètres a et b du modèle SPHERE.

Ainsi, la méthode proposée est constituée de deux étapes :

1. L'estimation des paramètres a et b correspondants aux longueurs des axes de l'objet de base, à l'aide de mesures effectuées par analyse d'image.
2. La définition et la minimisation d'une fonction de coût afin de déterminer les quatre autres paramètres.

Dans toute la suite, ces deux étapes distinctes et complémentaires sont explicitées.

Estimations basées sur des mesures directes

Comme mentionné dans les sections précédentes, les longueurs du grand axe projeté, du petit axe projeté, et l'élongation projetée sont déterminées à partir de l'ellipse équivalente de la projection 2D d'un objet 3D selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum (voir Fig. 4.12). Ces caractéristiques projetées peuvent être mesurées sur des images 2D des objets réels capturées par un morphogranulomètre et utilisées pour estimer les paramètres du modèle a et b . En effet, il existe une forte corrélation entre la longueur du grand axe projeté a_p et la longueur du grand axe a de l'ellipsoïde de base, avec un coefficient de détermination ajusté $\bar{R}^2 = 0.988$, d'une part (voir Fig. 4.17a), et entre l'élongation projetée $e_p = b_p/a_p$ et l'élongation $e = b/a$, avec un coefficient de détermination ajusté $\bar{R}^2 = 0.977$, d'autre part (voir Fig. 4.17b), sachant que le produit $a_p \times e_p$ peut être utilisé comme estimation du paramètre b , longueur des petits axes de l'ellipsoïde de base.

Définition de la fonction de coût

Après avoir estimé les paramètres a et b par des techniques d'analyse d'image, comme présenté au paragraphe précédent, il est nécessaire de déterminer les quatre autres paramètres du modèle SPHERE. Pour ce faire, la fonction de coût définie par l'équation (4.8) définie dans la section 4.2.5 est enrichie. En effet, il a semblé intéressant d'y intégrer des erreurs relatives de caractéristiques morphologiques calculées sur des reconstructions

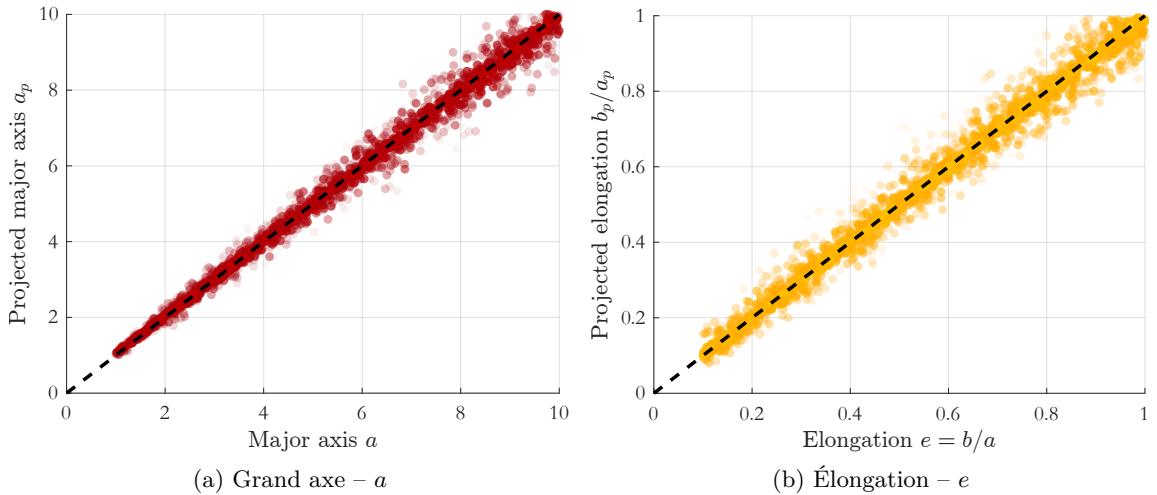


FIGURE 4.17 – Illustration de la corrélation entre l’élargissement b/a et l’élargissement projetée b_p/a_p d’une part, et entre la longueur de grand axe a et la longueur de grand axe projeté a_p d’autre part. L’ensemble de données utilisé est généré à l’aide des paramètres du tableau 4.4 avec $c_A < 0.3$.

partielles des projections des objets considérées. L’idée principale était de revenir à la philosophie générale du modèle, à savoir une description des objets multi-échelle, à l’aide de caractéristiques de taille, de forme, d’angularité, et de texture, avec des paramètres qui agissent sur chacune de ces échelles de manière relativement indépendante. Les paramètres agissant principalement sur les caractéristiques de taille et de forme (à savoir a et b) étant estimés par analyse d’image, seuls les paramètres agissant principalement sur l’angularité (ℓ_A et c_A) et la texture (ℓ_T et c_T) sont obtenus par optimisation de la fonction de coût définie comme suit :

$$\begin{aligned} F_{\text{cost}}(\Omega) = & \Delta(A) + \Delta(A_k) + \Delta(P) + 2\Delta(\text{AR}) \\ & + \Delta(A_c) + \Delta(A_{c,k}) + \Delta(P_k) + \Delta(a_p) \end{aligned} \quad (4.16)$$

avec $\Delta(X)$ l’erreur relative commise sur les valeurs moyennes de caractéristiques morphologiques X , A étant l’aire projetée, A_c l’aire convexe projetée, P le périmètre, a_p la longueur de grand axe projeté de l’ellipse équivalente, AR l’aspect ratio, et X_k la caractéristique morphologique X mesurée sur une reconstruction de la forme projetée à partir de k harmoniques des descripteurs de Fourier elliptiques (KUHL et al. [165] et CRAMPTON [166]), et $\Omega = \{\ell_A, \ell_T, c_A, c_T\}$ est un sous ensemble de quatre paramètres du modèle SPHERE.

Le fait de comparer à la fois les images 2D projetées, à travers les mesures de caractéristiques morphologiques, et des reconstructions partielles limitées à k harmoniques des descripteurs de Fourier elliptiques permet de mieux prendre en compte l’influence de chacun des paramètres à déterminer. La comparaison des deux contours partiels devrait ainsi permettre de limiter l’influence des paramètres ℓ_T et c_T qui agissent principalement sur la texture fine et la granularité des contours. Le choix du nombre k d’harmoniques utilisées pour cette reconstruction est crucial et est déterminé à l’aide du concept de *Fourier power* (COSTA et al. [172]), qui permet de quantifier la déviation d’une reconstruction partielle d’un contour par rapport à la forme d’origine, en fonction du nombre d’harmoniques utilisées. En pratique, la *Fourier power* de la k -ième harmonique est définie de la manière suivante :

$$\text{Fourier power} = \frac{a_k^2 + b_k^2 + c_k^2 + d_k^2}{2} \quad (4.17)$$

avec a_k , b_k , c_k , et d_k les coefficient de Fourier associés aux projections du contour à reconstruire selon les axes x et y , respectivement. En calculant la *Fourier power* cumulée pour toutes les harmoniques jusqu'à un rang n correspondant à la fréquence de Nyquist (CRAMPTON [166]), il est possible de définir un seuil pour déterminer le rang de l'harmonique k à utiliser pour reconstituer la forme simplifiée. En pratique, dans le contexte de cette thèse, le seuil a été fixé à 99.9%. la Fig. 4.18 illustre le processus de reconstruction d'un contour fermé à l'aide d'un nombre croissant d'harmoniques, et Fig. 4.18a montre que le contour peut être reconstruit avec une *Fourier power* cumulée au seuil de 99.9% à l'aide d'un nombre $k = 10$ d'harmoniques.

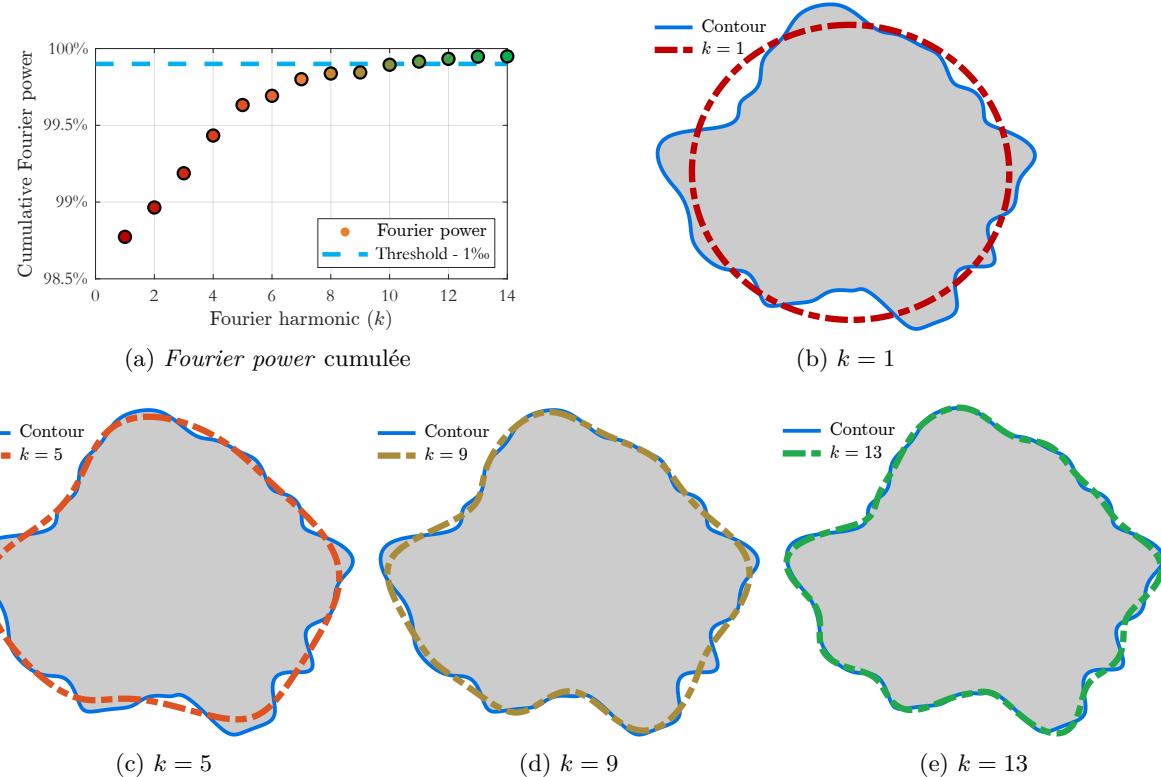


FIGURE 4.18 – Évolution de la *Fourier power* cumulée (4.18a) et de la reconstruction partielle du contour en fonction du nombre d'harmoniques.

La fonction de coût F_{cost} définie par l'équation (4.16) est optimisée à l'aide de l'algorithme PSO (Particle SWARM Optimization) décrit par KENNEDY et al. [173] afin d'ajuster les paramètres du modèle et d'obtenir une population d'objets synthétiques aux caractéristiques morphologiques souhaitées. En pratique, les caractéristiques morphologiques 2D projetées sont mesurées par analyse d'image et les valeurs moyennes sont utilisées pour calculer les erreurs relatives permettant de définir la fonction de coût.

4.3.6.2 Génération d'une population d'agrégats synthétiques

Afin de tester et valider la méthode décrite précédemment, une population de 250,000 objets synthétiques est générée à l'aide du modèle SPHERE. De la même manière que lors de la génération d'une population d'objets synthétiques par le modèle GRAPE à la section 4.2.5.1, il existe une corrélation entre la taille et la forme des objets. L'ensemble de paramètres Ω_s utilisé pour générer la nouvelle population synthétique est ainsi en partie

défini à l'aide de variables aléatoires et s'écrit de la manière suivante :

$$\Omega_s = \{a_s, b_s, \ell_{A,s}, \ell_{T,s}, c_{A,s}, c_{T,s}\} \quad (4.18)$$

avec

$$a_s \sim \text{LogNormal}(\mu_s, \sigma_s^2), \mu_s = \log(0.5) \text{ et } \sigma_s = 0.3 \quad (4.19)$$

$$b_s \sim a_s \times \text{Beta}(\alpha_s, \beta_s), \alpha_s = 10 + 0.5 \times a_s \text{ et } \beta_s = 1 \quad (4.20)$$

$$c_{T,s} \sim |\mathcal{N}(0.1, 0.01^2)| \quad (4.21)$$

et avec les autres paramètres listés au sein du tableau 4.6.

Paramètre	$\ell_{A,s}$	$c_{A,s}$	$\ell_{T,s}$
Valeur	15	0.25	2

TABLE 4.6 – Paramètres utilisés pour générer une population de 250,000 objets aléatoires synthétiques à l'aide du modèle SPHERE.

Ainsi, la population d'objets synthétiques est générée à partir de deux distributions de probabilité conjointes pour les longueurs des axes principaux de l'ellipsoïde qui constituent la forme de base du modèle SPHERE (paramètres a et b du modèle), et d'une distribution normale pour l'intensité du champ Gaussien aléatoire de texture G_T , ce qui induit une corrélation entre les propriétés morphologiques des objets générés. À l'issue de la génération de l'échantillon de 250,000 objets aléatoires (Fig. 4.19), la méthode décrite dans les sections précédentes est appliquée afin d'obtenir une estimation des paramètres du modèle.

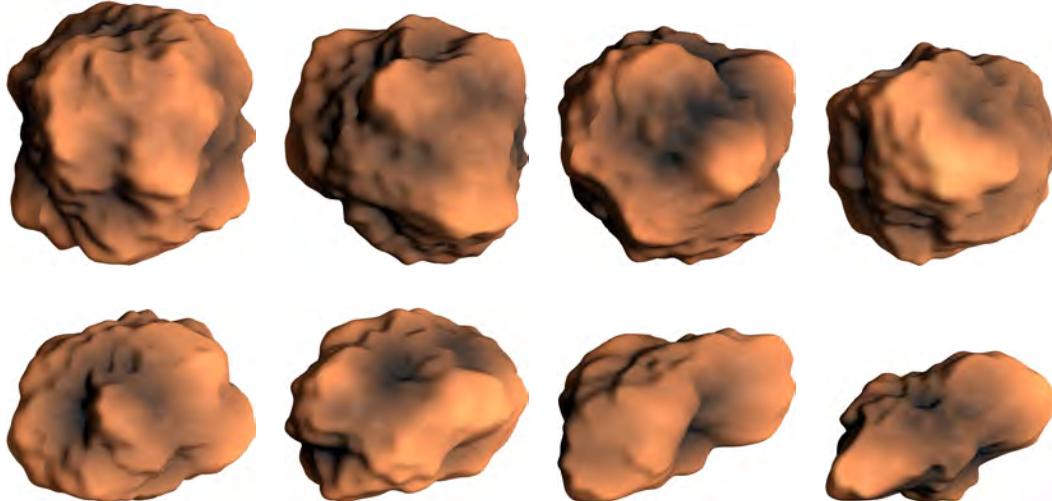


FIGURE 4.19 – Exemple d'objets générés par le modèle SPHERE à partir de l'ensemble des paramètres Ω_s et qui composent l'échantillon de 250,000 objets utilisés pour la validation numérique de la méthode d'optimisation.

4.3.6.3 Validation de la méthode

Les estimateurs \hat{a}_s et \hat{b}_s sont deux variables aléatoires dépendantes de distributions de probabilités conjointes, obtenues à partir des distributions de probabilité à noyau f_{a_p} et $a_p \times f_{e_p}$, calculées à partir des histogrammes de longueur de grand axe projeté a_p et

d'élongations projetées $e_p = b_p/a_p$ des ellipses projetées équivalentes. Les quatre autres paramètres sont ensuite estimés en appliquant l'algorithme d'optimisation PSO à la fonction de coût F_{cost} définie par l'équation (4.16), cette dernière étant redéfinie en fonction des erreurs relatives par rapport aux valeurs moyennes des caractéristiques morphologiques mesurées par analyse d'image sur des projections 2D des objets synthétiques. Le résultat de ce processus est un paramétrage optimal $\hat{\Omega}_s$, défini comme suit :

$$\hat{\Omega}_s = \{\hat{a}_s, \hat{b}_s, \hat{\ell}_{A,s}, \hat{\ell}_{T,s}, \hat{c}_{A,s}, \hat{c}_{T,s}\} \quad (4.22)$$

avec \hat{x} l'estimateur du paramètre x et \hat{a}_s et \hat{b}_s deux variables aléatoires.

Le tableau 4.7 indique les écarts entre les valeurs moyennes des deux populations, à savoir l'échantillon de 250,000 objets synthétiques généré à l'aide de l'ensemble de paramètres $\hat{\Omega}_s$ d'une part, et une population de 10,000 objets générée par le modèle SPHERE et utilisant le paramétrage optimal $\hat{\Omega}_s$ d'autre part, et la Fig. 4.20 montre les écarts entre les densités de probabilité des caractéristiques morphologiques de ces deux populations. Les résultats obtenus tendent à valider la méthode, avec des erreurs relatives sur les valeurs moyennes toutes inférieures à 6% et des densités de probabilité estimées se trouvant en accord avec les données théoriques. En d'autres termes, la méthode proposée pour estimer les paramètres du modèle à partir de mesures de caractéristiques morphologiques sur des projections 2D d'une population d'objets 3D, et notamment en utilisant un processus d'optimisation, semble permettre de déterminer un paramétrage du modèle avec lequel une population d'objets représentative de la population initiale peut être générée afin d'en estimer les caractéristiques morphologiques 3D. Il convient toutefois de rappeler que la méthode proposée n'est valable que dans le cas où les images sont observées dans une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum.

Caractéristiques	2D						3D					
	A (px ²)	A_c (px ²)	P (px)	AR	Co	C	V (px ³)	V_c (px ³)	S (px ²)	ESD (px)	SLD	Φ
Échantillon initial	95.7	96.8	34.3	0.85	0.99	0.93	680	765	449	9.93	0.88	0.66
Modèle SPHERE	96.4	97.4	34.6	0.87	0.99	0.94	713	809	462	10.4	0.88	0.67
Erreur relative (%)	0.7%	0.6%	0.8%	1.9%	0.1%	0.7%	4.9%	5.8%	3.1%	4.3%	0.3%	1.1%

TABLE 4.7 – Comparaison entre les valeurs moyennes des caractéristiques morphologiques de l'échantillon de 250,000 objets générés par le modèle SPHERE à l'aide de l'ensemble de paramètres Ω_s et les valeurs moyennes des caractéristiques morphologiques des objets générés par le modèle SPHERE à l'aide du paramétrage optimal $\hat{\Omega}_s$ obtenu à l'aide de la méthode proposée. Les valeurs sont arrondies aux deux décimales les plus proches.

4.3.7 Discussion

Le modèle SPHERE est un modèle géométrique stochastique qui offre un bon compromis entre flexibilité et performance, pouvant générer des objets à la morphologie complexe, tout en étant simple à mettre en œuvre et très rapide en terme de temps de calcul. En effet, et bien que ce point sera abordé plus en détail au chapitre suivant (Chapitre 5) lors de la comparaison des différents modèles, la génération de 1,000 objets à partir de deux champs aléatoires 3D discrétilisés sur une grille de 50^3 px et du maillage d'une sphère composée de 10^4 faces nécessite environ 20 secondes sur une machine équipée d'un processeur Intel(R) Core(TM) i9-12900KF à 3.19Ghz et de 64GB de RAM; ce temps tombant à 4.5 secondes lorsque la génération des objets est parallélisée. Pour donner un ordre de grandeur, la

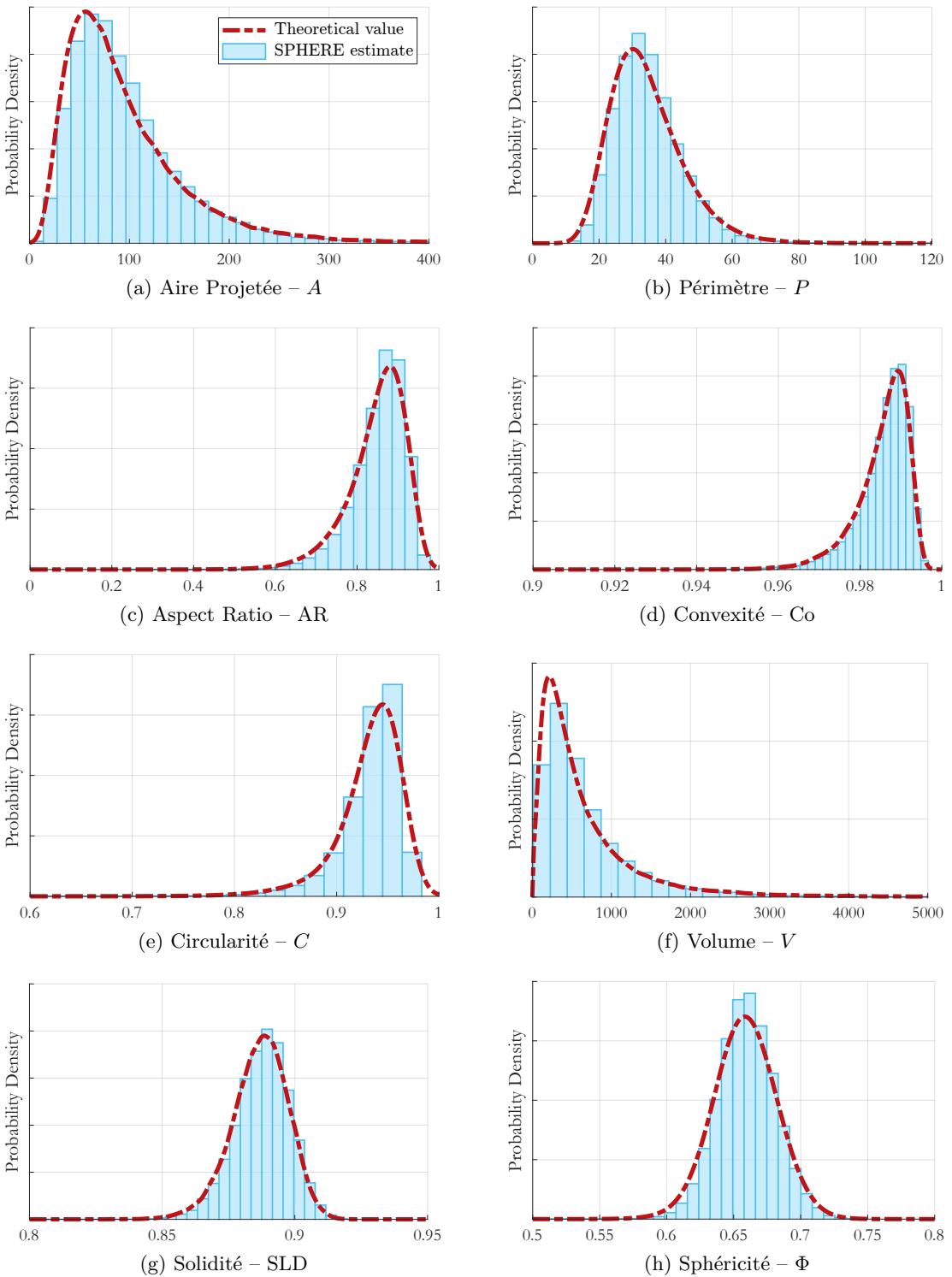


FIGURE 4.20 – Illustration des résultats obtenus lors de la validation numérique de la méthode proposée. Les lignes rouges en pointillés représentent les densités de probabilité à noyau estimées sur l'échantillon de 250,000 objets générés par le modèle SPHERE à partir du jeu de paramètres Ω_s . Les histogrammes représentent les caractéristiques morphologiques de la population générée par le modèle SPHERE à partir de l'ensemble de paramètres $\hat{\Omega}_s$ estimés par la méthode d'optimisation proposée.

génération du même nombre d'objets avec le modèle GRAPE est pratiquement dix fois plus long.

Par conséquent, bien que le modèle SPHERE nécessite un nombre plus important de paramètres que le modèle GRAPE, il est en réalité mieux adapté à la modélisation des agrégats étudiés dans cette thèse. En théorie, SPHERE est moins flexible car seuls des objets étoilés peuvent être générés. Cependant, il offre un meilleur contrôle de la morphologie des objets, évitant ainsi les problèmes de simplification excessive qui peuvent survenir lors de la modélisation de ce type d'objets (HAN et al. [174]). De plus, SPHERE permet de simplifier considérablement le processus d'optimisation en l'accélérant et en s'affranchissant de certaines contraintes comme l'estimation *a priori* du volume des objets, ce qui constituait l'un des principaux écueils du modèle GRAPE. Par ailleurs, le modèle SPHERE ne reposant pas sur un processus itératif, le temps de génération des objets est également indépendant de leur taille.

Enfin, l'objectif consistant à conserver un nombre de paramètres restreint afin d'éviter le fléau de la dimension a bien été atteint. Néanmoins, bien que le modèle lui-même ne dépende que de 6 paramètres, des choix doivent être faits concernant les 3 méta-paramètres, à savoir le nombre de sommets dans le maillage (fixé à 10,200) et les tailles de grille n_A et n_T utilisées pour générer les champs gaussiens G_A et G_T , tous deux fixés à 50^3 px³. En effet, ce nombre de sommets permet au maillage d'être suffisamment fin pour que la différence entre le volume d'une sphère modélisée de cette manière et la valeur théorique soit inférieure à 0.1%, ce qui est négligeable pour cette application particulière. L'annexe B discute de l'influence du type de maillage et du nombre de sommets sur les mesures de caractéristiques morphologiques. Les tailles de grille n_A et n_T ont été choisies empiriquement afin que le modèle reste rapide, tout en permettant aux longueurs de corrélation ℓ_A et ℓ_T d'être choisies sur des intervalles suffisamment grands pour l'application considérée. Pour modéliser des détails plus fins et donc pouvoir utiliser des longueurs de corrélation plus petites, avec le champ Gaussien aléatoire G_T notamment, il serait nécessaire d'augmenter les tailles de grille correspondantes en conséquence.

En revanche, comme dans le cas du modèle GRAPE, le processus d'optimisation nécessite toujours une hypothèse forte sur l'orientation selon laquelle les objets sont observés et, bien que cette hypothèse semble raisonnable dans le cas d'images capturées par un morpho-granulomètre, il serait heureux de disposer d'une méthode permettant de s'affranchir de cette contrainte particulièrement restrictive, ce qui autoriserait, par exemple, l'exploitation d'images réalisées *in-situ*. Une première solution serait de travailler sur des populations de projections simplifiées, à savoir des ellipses, et de remonter ainsi aux paramètres a et b , c'est-à-dire, les longueurs des axes principaux des formes de base. Néanmoins, LANGLARD et al. [96, 97] ont montré que ce problème pouvait se révéler particulièrement complexe, et que même avec une connaissance *a priori* des types de distributions de taille des axes principaux des ellipsoïdes, les erreurs réalisées lors de l'estimation de ces distributions pouvait être trop importantes pour être utilisées de manière fiable dans le cadre de leur application. La deuxième solution passe par le développement d'un modèle alternatif, présenté à la section suivante.

4.4 Modèle VOX-STORM

4.4.1 Genèse du modèle

Le modèle VOX-STORM (VOXel-based STOchastic geometRical Model) a été conçu dans le but de s'affranchir de toutes les contraintes pesant sur les deux précédents modèles. L'objectif était de concevoir un modèle qui permettrait de générer des objets aussi complexes que le permet le modèle GRAPE, tout en gardant un bien meilleur contrôle sur la surface et la morphologie de ces derniers, comme l'autorise le modèle SPHERE. Ainsi, il ne serait plus nécessaire de se limiter à des objets étoilés. Par ailleurs, la contrainte d'estimation a priori du volume des objets du modèle GRAPE ainsi que la contrainte portant sur la direction selon laquelle les objets sont observés, à savoir une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum, se devaient d'être levées. Enfin, il était impératif que le temps de génération des objets soit de l'ordre de ce que propose le modèle SPHERE, afin de pouvoir appliquer un processus d'optimisation sur des populations suffisamment importantes pour être représentatives.

L'idée de départ a été de s'inspirer de la manière dont les agrégats se forment dans un réacteur, les particules primaires adhérant progressivement à la surface ce dernier en nombre dépendant non seulement de leur concentration dans le milieu, mais aussi de nombreux autres paramètres environnementaux et opératoires. En essence, cette approche correspond parfaitement à un modèle basé sur un empilement de sphères dures. Néanmoins, dans une recherche de simplification et de gain de performances, les sphères dures sont remplacées par des voxels. Ainsi, on peut modéliser le processus d'agrégation par itérations successives en activant des voxels à la frontière d'un objet en cours de génération. Cette approche simplifiée permet d'accélérer le processus de génération des agrégats de manière considérable, le nombre de positions candidates au placement d'une nouvelle particule étant limité à chaque itération, et la géométrie des particules primaires étant extrêmement simple. Par ailleurs, dans le but de mieux contrôler la surface des objets générés, et afin d'éviter les problèmes que posent les calculs d'aire surfacique et de périmètres sur des objets discrétilisés, la surface des objets est modélisée à l'issue du processus itératif par une *alpha-shape*, une généralisation du concept d'enveloppe convexe, parfois appelé enveloppe concave (EDELSBRUNNER et al. [175]).

Ainsi, le modèle VOX-STORM est basé sur une approche duale, entre voxélisation et maillage, et se propose d'offrir tous les avantages des deux modèles précédents, tout en s'affranchissant de leurs limites.

4.4.2 Description générale du modèle

4.4.2.1 Présentation du modèle

Le modèle proposé est basé sur un processus itératif au cours duquel un objet voxélisé croît, le nombre de voxels le constituant augmentant en moyenne de manière proportionnelle à sa surface à chaque itération. L'algorithme de génération des objets commence par définir le voxel central d'une grille tridimensionnelle comme étant actif. À chaque itération, un noyau de convolution est utilisé afin d'explorer l'espace environnant à la recherche de voxels candidats à l'activation. Ce dernier est pensé pour refléter l'éventuelle anisotropie du matériau et permet de jouer sur la probabilité d'activation des voxels dans certaines directions.

Par ailleurs, la probabilité d'activation d'un voxel est également influencée par deux

champs gaussiens aléatoires qui simulent les facteurs environnementaux et/ou les propriétés des matériaux affectant la croissance de l'objet et offrent un meilleur contrôle de son angularité, de sa texture, ainsi que de sa porosité éventuelle. La sélection des voxels pour l'activation se fait de manière probabiliste, avec des probabilités proportionnelles aux valeurs obtenues par l'opération de convolution modulée par les champs gaussiens aléatoires. Ce processus est répété pour un nombre prédéfini n_i d'itérations.

À l'issue du processus itératif, l'alpha-shape de l'objet voxélisé est calculée. Cette étape permet d'obtenir un maillage de la surface de l'objet, et de contrôler encore plus finement sa morphologie, grâce à un paramètre α . De plus, le calcul des caractéristiques morphologiques d'un objet à partir du maillage de sa surface est non ambigu, contrairement au cas d'un objet voxélisé.

Dans la section suivante, le concept d'alpha-shape est défini plus en détail, puis l'algorithme permettant de générer un objet synthétique à l'aide du modèle VOX-STORM est présenté.

4.4.2.2 Définition d'une alpha-shape

Les alpha-shapes sont une généralisation du concept d'enveloppe convexe et permettent une description plus détaillée du contour d'un nuage de points. Le concept, introduit par EDELSBRUNNER et al. [175], repose sur un paramètre α permettant de trouver un équilibre entre la granularité du contour d'un nuage de points et son approximation par l'enveloppe convexe.

La procédure de génération d'une alpha-shape peut être résumée en trois étapes :

1. Calculer la triangulation de Delaunay pour le nuage de points donné.
2. Pour un α donné, identifier tous les simplexes (sommets, arêtes, triangles, etc.) de la triangulation qui satisfont la condition suivante : Un simplexe est inclus si son cercle circonscrit (en 2D) ou sa sphère circonscrite (en 3D) a un rayon inférieur ou égal à α .
3. L'alpha-shape est formée par l'union des simplexes sélectionnés. Lorsque α varie de 0 à $+\infty$, cette dernière varie de l'ensemble de points lui-même à son enveloppe convexe.

Le choix du paramètre α permet une certaine souplesse dans la modélisation de la frontière. Par conséquent, dans le cadre qui nous intéresse, le fait de considérer un maillage dérivé d'une alpha-shape plutôt que de la forme voxellisée de l'objet permet de mieux contrôler ses propriétés morphologiques. La Fig. 4.21 illustre l'effet du paramètre α sur le contour de l'alpha-shape d'un nuage de points.

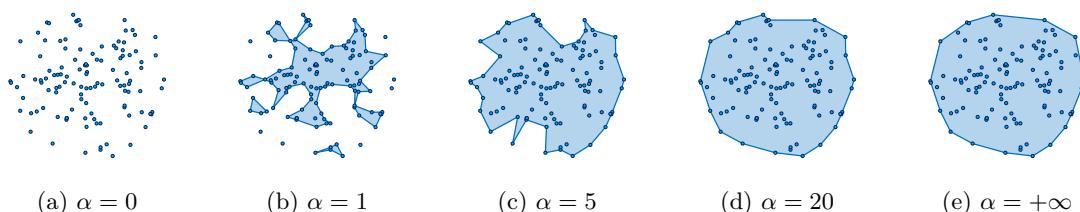


FIGURE 4.21 – Illustration du contour de l'alpha-shape d'un nuage de points allant de $\alpha = 0$, ce qui donne l'ensemble de points lui-même, à $\alpha = +\infty$, ce qui donne l'enveloppe convexe.

Paramètre	Domaine	Définition
n_i	$[0; +\infty[$	Nombre d'itérations
λ	$]0; 1]$	Proportion de voxels à activer dans B
w	$[0; +\infty[$	Poids associé au noyau de convolution K_w
α	$[\sqrt{2}; +\infty[$	Paramètre de lissage de l'alpha-shape
ℓ_A	$[0; +\infty[$	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_A
ℓ_T	$[0; +\infty[$	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_T
c_A	$[0; +\infty[$	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_A
c_T	$[0; +\infty[$	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_T

TABLE 4.8 – Liste des 8 paramètres de base du modèle VOX-STORM.

4.4.3 Description de l'algorithme

La procédure de génération d'un objet 3D à l'aide du modèle VOX-STORM comprend deux étapes principales : la génération de la structure voxélisée à l'aide d'un processus stochastique et la génération du maillage à l'aide d'une alpha-shape. La méthode de génération de la structure voxélisée est décrite par l'Algorithme 3. Il s'agit d'un processus itératif durant lequel le nombre de voxels est augmenté par l'activation successive d'éléments appartenant à la frontière. Les points principaux sont les suivants :

1. Une grille W vide de taille n_g^3 est initialisée à 0 et le voxel central est activé (on lui affecte la valeur 1).
2. Un noyau Gaussien K_w est défini, le paramètre w contrôlant en partie la forme (l'elongation) de l'objet.
3. Deux champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T avec des longueurs de corrélation respectives ℓ_A et ℓ_T sont générés. Ils sont élevés à la puissance c_A et c_T , respectivement, pour modifier leur intensité. En particulier, ils sont utilisés pour contrôler l'angularité (G_A) et la texture (G_T) de l'objet.
4. À chaque itération, les étapes suivantes sont répétées.
 - La frontière étendue B de W est calculée à l'aide du noyau de convolution K_w .
 - (Optionnel) La grille W_{filled} est calculée en effectuant une opération morphologique de remplissage (*hole filling*, SOILLE [176]) sur la grille W afin de prendre en compte la porosité.
 - Les éléments de W_{filled} (ou W) sont retirés de la frontière étendue B .
 - La fonction de densité de probabilité d'activation P_{act} est calculée et modulée par les champs Gaussiens aléatoires.
 - Un nombre n_a de voxels sont activés selon la distribution P_{act} . Ce nombre dépend d'une distribution de Poisson dont l'intensité est proportionnelle au cardinal de B et à un paramètre λ .
5. L'alpha-shape S_α de la structure voxellisée contenue dans W est calculée et le maillage de l'objet est défini comme la surface de S_α .

Sous cette forme, le modèle dépend de 8 paramètres, qui sont listés dans le tableau 4.8, et dont l'influence sur les propriétés morphologiques des objets sera examinée dans la section suivante. Il n'y a qu'un seul méta paramètre, à savoir la taille n_g de la grille W , qui définit également la taille des domaines 3D sur lesquels les champs Gaussiens aléatoires sont définis. La Fig. 4.22 illustre le processus de création d'un objet 2D dans le cas d'une grille 7×7 , avec la formation d'un pore (Fig. 4.22k) après 4 itérations (pore qui

Algorithm 3 Génération d'un objet aléatoire voxélisé

- 1: Initialiser W de taille $n_g \times n_g \times n_g$ à la valeur 0
- 2: Fixer le voxel central de W à 1 (activation)
- 3: Définir le noyau de convolution sur un volume de $3 \times 3 \times 3$.

$$K_w(x, y, z) = c \times \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{w^2} + y^2 + z^2\right)\right)$$

où c est une constante de normalisation.

- 4: Calculer les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T .
- 5: $G \leftarrow G_A^{c_A} \cdot G_T^{c_T}$
- 6: **pour** $k = 1$ à n_i **faire**
- 7: $B \leftarrow \text{convolution}(W, K_w)$
- 8: $B \leftarrow B \cdot (1 - W_{\text{filled}})$
- 9: Pour tout voxel v dans B , calculer la probabilité d'activation $P_{\text{act}}(v)$:

$$P_{\text{act}}(v) = \frac{B(v) \times G(v)}{\sum_x B(x) \times G(x)}$$

- 10: Calculer le nombre n_a de pixels à activer défini par

$$n_a = \text{Poisson}(\lceil \lambda \times \text{card}(B) \rceil).$$

- 11: Sélectionner et activer n_a voxels dans W en fonction des probabilités d'activation
 - 12: **fin pour**
-

peut éventuellement être refermé si l'étape 4 optionnelle de l'algorithme est ignorée) et la Fig. 4.23 montre l'évolution de la structure 3D voxélisée à chaque itération, ainsi que le résultat final obtenu par le calcul du contour de l'alpha-shape.

Il faut par ailleurs noter que le meta-paramètre n_g , c'est-à-dire la taille de la grille, doit être choisi avec précaution. En effet, comme l'illustre la Fig. 4.25, le temps nécessaire à la génération d'un objet synthétique augmente considérablement en fonction de n_g . C'est aussi pour cette raison que l'utilisation des alpha-shapes, dont le temps de calcul est en $\mathcal{O}(n \log n)$ à partir d'une triangulation de Delaunay (LEACH [177]), avec n le nombre de voxels activés, est salvateur, ces dernières permettant d'ajuster le niveau de détail souhaité sans pour autant devoir augmenter la taille de la grille.

4.4.4 Exemples de réalisation

La Fig. 4.24 montre plusieurs exemples d'objets générés par le modèle VOX-STORM à partir de paramétrisations différentes. Chaque objet est représenté avec deux valeurs α différentes pour illustrer qualitativement l'effet de ce paramètre sur la texture et l'angularité de la surface sans pour autant modifier la forme générale de l'objet de manière significative. En particulier, la flexibilité du modèle permet de générer des objets concaves (Fig. 4.24a et Fig. 4.24b), compacts (Fig. 4.24f), ou plutôt poreux (Fig. 4.24g).

Ces exemples mettent également en évidence la capacité du modèle à générer des objets non-étoilés, contrairement au modèle SPHERE, et dont la morphologie est au moins aussi complexe, tout en offrant un temps de génération de ces derniers de moins d'un dixième de seconde, à l'opposé de ce que permet le modèle GRAPE.

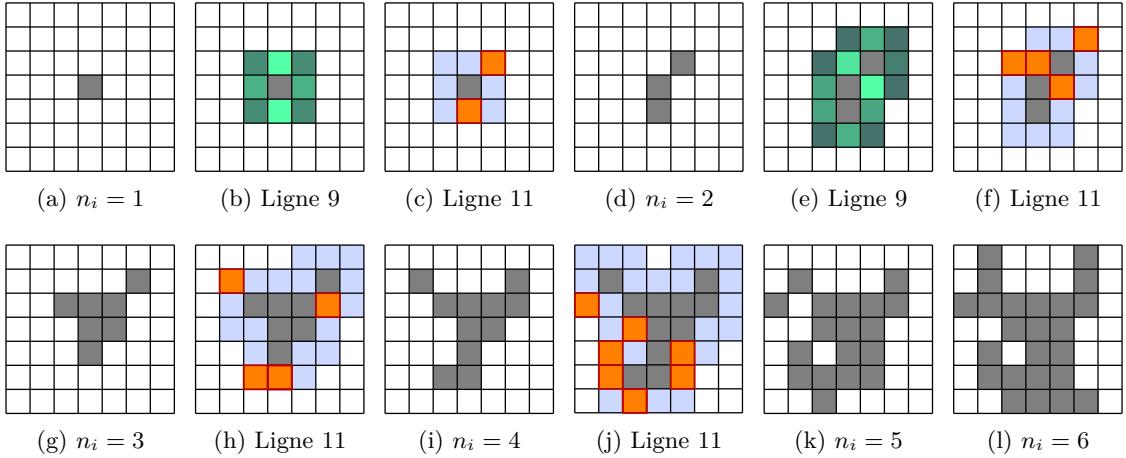


FIGURE 4.22 – Visualisation 2D de l’Algorithme 3 appliqué à une grille de 7×7 , avec les paramètres $\lambda = 0.3$ et $w = 2$. (a) montre la phase d’initialisation ; (b) illustre le calcul des probabilités d’activation à la frontière, les teintes plus lumineuses indiquant des probabilités plus élevées ; (c) montre la sélection aléatoire des pixels pour l’activation. Les figures suivantes (d-l) montrent la croissance de la forme 2D. Les légendes indiquent le nombre d’itérations et les lignes correspondantes dans l’Algorithme 3.

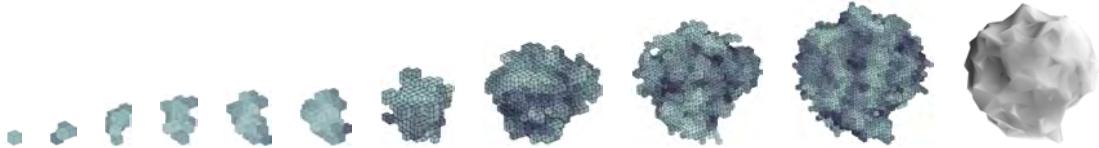


FIGURE 4.23 – Illustration du processus de génération d’un objet par le modèle VOX-STORM sur une grille de 49^3 voxels avec $\lambda = 0.15$. L’état de la grille 3D est montré pour les itérations 1 à 5, puis pour les itérations 10, 20, 30 et 40, de gauche à droite. L’objet final, y compris le maillage dérivé de la surface d’une alpha-shape (avec $\alpha = 5$), est représenté à droite. Le gradient de couleur sur les structures voxélisées indique l’intensité du produit des champs Gaussiens aléatoires, allant du plus foncé (produit = 0) au plus clair (produit = 1).

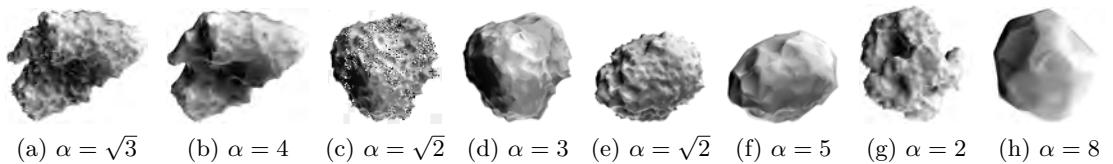


FIGURE 4.24 – Exemples d’objets générés par le modèle VOX-STORM avec différents jeux de paramètres, exhibant des maillages calculés avec deux valeurs α différentes à chaque fois, de sorte à illustrer son impact sur l’angularité et la texture de la surface des objets.

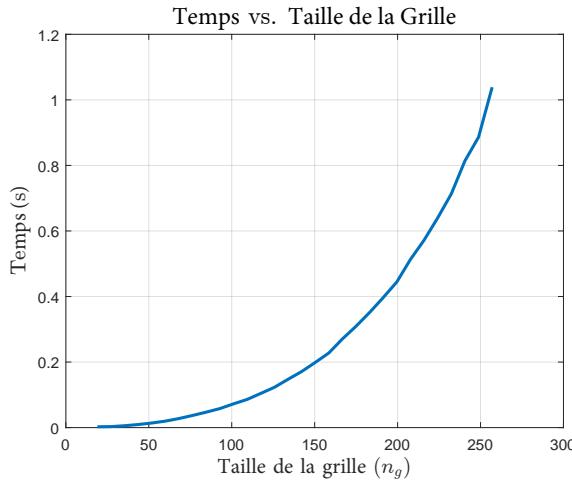


FIGURE 4.25 – Temps nécessaire pour générer un agrégat à l'aide du modèle VOX-STORM en fonction de la taille de la grille n_g . La paramétrisation est issue du tableau 4.10, et 100 agrégats sont générés pour chaque valeur n_g différente afin d'établir un temps de calcul moyen.

Paramètre	Impact	Propriétés
n_i	Taille	ECD, ESD, ...
w	Forme	AR, C, Phi
ℓ_A, c_A	Forme et Angularité	AR, C, Co, SLD, Φ
ℓ_T, c_T	Angularité et Texture	C, Co, SLD, Φ
α	Angularité et Texture	C, Co, SLD, Φ
λ	Toutes les propriétés	–

TABLE 4.9 – Influence principale des paramètres du modèle sur les propriétés morphologiques des objets.

4.4.5 Influence des paramètres du modèle et estimations

A l'instar du modèle SPHERE pour lequel chacun des six paramètres possède un domaine d'influence bien identifié quant à l'impact qu'ils peuvent avoir sur les caractéristiques morphologiques des objets synthétiques générés, les huit paramètres du modèle VOX-STORM ont eux aussi une influence très claire sur certaines caractéristiques morphologiques. La compréhension de la façon dont chacun des paramètres affecte la morphologie des objets est essentielle pour simplifier le processus d'optimisation. Cela permet en particulier d'illustrer la sensibilité des caractéristiques morphologiques aux paramètres. Le tableau 4.9 résume l'impact de chaque paramètre du modèle sur les propriétés morphologiques des objets générés, tandis que les figures 4.26 et 4.27 donnent un aperçu quantitatif de la manière dont ces propriétés varient en fonction des différents paramètres.

Nombre d'itérations – n_i

Pour une intensité λ fixée, le nombre d'itérations n_i est fortement corrélé à la taille de l'objet, avec une relation linéaire avec l'ECD (Fig. 4.26a) et l'ESD (Fig. 4.27a). Cette propriété est facilement compréhensible en 3D pour l'ESD en raison du processus de génération des objets durant lequel le volume croît en moyenne proportionnellement à

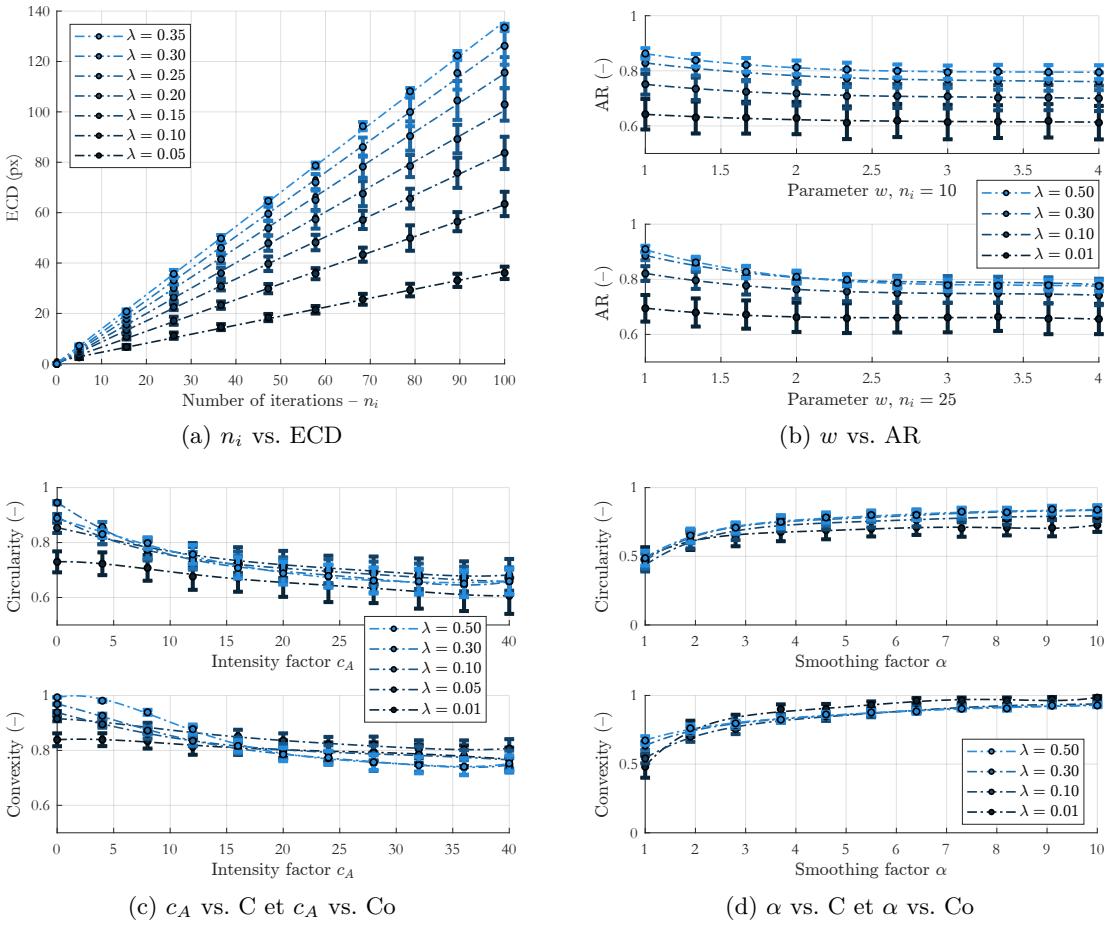


FIGURE 4.26 – Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 2D des objets générés par VOX-STORM. Chaque observation représente une moyenne calculée sur un échantillon de 500 objets, et les barres représentent les écarts types.

la surface ainsi qu'à λ à chaque itération n_i , mais elle est moins évidente en 2D pour l'ECD. Pour obtenir ces résultats, 500 objets ont été générés par observation. Les autres paramètres ont été choisis aléatoirement à l'aide de lois uniformes.

En termes d'optimisation, le fait que la taille des objets soit linéairement corrélée au nombre d'itérations signifie que les mesures de diamètres équivalents (ECD) effectuées sur les images 2D projetées peuvent être utilisées en entrée du modèle en lieu et place de n_i , à un facteur d'échelle près.

Poids du noyau de convolution – w

Le poids w associé au noyau de convolution K_w a pour seul but de permettre d'ajuster finement l'aspect ratio (AR) de l'objet. La Fig. 4.26b montre que ce paramètre a un effet relativement modeste sur la forme finale de l'objet (de l'ordre de 5% à 10%), mais qu'il est tout de même significatif. Ces données ont été obtenues avec un paramètre α constant et avec des champs Gaussiens aléatoires désactivés.

En outre, dans le cas où $w = 1$, on peut constater que le paramètre d'intensité λ a une forte influence sur l'aspect ratio. On constate également que des intensités λ plus faibles et moins d'itérations n_i donnent des objets plus allongés en moyenne, tandis que des intensités plus élevées et un nombre plus important d'itérations donnent des objets plus grands et plus ronds, comme c'est le cas des agrégats que l'on cherche à modéliser.

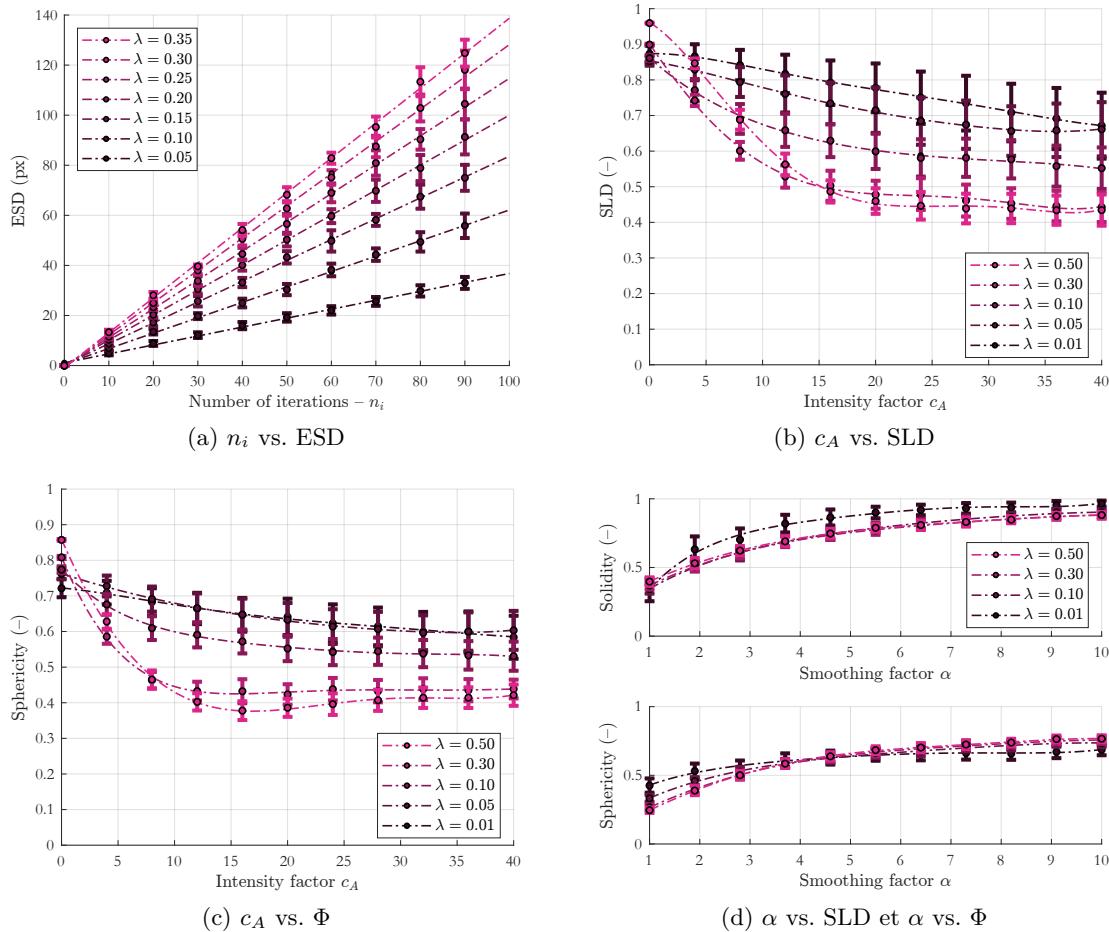


FIGURE 4.27 – Influence des paramètres du modèle sur les caractéristiques morphologiques 3D des objets générés par VOX-STORM. Chaque observation représente une moyenne calculée sur un échantillon de 500 objets, et les barres représentent les écarts types.

Champs Gaussiens aléatoires – G_A & G_T

Les champs Gaussiens aléatoires G_A et G_T sont principalement utilisés pour modifier l'angularité et la texture des objets générés par le modèle VOX-STORM, bien que G_A ait également un effet non négligeable sur leur forme (à travers l'aspect ratio et l'élongation) pour des valeurs de c_A élevées. La Fig. 4.26c montre l'effet d'un seul champ aléatoire (G_A) sur la circularité et la convexité en fonction de l'intensité c_A , le second champ aléatoire étant désactivé, avec $w = 1$ et le paramètre α constant. L'effet sur l'équivalent 3D de ces caractéristiques morphologiques est illustré par la Fig. 4.27b pour la solidité et la Fig. 4.27c pour la sphéricité.

En général, une combinaison de deux champs Gaussiens aléatoires avec différentes longueurs de corrélation $\ell_A > \ell_T$ et différentes intensités c_A et c_T permet un contrôle fin des propriétés morphologiques 3D des objets générés. Par exemple, l'objet concave de la Fig. 4.24a est généré avec un champ aléatoire G_A de forte intensité c_A , tout comme la structure poreuse de l'objet de la Fig. 4.24g. La texture bosselée de la Fig. 4.24e, en revanche, n'est possible qu'avec un paramétrage spécifique du champ aléatoire G_T .

Paramètre de lissage – α

Le paramètre α est directement lié à l'alpha-shape à partir de laquelle le maillage de l'objet est extrait. Ainsi, son influence sur la texture et l'angularité de l'objet est considérable, tandis que son influence sur la taille et la forme de l'objet est moindre (voir Fig. 4.24). Son effet sur les propriétés morphologiques d'angularité et de texture en 2D (C et Co) et en 3D (Φ et SLD) est illustré par les Fig. 4.26d et Fig. 4.27d, respectivement.

Intensité – λ

Le facteur d'intensité λ affecte toutes les propriétés de taille, de forme, d'angularité et de texture des objets générés par le modèle, comme le montrent les Fig. 4.26 et Fig. 4.27. Ce phénomène est similaire à celui observé durant le processus d'agglomération des nanoparticules de latex sous contraintes hydrodynamiques, par exemple, au cours duquel la morphologie des agrégats produits dépend fortement de la concentration des particules primaires dans le milieu (HAMIEH et al. [134]), bien qu'aucune relation directe ne puisse être établie entre les paramètres du modèle géométrique VOX-STORM et les paramètres opératoires.

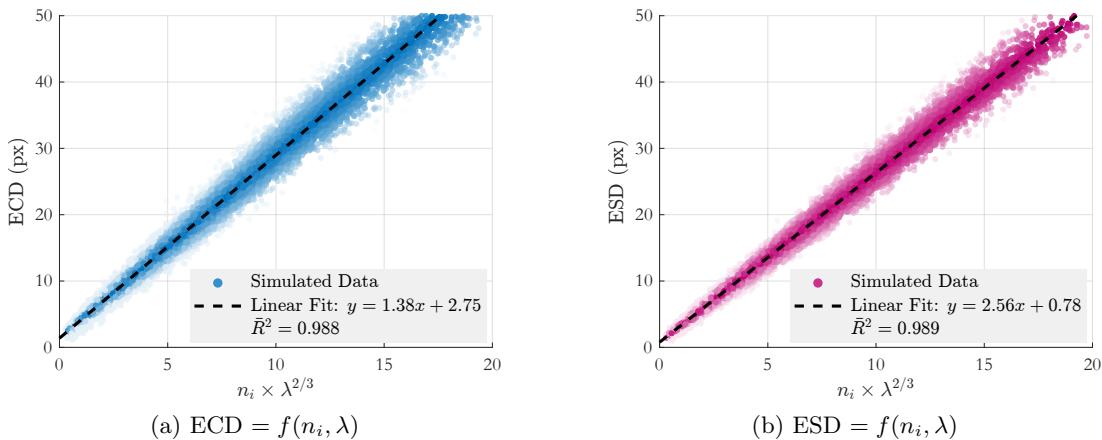


FIGURE 4.28 – Corrélation entre le produit $n_i \times \lambda^{2/3}$ et l'ECD (a) d'une part, et l'ESD (b) d'autre part.

Toutefois, il est important de noter qu'il existe une forte corrélation entre la quantité $n_i \times \lambda^{2/3}$ et l'ECD d'une part, et l'ESD d'autre part, comme le montrent les Fig. 4.28a et Fig. 4.28b, respectivement. En effet, les modèles de régression linéaire ci-dessous peuvent être établis :

$$\widehat{ECD} = 1.38n_i \times \lambda^{2/3} + 2.75 \quad (4.23)$$

et

$$\widehat{ESD} = 2.56n_i \times \lambda^{2/3} + 0.78 \quad (4.24)$$

avec \widehat{ECD} et \widehat{ESD} les estimateurs de l'ECD et de l'ESD, respectivement, et pour lesquels les coefficients de détermination ajustés \bar{R}^2 donnés par l'estimateur Olkin-Pratt exact (KARCH [171]) et illustrés par la Fig. 4.28 sont $\bar{R}^2 = 0.988$ pour l'ECD et $\bar{R}^2 = 0.989$ pour l'ESD, respectivement.

Ainsi, comme mentionné plus tôt, cette forte corrélation entre n_i , λ et l'ECD ou l'ESD, permet non seulement d'utiliser directement les données obtenues par analyse d'image pour simplifier le processus d'optimisation, mais aussi de connaître précisément les distributions

de tailles de particules (PSD) en nombre et en volume en fonction des paramètres du modèle.

Enfin, les coefficients de détermination \bar{R}^2 étant extrêmement élevés, il aurait été satisfaisant de pouvoir exprimer l'ESD et l'ECD en fonction de n_i et de λ à l'aide d'une expression analytique. Néanmoins, aucune relation explicite n'a, à ce jour, pu être établie.

4.4.6 Optimisation et validation sur une population synthétique

De la même manière que dans les sections 4.2.5 et 4.3.6 précédentes, une méthode permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir de mesures de caractéristiques morphologiques 2D projetées effectuées par analyse d'image est proposée. Dans un premier temps, le processus d'optimisation nécessaire à la détermination d'une paramétrisation optimale du modèle VOX-STORM de par la minimisation d'une fonction de coût est présenté. Ensuite, une population d'objets synthétiques est générée afin de valider la méthode proposée.

4.4.6.1 Définition du processus d'optimisation

La recherche d'une paramétrisation Ω optimale pour le modèle VOX-STORM passe principalement par la minimisation d'une fonction de coût. Néanmoins, un paramètre fondamental du modèle, à savoir le nombre d'itérations n_i , peut être indirectement estimé par analyse d'image. En effet, la relation proposée par l'équation 4.23 montre qu'il est possible de relier les mesures de diamètre du cercle équivalent (ECD) des projections des objets au produit $n_i \times \lambda^{2/3}$. Par conséquent, il apparaît que les distributions d'ECD et de nombre d'itérations n_i ont la même forme, à un facteur d'échelle près, ce qui permet de simplifier le processus d'optimisation de manière considérable.

La fonction de coût proposée est un peu plus complexe que celle proposée aux équations (4.8) et (4.16) pour les modèles GRAPE et SPHERE, respectivement, en ce sens qu'elle intègre non seulement les erreurs relatives sur des valeurs moyennes de caractéristiques morphologiques 2D, mais également les erreurs relatives commises sur les écarts-types de ces mêmes caractéristiques morphologiques. Cette nouvelle fonction de coût est définie de la manière suivante :

$$F_{\text{cost}}(\Omega) = \sum_{i=1}^2 \left(\nu_i^{\text{ECD}} \cdot \delta_i^{\text{ECD}}(\Omega) + \nu_i^{\text{AR}} \cdot \delta_i^{\text{AR}}(\Omega) + \nu_i^{\text{C}} \cdot \delta_i^{\text{C}}(\Omega) + \nu_i^{\text{Co}}(\Omega) \cdot \delta_i^{\text{Co}} \right) \quad (4.25)$$

avec

- ν_i^{ECD} , ν_i^{AR} , ν_i^{C} , et ν_i^{Co} des poids assignés de manière empirique aux erreurs relatives effectuées sur les premiers et seconds moments des distributions de ECD, AR, C, et Co, respectivement.
- $\delta_i^{\text{ECD}}(\Omega)$, $\delta_i^{\text{AR}}(\Omega)$, $\delta_i^{\text{C}}(\Omega)$, et $\delta_i^{\text{Co}}(\Omega)$ les erreurs relatives commises entre les premiers et seconds moments des distributions de caractéristiques morphologiques 2D mesurées par analyse d'image d'une part, et ceux des distributions de caractéristiques morphologiques des objets générés par le modèle VOX-STORM à partir de l'ensemble de paramètre Ω d'autre part.

A l'instar de ce qui est proposé à la section 4.3.6, c'est l'algorithme de Particle Swarm Optimization (PSO) qui est choisi pour minimiser cette fonction.

Concernant les poids associés à chacun des termes, une heuristique, ou règle empirique, a semblé émerger, suggérant que la décroissance des pondérations en fonction de l'échelle

descriptive des caractéristiques morphologiques - taille, forme, angularité, texture - tend à donner des résultats satisfaisants. Par exemple, la pondération utilisée était de 8 pour l'ECD, 4 pour l'aspect ratio (AR) et 2 pour la circularité (C) et la convexité (Co), avec une décroissance similaire pour les poids associés aux écarts-types (4, 2, 1 et 1, respectivement).

Il a par ailleurs été observé que tant que ce type de distribution de poids est utilisé, son choix affecte principalement la vitesse de convergence de l'algorithme plutôt que la qualité de l'estimation de la solution optimale obtenue. Bien qu'une étude qualitative et quantitative détaillée de l'influence des poids aurait pu être bénéfique, ce travail reste pour l'instant en suspens.

Enfin, la raison pour laquelle cette nouvelle fonction de coût s'appuie également sur les erreurs relatives entre les second moments des distributions de caractéristiques morphologiques 2D, et pas uniquement sur les premiers moments, comme c'était le cas des fonctions de coût précédentes, tient au fait que le modèle VOX-STORM compte un plus grand nombre de paramètres que les deux précédents modèles. Par ailleurs, le modèle se révèle bien plus flexible, et capable de modéliser des objets aux géométries bien plus complexes. Par conséquent, il est nécessaire d'être en mesure de discriminer efficacement les ensembles de paramètres, ce que les seules valeurs moyennes des distributions de caractéristiques morphologiques 2D des populations d'objets synthétiques générés ne permettent pas de faire.

4.4.6.2 Génération d'une population d'agrégats synthétiques et validation

Afin de valider la méthode proposée, et en particulier le processus d'optimisation, une population de 40,000 agrégats synthétiques est générée par le modèle VOX-STORM à partir d'un ensemble de paramètres Ω_s détaillés dans le tableau 4.10. Afin de générer des objets de taille et de morphologie différentes, le nombre d'itérations n_i , qui est directement lié à la taille des agrégats (Eq. (4.23) et Eq. (4.24)), est une variable aléatoire dépendant d'une loi bêta et définie comme suit :

$$n_i \sim 5 + \lceil 150 \times \text{Beta}(a, b) \rceil, \quad a = 3 \quad \text{et} \quad b = 25. \quad (4.26)$$

Pour simuler les conditions dans lesquelles les images sont capturées par un morpho-granulomètre, comme ce sera le cas des images de la première application présentée dans le Chapitre 5 et afin de rester cohérent avec les méthodes présentées pour les deux précédents modèles aux sections 4.2.5 et 4.3.6, des images projetées en 2D sont générées dans une direction orthogonale au diamètre maximal de Feret. Il faut cependant noter que le modèle VOX-STORM ne nécessite pas cette hypothèse a priori, et une application assortie d'une validation numérique dans le cas où les objets sont observés dans des directions arbitraires sera présentée au Chapitre 6.

Paramètres	n_i	w	ℓ_A	c_A	ℓ_T	c_T	α	λ
Ω_s	Eq. (4.26)	5	10	5	0.5	1.5	3	0.050
$\hat{\Omega}_s$	Eq. (4.23)	5.2	9.68	4.77	0.56	1.61	3.02	0.052

TABLE 4.10 – Spécification de l'ensemble de paramètres Ω_s utilisé pour générer une population de 40,000 agrégats synthétiques, ainsi que l'ensemble de paramètres estimé $\hat{\Omega}_s$, dérivé du processus d'optimisation visant à minimiser la fonction de coût F_{cost} définie par l'équation (4.25).

Les caractéristiques morphologiques 2D liées à la taille, à la forme, à l'angularité et à la texture des objets sont mesurées par analyse d'image (Fig. 4.29). Les premiers moments des distributions obtenues sont utilisés pour construire la fonction de coût (Eq. (4.25)). Cette dernière est ensuite minimisée par PSO, en générant des populations de 2,048 agrégats synthétiques à chaque itération, l'estimateur de l'ensemble de paramètres optimal étant noté $\hat{\Omega}_s$.

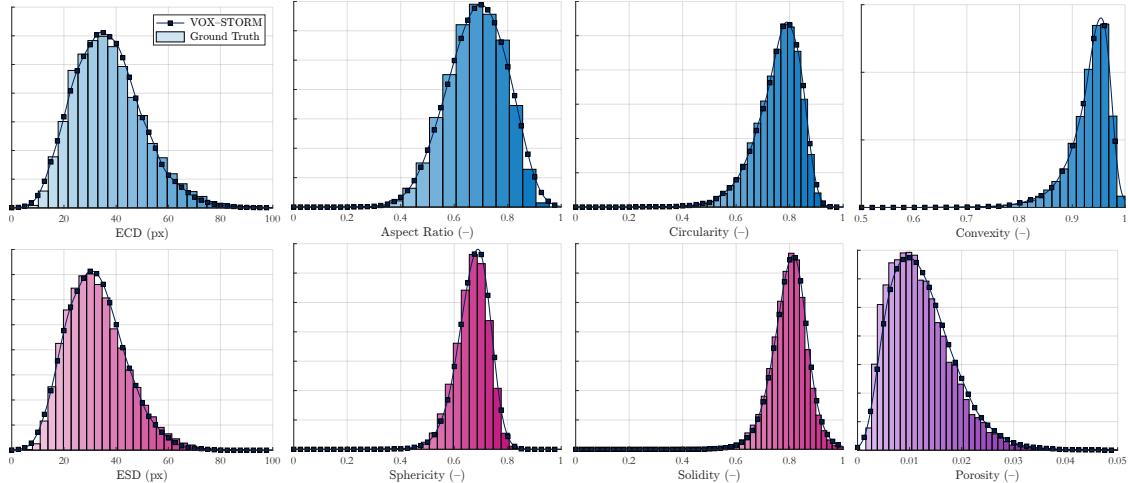


FIGURE 4.29 – Comparaison des caractéristiques morphologiques 2D et 3D entre deux populations synthétiques générées par le modèle VOX-STORM : l'une composée de 40,000 objets utilisant l'ensemble de paramètres Ω_s (vérité de terrain, représentée par des histogrammes) et l'autre comprenant 20,000 objets générés avec l'ensemble de paramètres $\hat{\Omega}_s$ estimé par la méthode proposée (représentée par des lignes pleines).

Le tableau 4.10 montre que les différences entre l'ensemble de paramètres Ω_s et son estimateur $\hat{\Omega}_s$ sont minimes, et les distributions des caractéristiques morphologiques 2D et 3D obtenues à partir du processus d'optimisation sont en effet très proches de la vérité de terrain (Fig. 4.29). En outre, il convient de noter que le nombre estimé d'itérations \hat{n}_i est dérivé de la distribution d'ECD mesurée sur les images 2D projetées en inversant la relation linéaire donnée par l'équation (4.23).

Enfin, le tableau 4.11 montre la distance statistique (TSYBAKOV [178]) - ou Distance de Variation Totale - entre les distributions des caractéristiques morphologiques des objets générés par l'ensemble de paramètres Ω_s et leurs estimations. La distance de variation totale est une mesure quantitative permettant de quantifier de manière relativement simple la distance entre deux distributions, allant de 0 (distributions identiques) à 1 (distributions complètement différentes), et se définit comme suit

$$TV(p, q) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |p(x) - q(x)| dx \quad (4.27)$$

où p et q sont deux fonctions de densité de probabilité. L'utilisation de cette nouvelle métrique plutôt que la simple comparaison de moments, comme cela avait été fait dans les sections précédentes, nous a semblé être un choix plus judicieux, et constituera l'un des critères principaux d'évaluation de la qualité des résultats obtenus dans la suite.

Les faibles valeurs de distance de variation totale présentées dans le tableau 4.10 confirment la validité de la méthode permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir de mesures de caractéristiques morphologiques effectuées sur des images 2D projetées. Il convient par ailleurs de mentionner le

Caractéristiques	2D				3D			
	ECD	AR	Co	C	ESD	SLD	Φ	ε_{cp}
Distance de Variation Totale	0.032	0.018	0.016	0.022	0.033	0.030	0.037	0.040

TABLE 4.11 – Distance de Variation Totale entre les distributions des caractéristiques morphologiques (Fig. 4.29) de la population d’objets générés à partir de l’ensemble de paramètres Ω_s et de la population générée à partir de l’ensemble de paramètres estimé $\hat{\Omega}_s$.

fait que, bien que cette validation n’ait été réalisée que dans le cadre d’objets observés dans une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum, le modèle VOX-STORM est capable de s’affranchir de cette contrainte et que ce cas sera discuté au Chapitre 6.

4.4.7 Discussion

De par son architecture duale basée à la fois sur la génération rapide d’une structure voxélisée ainsi que sur la description de la surface externe des objets sous la forme d’un maillage, le modèle VOX-STORM présente de nombreux avantages.

- **Vitesse** : Le modèle est capable de générer 1,000 objets similaires à ceux de la Fig. 4.24 en une vingtaine de secondes. Cette vitesse est du même ordre de grandeur que celle du modèle SPHERE, bien que ce dernier soit légèrement plus rapide pour ce qui est de la simple génération des objets, ou d’autres modèles proposant de générer le maillage d’objets granulaires à partir de champs gaussiens aléatoires (WEI et al. [12]). Néanmoins, le modèle VOX-STORM n’est pas limité à la génération d’objet étoilé, comme c’est en général le cas avec les modèles basés sur la déformation de maillages. Par ailleurs, il se révèle également plus rapide que les modèles les plus récents basés sur des subdivisions de surfaces fermées (WEI et al. [9]). Il existe d’autres méthodes permettant la génération du maillage d’un objet en des temps similaires (ZHANG et al. [10] et ZHANG et al. [127]), mais elles ne permettent pas un contrôle aussi fin de l’angularité ou de la texture des objets. Par ailleurs, toutes ces méthodes ne génèrent qu’un maillage sans fournir d’informations sur la structure interne des objets et les objets générés sont souvent relativement simplistes. Quant aux méthodes basées sur les empilements de sphères dures, comme c’est le cas du modèle GRAPE, elles sont généralement plus lentes d’au moins un ordre de grandeur.
- **Contrôle morphologique & Flexibilité** : Avec un nombre relativement restreint de paramètres, le modèle est capable de générer des objets aux caractéristiques morphologiques très variées tout en conservant un haut degré de contrôle et de flexibilité. Les alpha-shapes permettent de moduler l’angularité et la texture des objets, avec un impact sur la forme et la taille de ces derniers relativement minimes, même si cet impact est quantifiable. L’architecture duale permet de contrôler finement les détails de la surface des objets, et notamment les propriétés telles que l’aire surfacique (3D) et le périmètre (2D), et par extension la sphéricité et la circularité, qui sont difficiles à calculer sur des objets discrétilisés, en premier lieu du fait de l’ambigüité existant en ce qui concerne la définition et le mode de calcul même de ces caractéristiques, tout en fournissant une connaissance précise de la structure interne des objets, et en particulier de la porosité (cf. Fig. 4.29). Parallèlement à cela, les méthodes équivalentes basées sur la génération de maillages

offrent généralement beaucoup moins de contrôle et de flexibilité sur l'angularité et la texture des objets (MOLLON et al. [8], WEI et al. [9], ZHANG et al. [10] et ZHANG et al. [127]), ou dépendent d'un très grand nombre de paramètres (MOLLON et al. [11]), ce qui entraîne beaucoup de difficultés lors de la mise en place d'un processus d'optimisation.

- **Intégration d'une PSD** : En raison de la dépendance linéaire entre la taille de l'objet (ECD/ESD) et le nombre d'itérations n_i , une densité de taille (2D ou 3D) peut être utilisée directement comme paramètre du modèle, ce qui permet de générer facilement des populations d'objets calibrés. En conséquence, le nombre de paramètres à ajuster s'en trouve réduit, ce qui facilite d'autant le processus d'optimisation.

Le dernier point est particulièrement important car il permet au modèle VOX-STORM, tout comme les modèles GRAPE et SPHERE à leur façon, d'utiliser directement des connaissances a priori au sujet des populations à modéliser, et de s'assurer que les objets générés sont représentatifs de la réalité.

En revanche, la principale limite du modèle est que, comme pour tout processus itératif, le temps de calcul augmente avec la taille des objets à générer, et donc avec le nombre d'itérations n_i , ainsi qu'avec la taille de la grille n_g . Néanmoins, la Fig. 4.24 montre qu'il est possible de générer assez efficacement des objets haute résolution suffisamment détaillés, avec un nombre d'itérations et une taille de grille raisonnables ($n_g, n_i < 128$).

4.5 Conclusion générale

Les trois modèles présentés répondent tous à l'impératif exposé en introduction de ce chapitre, à savoir qu'il était nécessaire de pouvoir exploiter au maximum les données obtenues par analyse d'image lors de la génération des populations d'objets synthétiques, afin d'être le plus représentatif possible de la réalité. Dans le cas du modèle VOX-STORM, cela se traduit par une relation de dépendance linéaire entre les mesures de diamètre du cercle équivalent (ECD) effectuées sur les images 2D et un paramètre du modèle (le nombre d'itérations n_i , cf. équation (4.23)). Pour le modèle SPHERE, il s'agit d'une relation entre les deux paramètres a et b du modèle qui contrôlent la taille des axes principaux de l'ellipsoïde de base et leurs estimations, effectuées par analyse d'image. Enfin, en ce qui concerne le modèle GRAPE, la quasi-intégralité des paramètres du modèle est constituée d'objectifs qui sont fixés a priori, et qui sont, dans le contexte de cette thèse, les distributions jointes de caractéristiques morphologiques 2D mesurées sur les images 2D projetées des agrégats.

Pour chacun des trois modèles, une méthode permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir de leurs caractéristiques 2D projetées obtenues par analyse d'image a été présentée et validée sur des populations d'objets synthétiques. Une hypothèse forte a néanmoins dû être posée : le fait que les objets sont observés selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum des objets. Cette hypothèse est raisonnable dans le cas d'objets observés à l'aide d'un morphogranulomètre, et est nécessaire à la mise en œuvre des méthodes proposées pour les modèles GRAPE et SPHERE (bien qu'il soit en théorie possible de s'en affranchir pour ce dernier en exploitant les travaux de LANGLARD et al. [96], par exemple), et facultative pour ce qui est du modèle VOX-STORM. Par ailleurs, le modèle GRAPE impose également d'effectuer une estimation a priori du volume des ellipsoïdes équivalents des objets étudiés. En revanche, dans le cas d'objets qui ne sont pas observés dans une direction privilégiée, comme cela peut être le cas d'images in-situ, comme le propose l'application du Chapitre 7, seule la

méthode du modèle VOX-STORM pourra être mise en œuvre.

Pour toutes ces raisons, le modèle VOX-STORM étant par ailleurs pratiquement aussi rapide que le modèle SPHERE (point qui sera étudié plus en détail au chapitre suivant), il semble raisonnable de penser que c'est celui-ci qui obtiendra les meilleurs résultats et qu'il conviendra de privilégier dans le cadre d'applications réelles. Ainsi, dans le chapitre suivant, les performances des trois modèles sont comparées dans le cadre d'une application réelle avec des images d'agrégats réels, ainsi que des images d'agrégats calibrés imprimés en 3D, toutes issues d'un morphogranulomètre.

Chapitre 5

Validation de la méthode par application à des images ex-situ

Contenu du chapitre

5.1	Introduction	95
5.1.1	Problématique générale et méthodologie proposée	95
5.1.2	Contenu du chapitre	98
5.2	Validation sur des agrégats imprimés en 3D.	98
5.2.1	Génération de l'ensemble de données	98
5.2.2	Application de la méthode	98
5.2.3	Discussion	101
5.3	Application à des populations d'agrégats de latex	102
5.3.1	Description du protocole expérimental et définition des objectifs	102
5.3.2	Résultats	104
5.3.2.1	Caractéristiques morphologiques 2D	104
5.3.2.2	Caractéristiques morphologiques 3D	107
5.3.2.3	Comparaison des dimensions fractales	107
5.3.3	Discussion et comparaison des performances des modèles	108
5.4	Conclusion générale	114

5.1 Introduction

5.1.1 Problématique générale et méthodologie proposée

Problématique générale

Dans le chapitre précédent, trois modèles géométriques stochastiques permettant de modéliser des agrégats sont présentés. En particulier, la façon dont il est possible d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir de la connaissance des distributions de caractéristiques morphologiques 2D est détaillée pour chacun des trois modèles et validée, à chaque fois à partir d'une population d'agrégats synthétiques. Néanmoins, plusieurs questions restent en suspens.

- **Indépendance des données** : Pour valider la méthode proposée pour le modèle GRAPE, une population d'agrégats synthétiques générés par le même modèle GRAPE a été utilisée. De même pour les modèles SPHERE et VOX-STORM. On peut se demander si les résultats auraient été aussi concluants en utilisant des populations d'objets générés par d'autres modèles.
- **Application à un cas réel** : Dans chaque cas, des populations d'objets synthétiques ont été utilisées, et la connaissance des distributions de caractéristiques morphologiques 2D est par conséquent bien plus précise et exhaustive qu'elle ne le serait probablement dans le cadre d'une application réelle. Les résultats obtenus seraient-ils valables si l'on travaille effectivement sur des images capturées par un morphogranulomètre, comme l'hypothèse en a été faite à chaque fois ?
- **Comparaison des performances** : Trois méthodes similaires ont été proposées, faisant appel à trois modèles différents, chacun ayant ses qualités propres, mais aussi certaines limitations. La question de la capacité de chacune des trois approches à répondre à la problématique de la thèse, à savoir l'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir de séries de mesures de caractéristiques morphologiques 2D projetées effectuées par analyse d'image, se pose donc de manière légitime.

Ainsi, ce chapitre se propose d'apporter des réponses à ces questions au travers de deux applications : l'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'agrégats imprimés en 3D d'une part et d'agrégats de nanoparticules de latex d'autre part, à partir d'images capturées par un morphogranulomètre.

Description de la méthode

Pour les deux applications proposées dans ce chapitre, des images sont obtenues à l'aide d'un morphogranulomètre dont le principe est détaillé par la Fig. 5.1. Pour les agrégats de nanoparticules de latex, ces derniers sont insérés en milieu dilué entre deux plaques en verre séparées par deux joints de 3 mm chacun (afin de réduire le risque de déformation des agrégats), puis placés sous un des objectifs du microscope automatisé (grossissement de $2.5\times$; $5\times$; $10\times$; $20\times$; $50\times$). Des images sont ensuite acquises puis binarisées. Pour les agrégats imprimés en 3D, ces derniers sont placés directement sous les objectifs car il se sont révélés trop gros pour être placés entre les deux plaques prévues à cet effet.

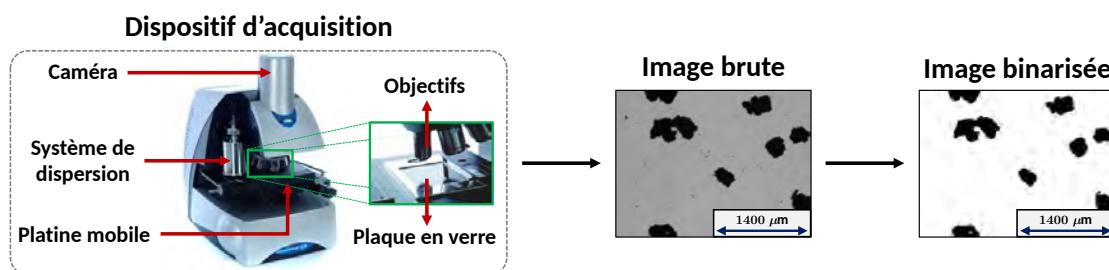


FIGURE 5.1 – Description du morphogranulomètre Morphologi G3 – Malvern Panalytical et de ses composants ("Analyseur d'images Morphologi G3 | Malvern Panalytical" – 2021) et illustration de la segmentation (binarisation) automatique des images brutes.

La méthode utilisée afin d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D à partir de caractéristiques morphologiques 2D mesurées sur les images binaires réalisées par le morphogranulomètre est illustrée par la Fig. 5.2.

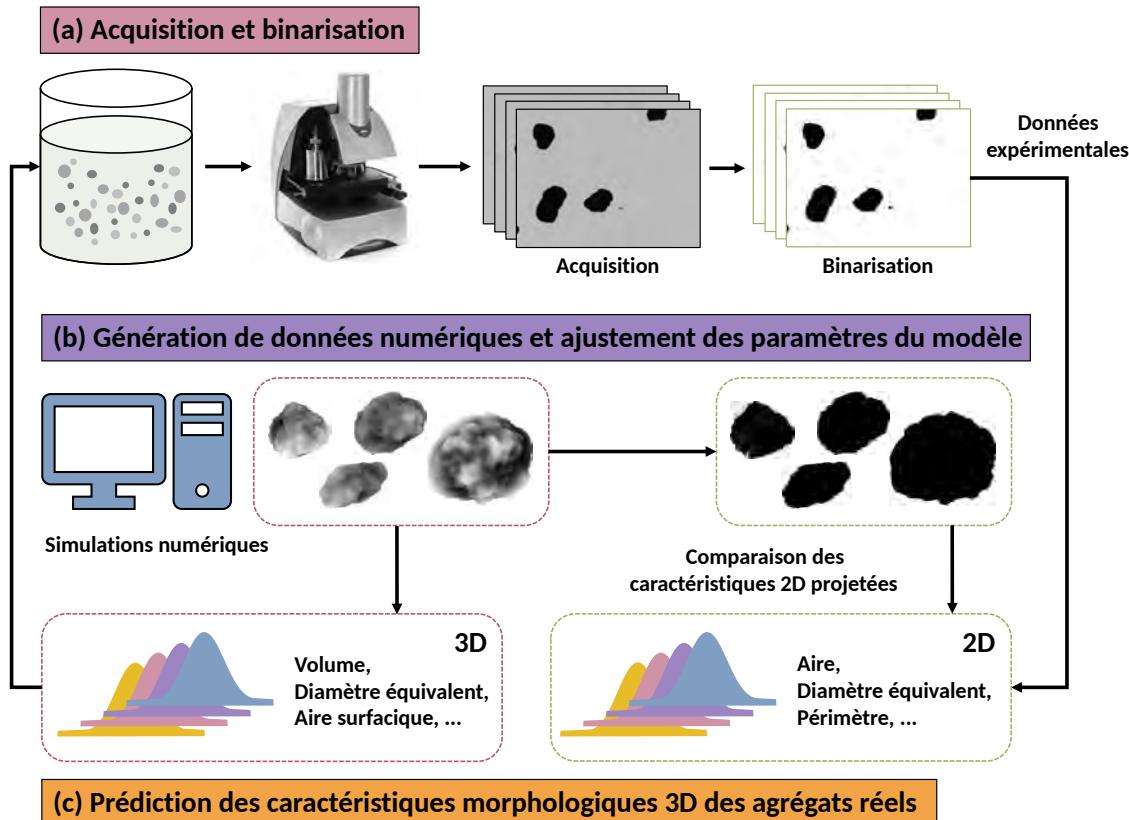


FIGURE 5.2 – Illustration des différentes étapes permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à l'aide d'images 2D projetées et de modèles géométriques stochastiques.

- (a)** Les agrégats sont soit imprimés en 3D par fabrication additive, ce qui permet de connaître la vérité terrain, à la précision du processus de manufacture près, soit synthétisés au sein d'une cuve, le protocole expérimental étant décrit plus en détail dans les sections suivantes. Des images sont ensuite capturées à l'aide d'un morphogranulomètre puis binarisées.
- (b)** Des populations d'agrégats synthétiques sont générées à l'aide des modèles présentés au chapitre précédent. Les paramètres des modèles sont ajustés à l'aide des différents processus d'optimisation, de sorte que les caractéristiques morphologiques 2D projetées des agrégats synthétiques correspondent au mieux aux mesures effectuées sur les images binaires issues du morphogranulomètre. C'est en particulier pour cette raison que l'hypothèse de direction privilégiée pour réaliser les projections est maintenue.
- (c)** Lorsque les distributions de caractéristiques morphologiques 2D des agrégats synthétiques correspondent à celles qui sont mesurées sur les images binaires issues du morphogranulomètre, les caractéristiques morphologiques 3D des agrégats imprimés en 3D ou des agrégats de nanoparticules de latex sont supposées également correspondre à celles des agrégats synthétiques, et sont par conséquent connues. Cette hypothèse pourra être partiellement validée en comparant les prédictions effectuées à l'aide de chacun des trois modèles avec les caractéristiques morphologiques des agrégats imprimés en 3D.

La première application permet une nouvelle validation de la méthode dans le cas d'agrégats à la morphologie relativement peu complexe. Pour ce qui est de la seconde application,

aucune vérité terrain n'est connue. Cependant, des mesures effectuées par diffraction laser, notamment concernant la taille des agrégats, permettra de s'assurer au moins qualitativement de la validité des résultats obtenus.

5.1.2 Contenu du chapitre

Dans ce chapitre, les deux applications décrites précédemment sont présentées en détail. Dans un premier temps, la méthode proposée est appliquée à des agrégats imprimés en 3D, ce qui constitue une nouvelle validation. Dans un second temps, des résultats expérimentaux (agrégats de nanoparticules de latex) obtenus dans des conditions opératoires différentes et conduisant à des populations ayant des propriétés différentes seront utilisés. Les résultats permettent notamment de comparer les performances des différents modèles et de mettre en avant leurs qualités ainsi que leurs limites.

5.2 Validation sur des agrégats imprimés en 3D

5.2.1 Génération de l'ensemble de données

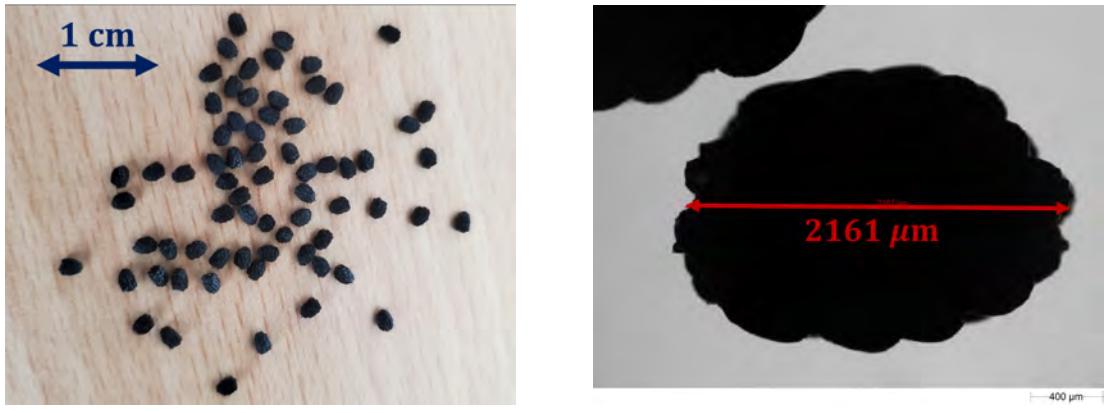
Afin de s'assurer du fait que les méthodes proposées pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D fonctionnent quel que soit le jeu de données utilisé, des agrégats sont imprimés en 3D à partir d'un fichier STL commercial représentant des mûres [179]. Notre choix s'est porté sur ces objets car ils étaient, à vue d'œil, morphologiquement très similaires aux agrégats obtenus expérimentalement (voir Fig. 4.2), et qui apparaissent plutôt compacts et globalement convexes au morphogranulomètre. Par conséquent, il a semblé naturel de vérifier le fait qu'il était bien possible d'estimer avec précision les caractéristiques morphologiques 3D de ce type d'objets, fussent-ils relativement simples.

Ainsi, environ une centaine d'objets calibrés ont été imprimée en 3D par fabrication additive. Le fichier STL de référence contenant l'intégralité des informations concernant le maillage de la surface externe des objets, leurs caractéristiques morphologiques 2D et 3D sont donc parfaitement connues, aux imperfections dues au processus d'impression près. En particulier, la Fig. 5.3 propose des illustrations de ces objets mesurant à peine 2 mm de long, et dont des images ont été réalisées à l'aide d'un morphogranulomètre (Morphologi G3 – Malvern Panalytical). Sur ces dernières, il apparaît clairement (cf. Fig. 5.3b ainsi que les images présentes en Annexe C) que l'hypothèse selon laquelle les objets observés à l'aide de ce dispositif s'orientent dans une direction privilégiée sous l'effet de la gravité et sont donc observées de manière orthogonale au diamètre de Feret maximum n'a rien de fantaisiste.

5.2.2 Application de la méthode

Les principales étapes du processus consistant à valider chacune de ces méthodes peuvent être décris de la manière suivante :

- Une population d'environ 100 agrégats, d'une longueur d'environ 2 mm, sont imprimés en 3D par impression additive à partir d'un fichier STL de référence représentant une mûre (Fig. 5.4a).
- Un total de 1000 images de ces agrégats sont capturées à l'aide d'un morphogranulomètre (Fig. 5.3b), puis binarisées (Fig. 5.4b). On suppose que les objets sont observés selon une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum.



(a) Collection de mûres imprimées en 3D

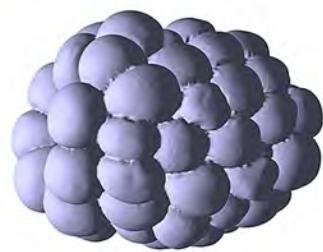
(b) Image d'une mûre au morphogranulomètre

FIGURE 5.3 – Visualisation des mûres (agrégats imprimés en 3D). Image prise par un smartphone (a) et par un morphogranulomètre (b).

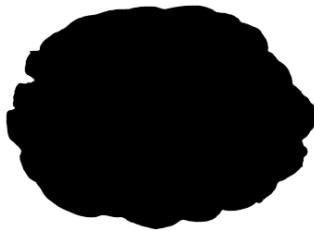
- Des mesures de caractéristiques morphologiques 2D sont effectuées par analyse d'image afin de définir les fonctions de coût F_{cost} définies par les équations (4.8), (4.16) et (4.25) pour les processus d'optimisation des modèles GRAPE, SPHERE et VOX-STORM, respectivement. En ce qui concerne le modèle VOX-STORM, les seconds moments (écart-types) ne sont pas pris en compte car les objets imprimés en 3D sont pratiquement identiques, les variations de caractéristiques morphologiques 2D dues au processus de fabrication ne dépassant pas 2,5% en moyenne.
- Les fonctions de coût F_{cost} sont minimisées selon les procédures décrites dans le chapitre précédent, par recuit simulé pour le modèle GRAPE et par PSO (Particle Swarm Optimization) pour les modèles SPHERE et VOX-STORM, jusqu'à ce qu'une paramétrisation optimale soit déterminée pour chacun des trois modèles.

La Fig. 5.4 illustre les différences entre la géométrie 3D contenue dans le fichier utilisé pour imprimer les agrégats en 3D et des objets générés par chacun des trois différents modèles avec les paramétrisations optimales obtenues à l'issue du processus d'optimisation. Le tableau 5.1, quant à lui, recense les diverses caractéristiques morphologiques 2D et 3D mesurées sur les agrégats synthétiques générés par les trois modèles, ainsi que sur les images binarisées des agrégats imprimés en 3D (pour les caractéristiques 2D) et sur la géométrie contenue dans le fichier STL de référence (pour les caractéristiques 3D). Deux conclusions principales peuvent en être tirées :

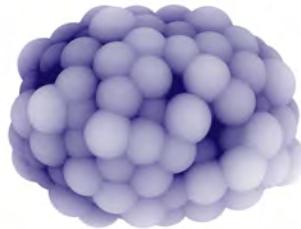
1. Chacun des trois modèles est capable de générer des objets dont les caractéristiques morphologiques 2D correspondent en moyenne à celles qui ont été mesurées sur les images capturées par le morphogranulomètre. En effet, les erreurs relatives commises sur les moyennes des caractéristiques 2D projetées sont, pour chacun des trois modèles, toujours inférieures à 2%. Cela signifie en particulier que les fonctions de coût sont correctement minimisées et que les modèles sont suffisamment flexibles pour reproduire des données qu'ils n'ont pas générées eux-mêmes (ce qui ne pouvait être confirmé ou infirmé par les validations sur des populations synthétiques proposées précédemment).
2. En ce qui concerne les caractéristiques morphologiques 3D, les erreurs sont également très faibles, et toujours inférieures à 5%. Cela signifie que, bien qu'une seule image projetée ne soit accessible par objet, les méthodes proposées pour estimer ces caractéristiques 3D permettent d'obtenir de bon résultats, dans ce cas d'agrégats



(a) Géométrie 3D du fichier STL



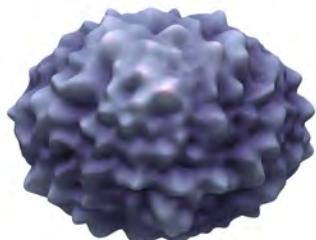
(b) Image binarisée (Morphologi G3)



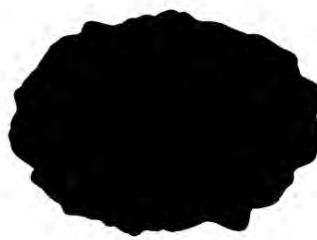
(c) GRAPE (3D)



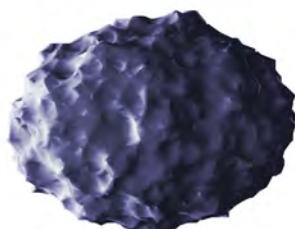
(d) GRAPE (2D)



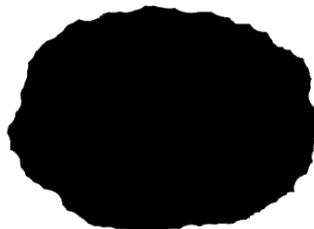
(e) SPHERE (3D)



(f) SPHERE (2D)



(g) VOX-STORM (3D)



(h) VOX-STORM (2D)

FIGURE 5.4 – Comparaison entre la géométrie 3D contenue dans le fichier STL destiné à l'impression 3D et des exemples de rendus 3D d'objets générés par les trois modèles avec les ensembles de paramètres optimaux (à gauche), et entre une image projetée binarisée d'un agrégat imprimé en 3D capturée par le morphogranulomètre et les projections 2D des objets générés par les modèles (à droite).

Caractéristiques 2D	A (mm ²)	A_c (mm ²)	P (mm)	AR	Co	C
Vérité terrain	2.73	2.86	6.75	0.71	0.95	0.75
GRAPE	2.79	2.88	6.79	0.72	0.97	0.76
SPHERE	2.72	2.81	6.80	0.71	0.96	0.74
VOX-STORM	2.71	2.85	6.77	0.72	0.95	0.74
GRAPE $\Delta(\%)$	1.71%	0.70%	0.50%	1.20%	1.48%	1.00%
SPHERE $\Delta(\%)$	0.24%	1.74%	0.76%	0.66%	1.40%	1.82%
VOX-STORM $\Delta(\%)$	0.58%	0.51%	0.25%	0.62%	0.40%	0.69%

Caractéristiques 3D	V (mm ³)	V_c (mm ³)	S (mm ²)	ESD (mm)	SLD	Φ_S
Vérité terrain	2.34	2.76	11.25	1.65	0.84	0.66
GRAPE	2.31	2.85	11.05	1.65	0.81	0.67
SPHERE	2.34	2.83	11.25	1.65	0.83	0.66
VOX-STORM	2.35	2.80	11.09	1.65	0.84	0.68
GRAPE $\Delta(\%)$	1.30%	4.90%	1.78%	0.41%	3.57%	0.97%
SPHERE $\Delta(\%)$	0.19%	2.80%	0.06%	0.05%	2.47%	0.19%
VOX-STORM $\Delta(\%)$	0.43%	1.50%	1.41%	0.03%	0.13%	2.50%

TABLE 5.1 – Comparaison entre les caractéristiques morphologiques 2D et 3D des agrégats imprimés en 3D (vérité terrain) d'une part, et des agrégats synthétiques générés par les trois modèles proposés d'autre part. Les valeurs pour les agrégats sont des moyennes calculées sur plusieurs centaines d'objets. Les valeurs sont arrondies à deux décimales près.

plutôt compacts et globalement convexes, et en utilisant l'hypothèse selon laquelle les objets sont orientés dans une direction préférentielle.

Les résultats obtenus tendent donc à valider les méthodes proposées, chacun des modèles se révélant capable de générer des objets aux caractéristiques morphologiques très proches de la vérité terrain, à l'issue du processus d'optimisation. Par ailleurs, il faut tout de même noter que la vérité terrain provient principalement de la géométrie contenue dans le fichier STL destiné à l'impression 3D des agrégats. Cela signifie qu'en ce qui concerne les modèles GRAPE et VOX-STORM, les caractéristiques morphologiques 3D sont calculées uniquement à partir de la surface extérieure des objets synthétiques, ceux-ci étant supposés pleins.

5.2.3 Discussion

L'application proposée permet de répondre partiellement à deux des trois questions posées en introduction de ce chapitre, à savoir la capacité des modèles à générer des objets synthétiques aux caractéristiques morphologiques similaires à celles d'objets qu'ils n'ont pas eux-mêmes produits, et l'application des processus d'optimisation dans le cas où les images d'entrée ne sont pas issues de simulations numériques, mais capturées par un dispositif optique, à savoir un morphogranulomètre. Néanmoins, deux limitations apparaissent clairement :

1. Les objets étudiés sont relativement simples et ne permettent donc pas de montrer à quel point les hypothèses nécessaires à l'utilisation du modèle GRAPE, par exemple, sont restrictives. En effet, celui-ci estime le volume des objets en amont du processus d'optimisation à partir du volume de l'ellipsoïde équivalent, lui-même calculé en supposant une certaine symétrie cylindrique des objets. Par ailleurs, la capacité du

modèle VOX-STORM à modéliser aisément des objets fortement concaves ou, à minima, non-étoilés, n'est en aucun cas mise en lumière.

2. Les méthodes proposées sont prévues pour simuler des populations d'objets synthétiques représentatives de populations réelles. Néanmoins, dans le cadre de cette application, tous les objets étudiés sont identiques, aux imperfections dues au processus d'impression 3D près. Par conséquent, il est impossible d'apprécier la capacité des modèles à générer une population représentative de la réalité puisque la population cible n'est constituée que de micro-variations d'un individu unique, les distributions de caractéristiques morphologiques étant pratiquement des distributions de Dirac.

Enfin, et principalement du fait de la relative simplicité de la géométrie des mûres imprimées en 3D, il n'est pas possible de comparer les performances des trois modèles, tant les erreurs relatives commises sur les mesures de caractéristiques morphologiques entre les prédictions et la vérité terrain sont similaires. Ainsi, dans la section suivante, une autre application est proposée, cette dernière permettant notamment de mettre clairement en évidence les limitations des modèles GRAPE et SPHERE par rapport au modèle VOX-STORM.

5.3 Application à des populations d'agrégats de latex

5.3.1 Description du protocole expérimental et définition des objectifs

Dans cette section, on se propose d'ajuster les paramètres des modèles afin de générer deux populations d'agrégats synthétiques différentes, représentatives de deux populations d'agrégats de nanoparticules de latex réelles. Pour ce faire, des images issues de deux séries d'expériences d'agrégation réalisées avec des conditions opératoires différentes par HAMIEH et al. [134] pour étudier l'évolution morphologique des particules de latex MBS (Méthacrylate Butadiène Styrène) sont utilisées. La Fig. 5.5 illustre de manière schématique le dispositif expérimental utilisé pour mener à bien ces expériences de coagulation du latex. Une solution de nanoparticules de latex est diluée dans de l'eau déminéralisée sous agitation puis portée à la température (T_1).

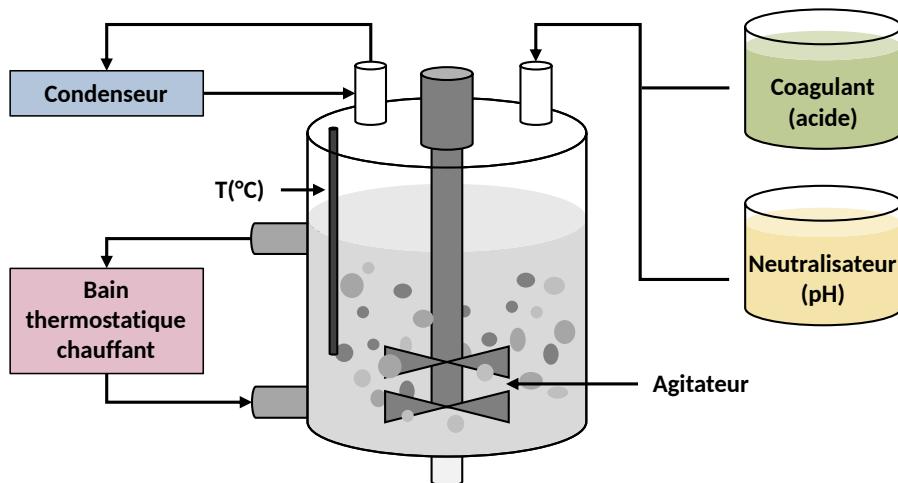


FIGURE 5.5 – Schéma du dispositif expérimental utilisé pour les expériences d'agrégation de latex MBS.

Dès que la température T_1 est atteinte, l'acide est injecté initiant ainsi le processus

de coagulation. L'agent de neutralisation est ensuite injecté (soude) puis la suspension est chauffée jusqu'à atteindre la température T2. La première expérience d'agrégation (Exp. 1) a utilisé une vitesse d'agitation de 200 rpm avec une concentration de coagulant de 4.16 mmol/L à des températures de déstabilisation de 30°C, ce qui a entraîné la formation d'agrégats plus petits et moins compacts. La deuxième expérience (Exp. 2) utilise la même vitesse d'agitation de 200 rpm et une concentration de coagulant de 2.08 mmol/L, avec une température de déstabilisation plus élevée de 42°C, ce qui entraîne la formation d'agrégats plus grands et plus denses. La Fig. 5.6 montre des exemples d'images obtenues par le morphogranulomètre à l'issue de chacune de ces expériences, c'est-à-dire après avoir chauffé la solution à une température de 95°C dans les deux cas. Les agrégats de l'Exp. 1 apparaissent effectivement plus petits et surtout moins denses (de dimension fractale a priori moins élevée que pour les agrégats de l'Exp. 2), propriétés qui peuvent s'expliquer par la concentration en acide plus élevée et la température de déstabilisation plus basse.

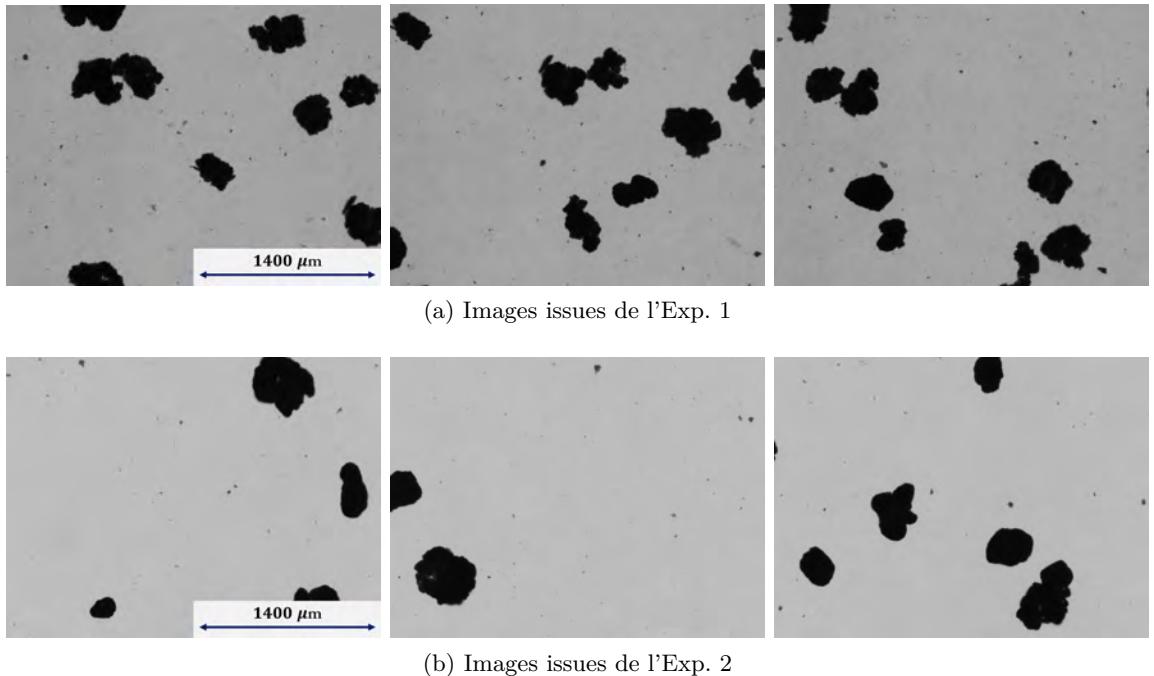


FIGURE 5.6 – Exemple d'images capturées par le morphogranulomètre pour les Exp. 1 et Exp. 2. La largeur de chaque image est de 2.8 mm pour 2,584 px.

L'objectif principal de cette section est d'appliquer la méthode proposée par chacun des trois modèles aux deux ensembles de 3,500 images provenant de chacune des deux expériences. Cela signifie que les paramètres du modèle GRAPE, du modèle SPHERE, puis du modèle VOX-STORM, seront optimisés afin de trouver deux paramétrages optimaux qui font correspondre les distributions des caractéristiques morphologiques 2D des objets générés par les modèles avec les distributions mesurées sur les images capturées par le morphogranulomètre. Bien que la vérité terrain ne soit pas connue en ce qui concerne les caractéristiques morphologiques 3D des agrégats de latex, il sera néanmoins possible de comparer les performances des modèles au niveau de la correspondance des prédictions des caractéristiques morphologiques 2D avec les mesures effectuées par analyse d'image. Des mesures effectuées par diffraction laser seront utilisées pour évaluer de manière quantitative la qualité des prédictions pour ce qui est des caractéristiques morphologiques 3D.

5.3.2 Résultats

Les paramètres optimaux des trois modèles sont estimés en minimisant leurs fonctions de coût respectives à l'aide de l'algorithme PSO pour les modèles SPHERE et VOX-STORM et par recuit simulé pour le modèle GRAPE. Les distributions des caractéristiques morphologiques 2D et 3D qui en résultent sont présentées dans les Fig. 5.7 et Fig. 5.8 pour l'Exp. 1 et l'Exp. 2, respectivement, et comparées à la vérité de terrain mesurée sur les images capturées par le morphogranulomètre dans le cas des caractéristiques 2D.

5.3.2.1 Caractéristiques morphologiques 2D

Visuellement, le modèle VOX-STORM semble fournir des prédictions plus cohérentes que les deux autres modèles en termes de caractéristiques morphologiques 2D, bien que les différences soient minimes. La distance de variation totale (TVD) entre chacune des prédictions et la vérité terrain, lorsqu'elle est connue, est calculée et présentée dans le tableau 5.2, et le modèle VOX-STORM obtient de meilleurs résultats dans 75% des cas. Dans l'ensemble, les trois modèles parviennent très bien à prédire les caractéristiques morphologiques 2D de taille et de forme des objets, c'est-à-dire le diamètre du cercle équivalent (ECD) et l'aspect ratio (AR).

Modèles	TVD – Exp. 1				TVD – Exp. 2			
	ECD	AR	C	Co	ECD	AR	C	Co
VOX-STORM	0.050	0.055	0.112	0.108	0.052	0.036	0.132	0.158
SPHERE	0.055	0.064	0.129	0.119	0.032	0.072	0.203	0.162
GRAPE	0.087	0.076	0.121	0.198	0.076	0.270	0.211	0.221

TABLE 5.2 – Distance de variation totale entre les distributions de caractéristiques morphologiques 2D prédites par les trois modèles considérés (Fig. 5.7 et Fig. 5.8) et la vérité terrain obtenue en analysant les images acquises à l'issue des Exp. 1 et Exp. 2, respectivement.

Les caractéristiques morphologiques 2D d'angularité et de texture, à savoir la circularité (C) et la convexité (Co), sont assez bien restituées par les trois modèles pour l'Exp. 2, avec un net avantage pour VOX-STORM en ce qui concerne la circularité. En revanche, les prédictions pour ces mêmes caractéristiques sont légèrement moins bonnes pour l'Exp. 1, le modèle VOX-STORM se montrant à nouveau légèrement meilleur en ce qui concerne la convexité.

Cette difficulté à ajuster les trois modèles aux distributions de circularité et de convexité pour l'Exp. 1, par opposition à l'Exp. 2, peut être expliquée par le fait que la population d'agrégats visible sur les images de l'Exp. 1 est plus diverse et moins homogène, avec de nombreux objets très compacts et circulaires, comme le suggèrent les deux pics observés proches de la valeur 1 sur la Fig. 5.7 pour la circularité et la convexité, et d'autres objets bien moins compacts, comme le suggèrent à la fois les distributions et les observations directes sur les images prises par le morphogranulomètre. En revanche, la population d'objets de l'Exp. 2 se révèle nettement plus homogène, et donc plus facile à simuler pour les modèles.

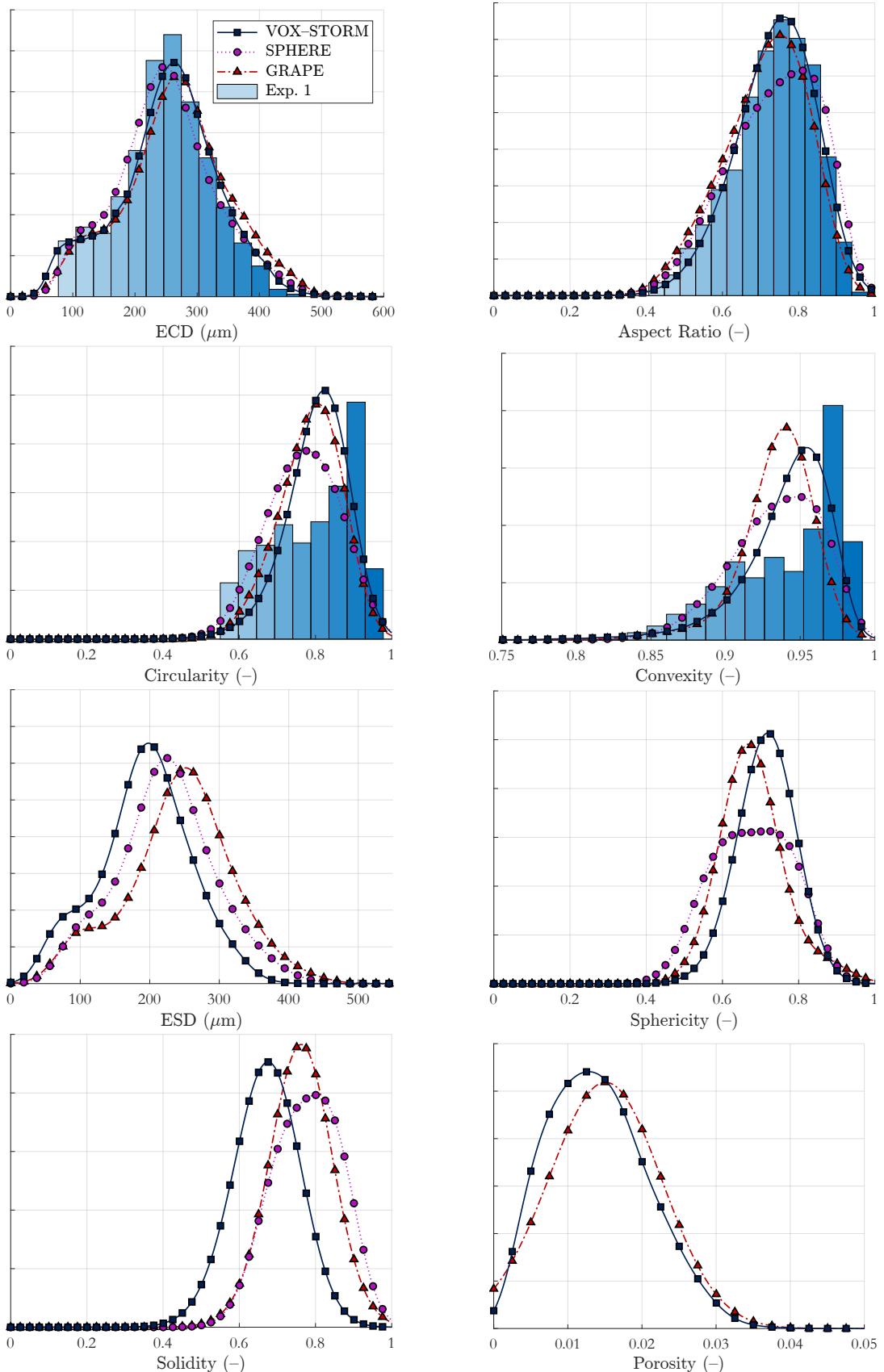


FIGURE 5.7 – Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés pour l’Exp. 1. Les distributions et l’histogramme sont exprimés en termes de fréquence et sont normalisés.

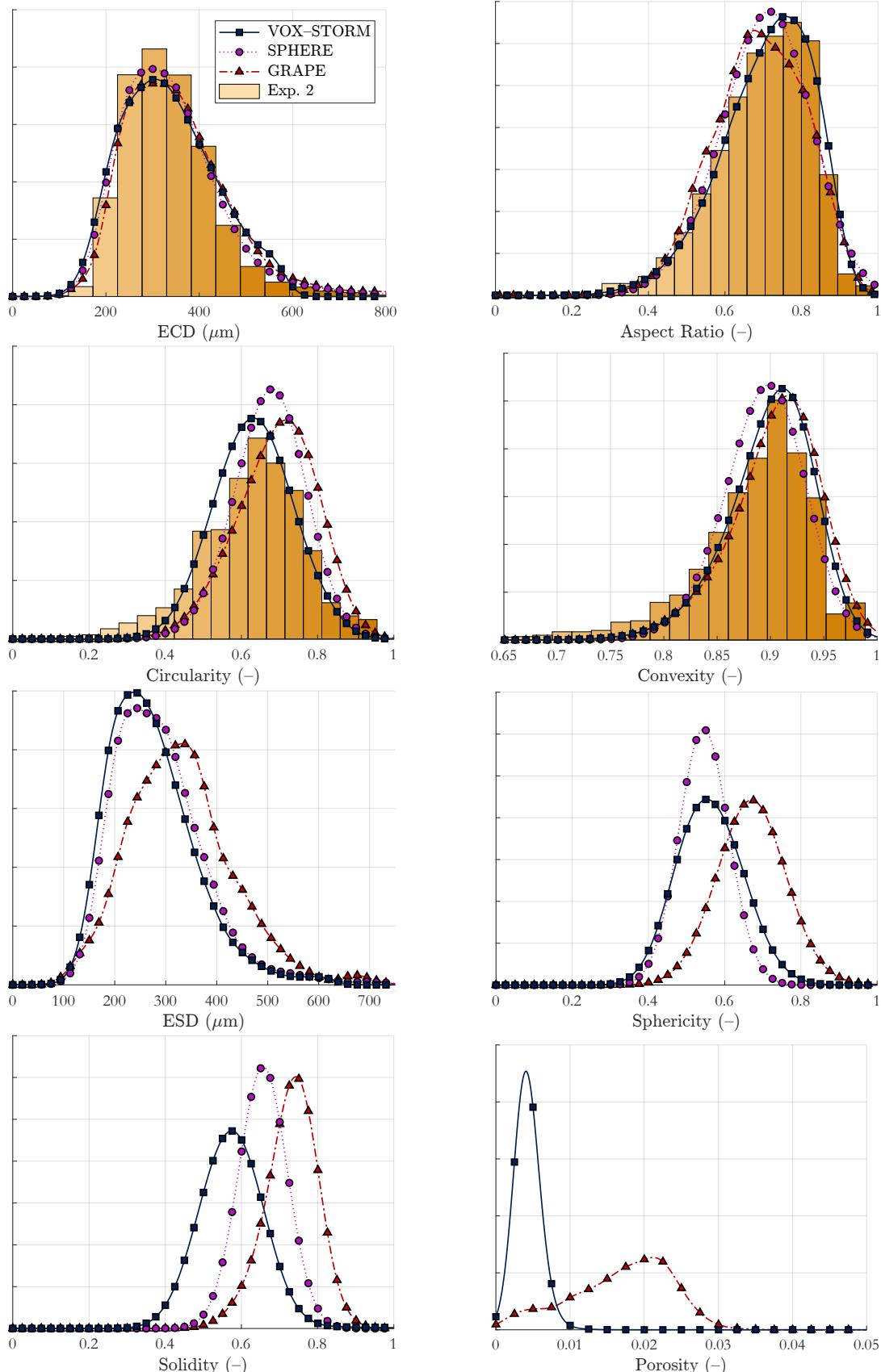


FIGURE 5.8 – Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés pour l’Exp. 2. Les distributions et l’histogramme sont exprimés en termes de fréquence et sont normalisés.

5.3.2.2 Caractéristiques morphologiques 3D

Plusieurs observations peuvent être faites en ce qui concerne les caractéristiques morphologiques 3D des objets générés par les modèles :

- En ce qui concerne les distributions de taille, le modèle VOX-STORM est beaucoup plus performant que les deux autres modèles, comme le montre le tableau 5.3, qui compare les valeurs médianes d'ESD prédites par les différents modèles avec une valeur mesurée par diffraction laser. En outre, la valeur obtenue pour l'Exp. 2 est identique à la valeur mesurée expérimentalement par HAMIEH et al. [134].
- Le fait que les modèles SPHERE et VOX-STORM soient souvent en accord est un bon signe. Étant donné que le modèle GRAPE s'appuie sur une estimation a priori du volume pour prédire les caractéristiques morphologiques 3D, ses prédictions doivent être considérées avec prudence. En outre, le modèle VOX-STORM a tendance à générer des objets dont la solidité (SLD) est plus faible, ce qui indique une plus grande différence entre les valeurs de volume et de volume convexe, et donc plus de concavité. Au-delà de l'aspect prédictif, il s'agit également d'une limitation technique des deux autres modèles, qui ne sont pas conçus pour générer des objets présentant une concavité importante.
- Enfin, le modèle VOX-STORM prédit une porosité plus faible pour les objets de l'Exp. 2 (0.4% en moyenne) que pour ceux de l'Exp. 1 (1.3% en moyenne). Ceci est en accord avec les observations expérimentales, selon lesquelles les agrégats de l'Exp. 2 sont plus grands et plus compacts, probablement en raison de la température de déstabilisation plus élevée, alors que le modèle GRAPE prédit le contraire, avec une porosité des objets de l'Exp. 2 (1.19% en moyenne) presque identique à celle de l'Exp. 1 (1.21% en moyenne). Le modèle SPHERE, quant à lui, ne génère que des maillages et n'est donc pas capable de prédire la porosité.

S'il est difficile de quantifier les performances des différents modèles en matière de prédiction de caractéristiques morphologiques 3D, il est néanmoins possible d'affirmer que VOX-STORM semble obtenir les résultats les plus convaincants, avec notamment des statistiques de taille (ESD) plus proches des mesures expérimentales et une prédiction plus réaliste de la porosité.

ESD Médian (μm)				
	Diffraction Laser	VOX-STORM	SPHERE	GRAPE
Exp. 1	165	196	223	248
Exp. 2	262	262	277	323

TABLE 5.3 – Valeurs médianes des distributions d'ESD prédites par les trois modèles, comparées à des mesures de diffraction laser.

5.3.2.3 Comparaison des dimensions fractales

L'absence de véritable terrain pour quantifier la qualité des prédictions des modèles signifie que d'autres points de comparaison que les caractéristiques morphologiques 3D présentées par les Fig. 5.7 et Fig. 5.8 doivent être utilisés. Ainsi, le calcul des dimensions fractales 2D et 3D peut constituer un indicateur supplémentaire de la capacité prédictive des modèles. Par conséquent, les dimensions fractales *box-counting* (D_2^{BC} et D_3^{BC}), la dimension fractale définie par une loi de puissance reliant la surface des objets et une dimension caractéristique (D_2^{PL}) et la dimension fractale de masse (D_3^{LS}) – mesurée expérimentalement par

diffraction laser pour les agrégats de latex et par simulation informatique pour les objets générés par les différents modèles – sont calculées.

La Fig. 5.9 et les résultats présentés dans le tableau 5.4 montrent clairement que le modèle VOX-STORM est beaucoup plus proche de la vérité terrain que les deux autres, avec des dimensions fractales 2D très proches de celles mesurées sur les images du morphogranulomètre, et des dimensions fractales 3D obtenues par simulation de diffraction laser en accord avec les mesures expérimentales, et ce, pour les deux expériences. En revanche, les deux autres modèles prédisent des dimensions fractales de masse plus faibles pour l'Exp. 2 que celles prédictes pour l'Exp. 1, ce qui contredit les mesures expérimentales et les observations directes que l'on peut faire sur les images, les agrégats issus de l'Exp. 2 étant visiblement plus compacts que ceux de l'Exp. 1.

	Exp. 1				Exp. 2			
	D_2^{BC}	D_2^{PL}	D_3^{BC}	D_3^{LS}	D_2^{BC}	D_2^{PL}	D_3^{BC}	D_3^{LS}
Vérité Terrain	1.80	1.89	–	2.7	1.93	1.55	–	2.9
VOX-STORM	1.81	1.81	2.54	2.75	1.94	1.62	2.76	2.90
SPHERE	1.84	1.85	2.67	2.85	1.83	1.72	2.62	2.81
GRAPE	1.86	1.90	2.66	2.75	1.78	1.70	2.52	2.64

TABLE 5.4 – Dimensions fractales (2D et 3D) prédictes par les modèles et comparées à la vérité terrain obtenue par mesure expérimentale (diffraction laser) ou par analyse d'image. Les valeurs moyennes en gras sont les plus proches de la vérité terrain.

La dimension fractale de masse D_3^{LS} est mesurée expérimentalement à l'aide d'un Mastersizer 3000 pour la vérité terrain et simulée sur ordinateur à partir de représentations d'objets voxélisés pour les objets synthétiques. L'intensité de diffusion $I(k)$ est donnée par le module carré de la FFT_{3D} des objets voxélisés (SORENSEN [138] et DAO et al. [180]), et des corrections basées sur la théorie de Mie sont appliquées pour tenir compte de l'absorption et de la réfraction (BARBER et al. [181]), où les indices d'absorption et de réfraction du latex MBS utilisé sont respectivement de 0.1 et de 1.528. Cependant, il s'agit d'un modèle simplifié basé sur des hypothèses qui peuvent ne pas correspondre en tous points au micro-logiciel du Mastersizer 3000. Pour cette raison, il peut ne pas y avoir d'équivalence directe entre les valeurs de D_3^{LS} mesurées expérimentalement et celles obtenues par simulation numérique. Néanmoins, l'interprétation qualitative des résultats reste valable, et la tendance prédictive par le modèle VOX-STORM d'une dimension fractale de masse plus élevée pour l'Exp. 2 que pour l'Exp. 1 est cohérente avec les mesures expérimentales, contrairement aux prédictions du modèle SPHERE en ce domaine, par exemple.

5.3.3 Discussion et comparaison des performances des modèles

Les résultats obtenus à partir des données expérimentales indiquent que le modèle VOX-STORM est légèrement plus performant que les deux autres pour ce qui est de la justesse de la correspondance des caractéristiques morphologiques 2D. De même, dans le cas des caractéristiques morphologiques 3D, les mesures expérimentales de taille (ESD) et de dimension fractale (D_3^{LS}) effectuées par diffraction laser confirment que VOX-STORM est également meilleur que les deux autres. Il convient de noter que toutes les propriétés morphologiques (à l'exception des différentes dimensions fractales) sont calculées à l'aide de fonctions intégrées à MATLAB®, les définitions de ces dernières étant sans ambiguïté

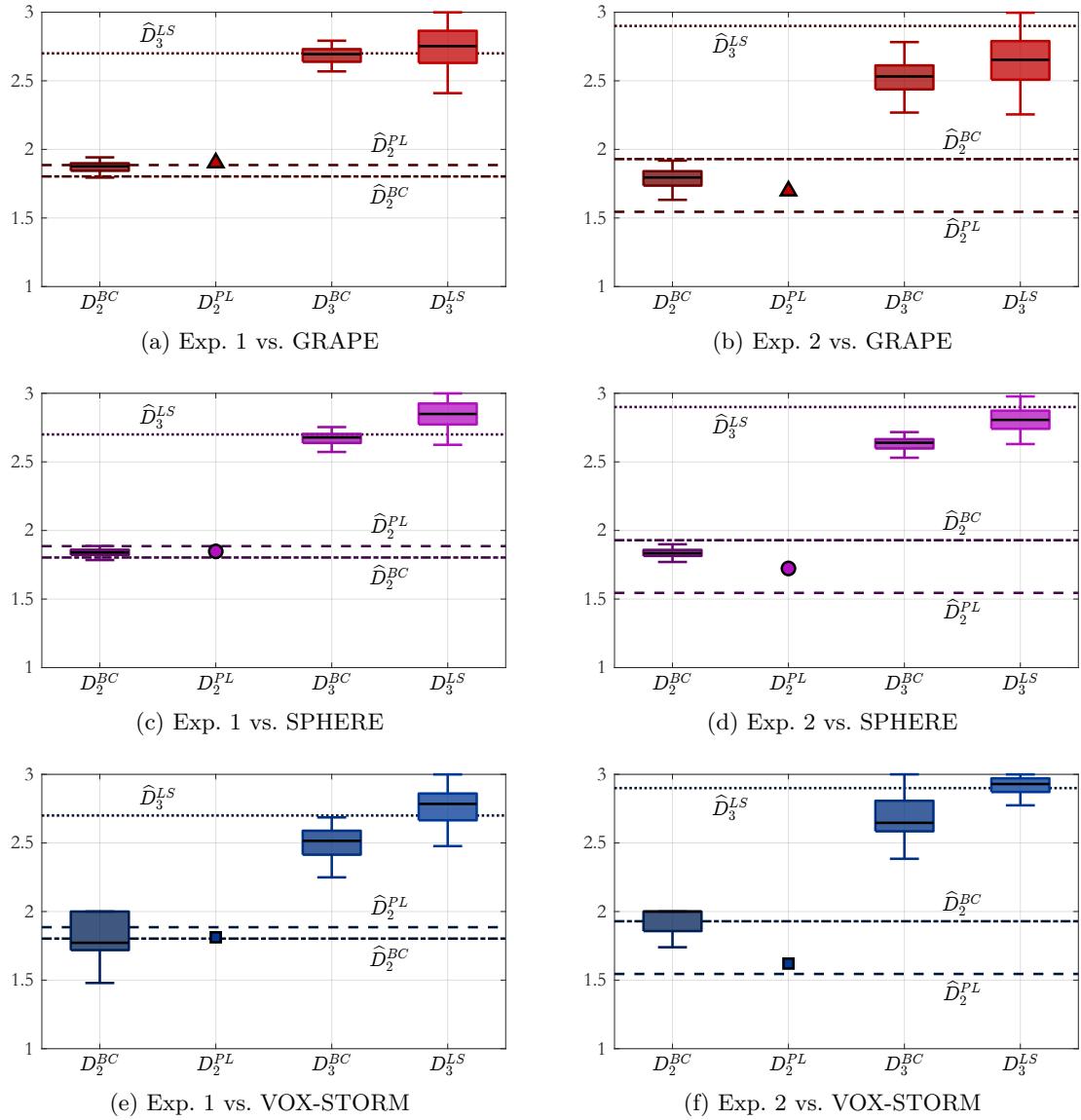


FIGURE 5.9 – Comparaison des prédictions des trois modèles pour toutes les dimensions fractales 2D et 3D pour l’Exp. 1 et l’Exp. 2.

lorsqu’elles sont calculées sur des maillages, comme c’est le cas pour les modèles SPHERE et VOX-STORM (grâce à l’utilisation d’alpha-shapes).

En particulier, les avantages du modèle VOX-STORM sur ses concurrents directs peuvent être résumés comme suit :

1. Meilleures performances d’ajustement et de prédiction pour les caractéristiques morphologiques 2D et 3D que d’autres modèles géométriques stochastiques basés sur l’empilement de sphères dures ou la déformation de maillages.
2. Capacité à modéliser des objets non-convexes, non-étoilés, et possibilité de fournir des informations sur la porosité de ces derniers.
3. Génération rapide d’un grand nombre d’objets aux géométries complexes, ainsi que calcul rapide de leurs propriétés morphologiques (Fig. 5.10).
4. Un haut degré de flexibilité au prix d’un nombre légèrement plus élevé de paramètres, ce qui permet au modèle de générer des objets avec une grande diversité de caractéristiques morphologiques.

Par ailleurs, en ce qui concerne le temps de génération des objets ainsi que le temps nécessaire pour mesurer leurs caractéristiques morphologiques, la Fig. 5.10 propose une analyse comparative des trois modèles dans le cadre de l'application proposée au sein de cette section. On constate que, bien que le modèle VOX-STORM ne soit pas aussi rapide qu'un modèle stochastique basé sur la déformation d'un maillage ellipsoïdal, à savoir le modèle SPHERE, il demeure néanmoins le plus rapide lorsque le temps calcul des mesures de caractéristiques morphologiques est pris en compte. En effet, pour VOX-STORM, les caractéristiques morphologiques sont mesurées à partir du maillage défini par l'alpha-shape. En raison de la manière dont ce maillage est généré, il peut être considéré comme une forme adaptative de maillage, où chaque élément de surface n'a pas la même taille, contrairement au modèle SPHERE. Comme la taille des cellules d'une alpha-shape est variable, le nombre de sommets est réduit et le temps de calcul est réduit.

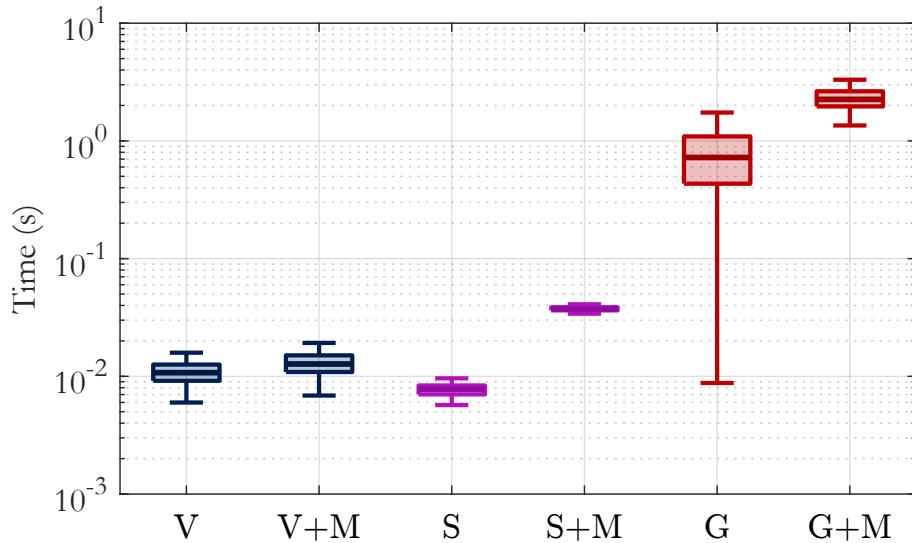


FIGURE 5.10 – Temps de calcul nécessaire à chaque modèle pour générer des objets synthétiques et effectuer des mesures morphologiques. Les données correspondent à un total de 20000 objets, répartis en deux ensembles de 10,000 éléments pour chacune des paramétrisations correspondant aux deux expériences (Exp. 1 et Exp. 2). Les lettres V, S et G correspondent respectivement aux modèles VOX-STORM, SPHERE et GRAPE, et le suffixe +M indique que le temps de calcul des caractéristiques morphologiques à l'aide de MATLAB® est pris en compte.

Il est à noter que la variance des temps de génération et de mesure pour le modèle SPHERE, basé sur un maillage unique, est extrêmement faible et ne dépend pas du tout de la taille des objets modélisés, contrairement aux deux autres approches, où le nombre de particules élémentaires (voxels ou sphères dures) augmente avec la taille de l'objet et a une influence significative sur les temps de génération et de mesure.

Enfin, le modèle GRAPE, basé sur l'empilement de sphères dures, offre les plus mauvaises performances en termes de temps de calcul, ce dernier évoluant considérablement en fonction de la taille des objets, comme le montre clairement la grande variance visible dans le diagramme en boîte de la Fig. 5.10. Le temps nécessaire pour les mesures 3D est également beaucoup plus important que pour les deux autres approches pour lesquelles un maillage fermé de la surface extérieure est directement généré.

Cependant, même si le modèle VOX-STORM présente globalement de meilleures performances que les modèles GRAPE et SPHERE, il rencontre néanmoins certaines limites :

1. Bien qu'il se soit révélé très efficace pour modéliser la population de l'Exp. 2, tant au niveau des caractéristiques morphologiques 2D que 3D, la modélisation de l'Exp. 1 est nettement moins satisfaisante, en particulier pour les caractéristiques d'angularité et de texture, bien que les caractéristiques de taille (ECD) et de forme (AR, dimensions fractales) soient assez bien approximées. Comme mentionné précédemment, cela peut être dû au fait que la population d'agrégats de latex présente dans l'Exp. 1 est moins homogène que dans l'Exp. 2. Une première solution pourrait être d'utiliser des variables aléatoires, éventuellement corrélées, au lieu de scalaires fixes dans la paramétrisation du modèle, comme c'est déjà le cas pour le nombre d'itérations. Une autre solution, que nous évoquerons rapidement dans la suite, serait d'utiliser deux instances du modèle VOX-STORM en parallèle afin de modéliser une population bimodale hétérogène par la somme de 2 populations monomodales qui seraient, elles, plutôt homogènes. Cette seconde approche complexifie néanmoins le modèle global, avec notamment un doublement du nombre de paramètres.
2. Comme pour tout modèle itératif, le temps de calcul augmente avec le nombre d'itérations et la taille des objets, ce qui n'est pas le cas du modèle SPHERE. Cependant, la complexité temporelle est polynomiale en raison de la génération de la grille de voxels 3D basée sur une convolution et du fait que les alpha-shapes sont dérivées d'une triangulation de Delaunay dont la complexité du calcul dans le pire des cas est $\mathcal{O}(n \log n)$ (LEACH [177]), où n est le nombre de voxels, contrairement aux modèles d'empilement de sphères dures dont la complexité temporelle est en général beaucoup plus élevée et parfois exponentielle (LOZANO et al. [182]).
3. La flexibilité de VOX-STORM est en partie due à ses 8 paramètres (7 pour le processus d'optimisation). Cependant, cela signifie que trouver un ensemble de paramètres optimal pour générer une population d'objets représentative de la réalité à partir d'images 2D et à l'aide d'un processus d'optimisation est beaucoup plus long et difficile que pour un modèle comptant moins de paramètres. À titre de comparaison, le modèle SPHERE ne nécessite d'ajuster que 5 paramètres, et le modèle GRAPE n'en nécessite que 2 (taille des particules primaires et distance d'intersection), mais en effectuant toutefois de fortes hypothèses sur la géométrie de l'objet final.

Malgré ces limitations, le modèle VOX-STORM obtient globalement de meilleurs résultats que les deux autres pour ce qui est de la modélisation des deux populations d'agrégats étudiées dans cette section et de la prédiction de leurs caractéristiques morphologiques 3D à partir d'images 2D projetées capturées par un morphogranulomètre.

Population hétérogène & Duplication du modèle VOX-STORM

Comme mentionné précédemment, les résultats obtenus pour tous les modèles sont moins convaincants en ce qui concerne la population d'agrégats de l'Exp. 1 que pour celle de l'Exp. 2. L'explication principale avancée est le fait que lors de l'Exp. 1, deux populations d'agrégats relativement homogènes sont synthétisées, avec notamment des agrégats plutôt compacts à la solidité (SLD) et la sphéricité (Φ) élevées d'une part, et des agrégats à la dimension fractale plus faible d'autre part. Ces deux populations cohabitent pour former un ensemble global hétérogène et qu'il est difficile de modéliser avec des ensembles de paramètres scalaires pour la plupart. Une preuve de la validité de cette hypothèse est que la plupart des distributions de caractéristiques morphologiques 2D mesurées pour l'Exp. 1 sont pratiquement multimodales, ou semblent pouvoir être exprimées simplement comme

le mélange de deux distributions au minimum (cf. Fig. 5.7), contrairement à celles de l'Exp. 2 qui sont clairement mono-modales.

Par ailleurs, le cas de l'Exp. 2 montre que le modèle VOX-STORM est tout à fait capable de modéliser des populations globalement homogènes avec précision, au moins en ce qui concerne les caractéristiques morphologiques 2D. L'idée proposée est d'utiliser deux instances du modèles VOX-STORM en parallèle, avec deux ensembles de paramètres indépendants Ω_1 et Ω_2 . Les deux populations générées à partir de ces deux paramétrisations sont ensuite combinées dans des proportions ω et $1 - \omega$ avec $\omega \in [0; 1]$. La Fig. 5.11 illustre le mode de fonctionnement de ce meta-modèle dénommé VOX-STORM++, et qui dépend donc de $2 \times 8 + 1 = 17$ paramètres (soit 15 paramètres à ajuster durant le processus d'optimisation).

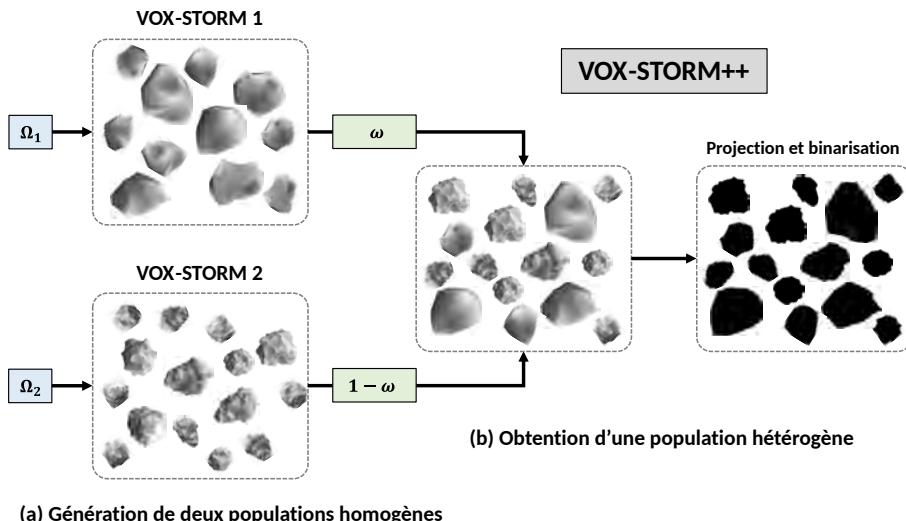


FIGURE 5.11 – Illustration du principe de duplication du modèle VOX-STORM proposé pour modéliser des populations hétérogènes.

Ainsi, et de la même manière que précédemment, la fonction de coût définie par l'équation (4.25) est minimisée par PSO, cette dernière prenant cette fois un ensemble de paramètres constitué de deux sous-paramétrisations Ω_1 et Ω_2 de deux instances du modèles VOX-STORM fonctionnant et parallèle, ainsi que de la pondération ω permettant de définir dans quelle proportion sommer les deux populations homogènes. Les résultats obtenus par le modèle VOX-STORM++ à partir des données de l'Exp. 1 sont illustrés par la Fig. 5.12, et on peut dès lors effectuer plusieurs observations.

- De manière purement qualitative, les distributions de caractéristiques morphologiques 2D de taille (ECD) et de forme (AR) correspondent toujours bien à la vérité terrain. En revanche, et contrairement aux résultats obtenus précédemment, les distributions de caractéristiques morphologiques 2D d'angularité et de texture (C et Co) ont clairement une allure bien plus proche des données réelles. En particulier, les deux pics proches de la valeur 1 observés se retrouvent bien dans chacun des cas.
- En ce qui concerne les caractéristiques morphologiques 3D, l'allure des distributions proposées par le modèles VOX-STORM++ correspondent davantage à une réalité que les distributions mono-modales prédites par les modèles GRAPE, SPHERE et VOX-STORM semblaient ignorer.
- Enfin, pour prédire les nombres d'itérations $n_{i,1}$ et $n_{i,2}$ de chacune des deux ins-

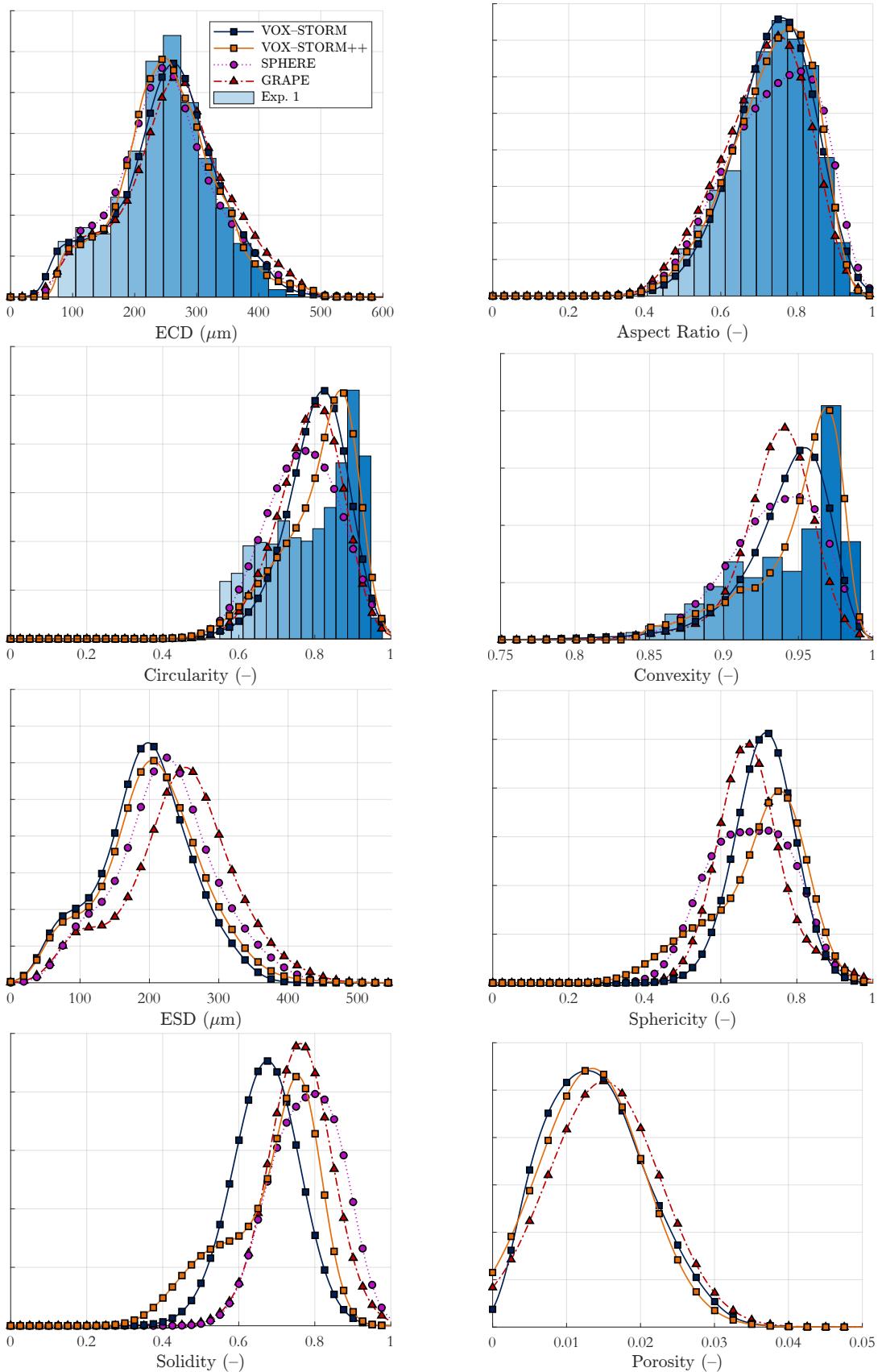


FIGURE 5.12 – Comparaison des prédictions des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D des trois modèles géométriques stochastiques proposés, ainsi que celles de la version dupliquée du modèle VOX-STORM, pour l’Exp. 1. Les distributions et l’histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.

tances du modèle VOX-STORM à partir de l'équation (4.23), l'ensemble des données a été scindé en deux, en exprimant la distribution de convexité (Co) comme une somme de Gaussiennes. C'est en particulier pour cette raison que la distribution de convexité est mieux prédictée par le modèle VOX-STORM++ que la distribution de circularité, par exemple.

En conséquence, il apparaît clairement que cette approche, bien que nettement plus complexe à mettre en œuvre, permet d'obtenir des résultats de meilleure qualité. Par ailleurs, la séparation des données permettant de prédire les nombres d'itérations $n_{i,1}$ et $n_{i,2}$ pourrait probablement être effectuée avec plus de rigueur, en considérant les distributions jointes de circularité, d'ECD, et éventuellement de convexité, plutôt que les simples distributions marginales, afin d'obtenir une distribution de circularité correspondant davantage à la réalité.

5.4 Conclusion générale

Dans ce chapitre, trois questions principales étaient posées :

1. Les méthodes proposées pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D de populations d'agrégats sont-elles valides en dehors du cadre d'une validation numérique ?
2. Ces méthodes sont-elles suffisamment robustes pour être utilisées pour un cas d'application réelle, avec par exemple des images capturées par un morphogranulomètre ?
3. L'un des modèles se révèle-t-il plus performant que les deux autres en terme d'estimation des caractéristiques morphologiques 2D et 3D ?

Validité de la méthode

Les deux applications proposées, que ce soit avec les agrégats imprimés en 3D ou avec les populations d'agrégats de latex MBS, répondent à cette question à leur manière. Pour la première application, il apparaît clairement que chacun des trois modèles peut être utilisé pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'objets relativement compacts et convexes, et présentant une certaine symétrie cylindrique. Pour ce qui est de la seconde application, bien que la vérité terrain soit inconnue, les mesures effectuées par diffraction laser tendent à exposer les limites du modèle GRAPE ainsi que du modèle SPHERE, dans une moindre mesure, tout en validant les prédictions effectuées par le modèle VOX-STORM.

Application à des données réelles

Pour chacune des applications proposées, les données utilisées sont des images capturées par un morphogranulomètre, ce qui n'a aucune incidence apparente sur la qualité des résultats, la définition de ces dernières étant particulièrement élevée. Néanmoins, le cas d'images capturées in-situ à l'aide d'une caméra CCD sera abordé au chapitre suivant, et fera apparaître de nouvelles difficultés.

Performance des modèles

Si les trois modèles obtiennent des résultats similaires dans le cadre de la première application pour ce qui est de la prédiction des caractéristiques 2D et 3D, il n'en est rien pour ce qui est de la seconde application. Le modèle VOX-STORM se révèle nettement plus performant, qu'il s'agisse des distributions de caractéristiques morphologiques 2D et 3D, ou encore des calculs de dimensions fractales. Par ailleurs, la mise en œuvre du modèle VOX-STORM, avec une relation évidente entre l'un des paramètres du modèle et les distributions de taille (équations (4.23) et (4.24)), ainsi que la rapidité de la génération des objets (Fig. 5.10), le placent clairement en tête du classement. Et c'est sans compter le fait que ce dernier ne nécessite aucune hypothèse forte quant au volume des objets comme c'est le cas pour GRAPE, ou quant au sens de l'observation de ces derniers (dans une direction orthogonale au diamètre de Feret maximum), comme c'est encore le cas pour GRAPE, mais également pour SPHERE.

Questions restant en suspens

Ainsi, VOX-STORM semble être capable d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D de populations d'agrégats à partir d'images 2D projetées capturées par un morphogranulomètre, en faisant appel à son extension VOX-STORM++ dans le cas de populations hétérogènes, si nécessaire. Néanmoins, plusieurs points doivent encore être éclaircis.

- Les applications proposées dans ce chapitre utilisent des images capturées par un morphogranulomètre. La méthode proposée est-elle toujours valable si les images sont capturées in-situ, avec une qualité moindre, et avec une orientation des objets totalement aléatoire (que l'on peut tout de même supposer uniforme d'un point de vue statistique) ?
- La méthode proposée nécessite de minimiser une fonction de coût, et bien que certains paramètres du modèles puissent être estimés a priori, ce processus d'optimisation peut être relativement long (plusieurs heures). Dans le cadre d'une application industrielle, est-il possible d'obtenir les résultats plus rapidement, en quelques minutes si ce n'est en temps réel ?

Le chapitre suivant se propose de répondre à ces questions à travers la proposition d'une nouvelle approche basée sur un modèle d'apprentissage profond, ainsi que l'étude d'une nouvelle application avec des images capturées in-situ par une caméra CCD.

Chapitre 6

Génération d'objets 3D par apprentissage profond à partir d'images 2D

Contenu du chapitre

6.1	Introduction	117
6.1.1	Contenu du chapitre	117
6.1.2	Problématique générale et méthode proposée	118
6.2	Développement d'un modèle génératif d'objets 3D	119
6.2.1	Réseaux antagonistes génératifs pour la génération d'objets 3D	119
6.2.2	Entraînement	122
6.2.3	Validation	126
6.3	Caractérisation morphologique 3D à partir d'images in-situ synthétiques	129
6.3.1	Description de la méthode	129
6.3.2	Génération des données	131
6.3.3	Résultats	132
6.3.4	Discussion	136
6.4	Conclusion générale	137

6.1 Introduction

6.1.1 Contenu du chapitre

Dans ce chapitre, un modèle d'apprentissage profond entraîné à partir de données issues du modèle VOX-STORM et permettant de générer des objets voxélisés 3D à partir d'une image 2D projetée à niveaux de gris est présenté. L'entraînement du modèle et la validation des résultats sont explicités et un processus complet d'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir d'images 2D projetées est décrit dans la dernière section.

6.1.2 Problématique générale et méthode proposée

Dans les chapitres précédents, trois modèles géométriques stochastiques différents ont été présentés puis utilisés afin d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'agrégats de nanoparticules de latex à partir d'images issues d'un morphogranulomètre. Il a ainsi été mis en évidence que sous certaines hypothèses, certes restrictives, la correspondance au niveau des distributions de caractéristiques morphologiques 2D était plutôt satisfaisante pour chacun des trois modèles, mais que VOX-STORM se révèle être le plus performant en ce qui concerne la prédiction des caractéristiques morphologiques 3D. Néanmoins, cette application de la méthode proposée à des images ex-situ, à savoir les images capturées par le morphogranulomètre (cf. Fig. 5.6), ne permet de répondre que partiellement à la problématique industrielle de cette thèse, à savoir l'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats de nanoparticules de latex à partir d'images in-situ. En effet, ces dernières ont souvent une moins bonne définition que les images ex-situ et doivent être analysées sans émettre la moindre hypothèse concernant l'orientation de chacun des objets.

Par conséquent, dans ce chapitre, un nouvel outil est proposé. Ce dernier, basé sur un réseau antagoniste génératif (GAN), se doit d'être capable de répondre à la problématique de cette thèse, notamment à partir d'images in-situ, et donc de s'affranchir des limitations (listées ci-dessous) des méthodes basées sur l'optimisation des paramètres d'un modèle géométrique stochastique présentées jusque là.

- **Complexité** ou difficulté de mise en œuvre. L'optimisation d'une fonction de coût peut en effet être un processus complexe, les surfaces à optimiser n'étant pas nécessairement convexes, et la fonction de coût dépendant elle-même d'un processus stochastique. Ce processus peut de surcroît se révéler parfois très lent, de l'ordre de plusieurs heures.
- **Lenteur** du processus d'optimisation, ainsi que de la mise en œuvre de la méthode. En effet, en amont de l'optimisation de la fonction de coût, le traitement des données, et notamment l'estimation des caractéristiques morphologiques 2D par analyse d'image est également un processus long et coûteux, en particulier lorsqu'il s'agit d'images ex-situ, qui nécessite donc davantage de manipulations pour être réalisé.
- **Transférabilité limitée** au cas d'images in-situ. Les images ex-situ capturées par le morphogranulomètre sont pratiquement binaires et de très haute résolution. Par ailleurs, il est raisonnable de supposer que les objets sont orientés dans une direction privilégiée du fait de la gravité. Cela n'est absolument pas le cas pour des images in-situ qui peuvent être fortement dégradées et avec des objets à l'orientation que l'on peut supposer uniformément aléatoire.

Pour toutes ces raisons, un modèle génératif développé à partir de techniques d'apprentissage profond (deep-learning) capable de générer un objet 3D voxélisé à partir d'une simple image 2D projetée à niveaux de gris est proposé. C'est en partie ce qui est proposé par GIANNIS et al. [170], bien que ces derniers utilisent des réseaux de neurones convolutifs afin de recréer un objet 3D à partir d'un nombre arbitrairement grand de projections 2D, tandis que nous ne disposons de notre côté que d'une unique projection par objet. En effet, d'un point de vue industriel, il n'est que très difficilement envisageable d'acquérir plusieurs images d'un seul et même agrégat.

Dans toute la suite, la définition du modèle génératif proposé est abordée, et en particulier son entraînement à partir de données générées par le modèle VOX-STORM ainsi

que l'étape de nécessaire validation sur des données synthétiques. Enfin, dans la dernière section, une validation croisée sur des données synthétiques issues d'une version améliorée du modèle SPHERE d'un processus complet d'estimation des caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir d'images 2D "*in-situ*" est proposé. En particulier, les performances de cette approche utilisant des modèles d'apprentissage profond entraînés sur des données synthétiques issues de modèles géométriques stochastiques seront comparées à une approche dite "*purement géométrique stochastique*", et ne faisant appel qu'à l'optimisation des paramètres du modèle VOX-STORM. Cette dernière section permettra en particulier de valider les outils utilisés dans le chapitre 7 suivant au sein duquel des images *in-situ* réalisées à l'aide d'un capteur CCD sont étudiées.

6.2 Développement d'un modèle génératif d'objets 3D

L'idée de l'utilisation de techniques d'apprentissage profond afin de s'affranchir des étapes de collecte des caractéristiques morphologiques 2D et de l'optimisation des paramètres des modèles géométriques stochastiques est apparue naturellement. En effet, grâce aux différents modèles développés et à leur grande flexibilité, nous sommes en mesure de générer très rapidement de très grandes bases de données contenant la géométrie 3D de populations d'agrégats, ainsi que les projections 2D correspondantes et toutes les mesures de caractéristiques morphologiques 2D et 3D afférentes. Ces données peuvent alors servir d'ensembles d'entraînement pour des modèles basés sur l'intelligence artificielle. Par ailleurs, le modèle VOX-STORM étant capable nativement de générer des structures 3D voxélisées, le choix d'un modèle génératif pouvant produire une structure voxélisée 3D à partir d'une unique projection 2D s'est imposé de lui-même. De plus, le comparatif de performances présenté au Chapitre 5 précédent montrent clairement que VOX-STORM est le modèle le plus flexible, et par conséquent, le plus à-même de générer des populations synthétiques variées et diversifiées, de sorte à obtenir des modèles très flexibles, tout en limitant le sur-apprentissage.

Dans la section suivante, la structure de GAN (Generative Adversarial Network), faisant appel à deux réseaux antagonistes, et qui a été retenue car bien établie, est présentée. La façon dont les modèles sont entraînés est ensuite détaillée et les résultats obtenus sont validés à l'aide de données indépendantes des données d'entraînement.

6.2.1 Réseaux antagonistes génératifs pour la génération d'objets 3D

Le but de cette partie est de proposer une solution au problème de la reconstruction 3D d'un objet à partir d'une simple projection 2D. Comme il est dit précédemment, pour ce qui est du cas d'objets granulaires tels que les agrégats qui nous intéressent, des techniques utilisant des réseaux de neurones convolutifs (CNNs) ont par exemple été proposées par GIANNIS et al. [170], ces dernières utilisant néanmoins plusieurs projections par objets, et avec des résultats satisfaisants à partir d'une dizaine de projections utilisées. Le fait que l'on ne puisse utiliser qu'une unique projection dans le cas qui nous intéresse complexifie de fait grandement le problème.

En particulier, les critères de Hadamard pour les problèmes bien posés, à savoir **l'existence**, **l'unicité** et **la stabilité** de la solution (c'est-à-dire que cette dernière dépend de manière continue des données initiales du problème), ne sont pas respectés, et le problème est donc dit "*mal-posé*" (cf. FU et al. [183]). En effet, plusieurs objets 3D différents peuvent produire une même image 2D projetée, et la conversion d'un objet 3D

en une image 2D entraîne une perte d'information, notamment la profondeur, ce qui rend le problème difficile à résoudre de manière unique et stable. C'est d'ailleurs pour limiter cette perte d'information que le choix a été fait de travailler à partir d'images à niveaux de gris, non seulement afin de se placer au plus près des conditions réelles et de la façon dont les images in-situ sont capturées, mais également dans l'espoir de conserver un maximum d'information qui serait de facto perdue en cas de binarisation.

Ainsi, le problème posé est moins celui de la reconstruction fidèle de la géométrie d'un objet 3D à partir de multiples projections 2D que celui de la génération de l'objet 3D le plus probable étant à l'origine d'une unique projection 2D connue. C'est pour cette raison que le choix a été fait d'utiliser une structure de GAN proposée par GOODFELLOW et al. [184] pour entraîner le modèle génératif, cette dernière reposant sur le couplage de deux modèles entraînés en parallèle, un **générateur** d'une part, et un **discriminateur** d'autre part.

Les réseaux antagonistes génératifs sont particulièrement adaptés à la génération de nouvelles données à partir de distributions complexes, présentant une grande variabilité et diversité, comme celles que l'on retrouve notamment en analyse d'image. Dans le cadre qui nous intéresse, le **générateur** prend en entrée une image 2D projetée à niveaux de gris et renvoie un objet 3D voxélisé. Le **discriminateur**, quant à lui, prend en entrée un objet 3D voxélisé et renvoie une probabilité $p \in [0; 1]$ indiquant si l'objet est issu de l'ensemble d'entraînement ($p \rightarrow 1$) ou s'il a été créé par le générateur ($p \rightarrow 0$). Le modèle VOX-STORM sera utilisé pour générer l'ensemble des données d'entraînement, de test et de validation. La Fig. 6.1 illustre le mode de fonctionnement de ces deux réseaux.

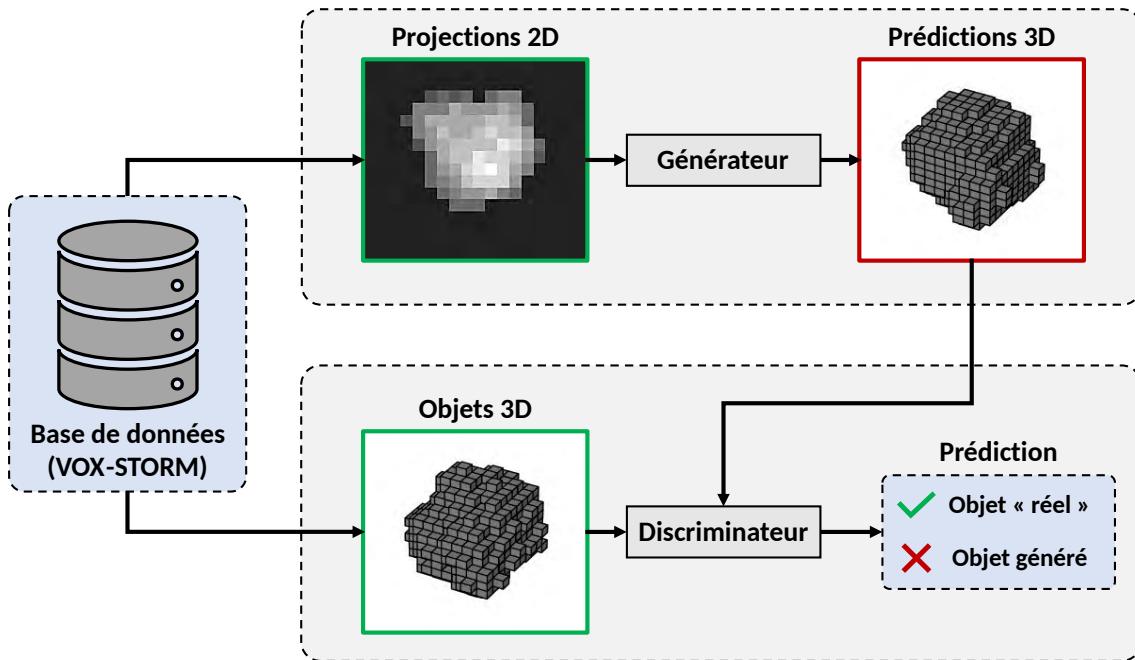


FIGURE 6.1 – Illustration du mode de fonctionnement du GAN utilisé pour générer des structures 3D voxélisées à partir d'images 2D à niveaux de gris. Les données d'entraînement sont générées par le modèle VOX-STORM.

Dans la suite, les architectures détaillées du générateur et du discriminateur sont présentées, et la plupart des termes techniques couramment utilisés sont définis.

Définitions et vocabulaire

L'univers des réseaux de neurones et de l'apprentissage profond fait souvent appel à des fonctions bien connues mais également à un vocabulaire très spécifique. Un réseau de neurones fonctionne en recevant des entrées auxquelles des transformations pondérées sont appliquées, et passe ensuite les résultats obtenus à travers des fonctions d'activation pour produire des sorties.

- **Unité** : Désigne un unique neurone dans une couche. Chaque unité reçoit des entrées, applique une transformation linéaire (pondérée), puis utilise une fonction d'activation pour produire une sortie.
- **Fonction d'activation** : Désigne une fonction non linéaire appliquée en sortie de chaque neurone dans un réseau de neurones, permettant au modèle de capturer des relations complexes dans les données.
 - **ReLU (Rectified Linear Unit)** : Une fonction d'activation définie par la relation suivante :

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x). \quad (6.1)$$

Elle introduit de la non-linéarité dans le modèle tout en conservant des gradients utiles pour l'apprentissage.

- **LeakyReLU** : Une variante de la ReLU qui permet un gradient de faible intensité lorsque l'unité est inactive ce qui peut permettre une meilleure convergence du modèle au prix de l'utilisation de valeurs négatives [185]. Elle est définie par la relation suivante :

$$\text{LeakyReLU}(x) = \max(\eta \times x, x), \quad (6.2)$$

où η est un petit facteur positif, appelé *pente négative*, en général de l'ordre de 10^{-2} .

- **Sigmoïde** : Une fonction d'activation qui envoie les valeurs d'entrée dans une plage comprise entre 0 et 1, et définie par :

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}. \quad (6.3)$$

Elle est souvent utilisée pour définir des sorties probabilistes.

- **Batch Normalization** : Une technique de normalisation des entrées de chaque couche proposée par IOFFE et al. [186] afin de stabiliser et accélérer l'entraînement. Elle normalise les activations en utilisant la moyenne et l'écart-type calculés sur un mini-batch, qui est un petit sous-ensemble des données d'entraînement. La transformation est donnée par :

$$\hat{x}^{(k)} = \frac{x^{(k)} - \mu_B}{\sqrt{\sigma_B^2 + \varepsilon}} \quad (6.4)$$

où $x^{(k)}$ est l'activation de la k -ième unité dans le mini-batch B , μ_B et σ_B sont la moyenne et l'écart-type calculés sur le mini-batch, et ε est une petite constante ajoutée pour la stabilité numérique.

Générateur

Le générateur est conçu pour transformer une image 2D projetée de dimension 64×64 en une structure 3D voxélisée de taille $32 \times 32 \times 32$. Son architecture comprend plusieurs couches de convolution 3D, chacune suivie de fonctions d'activation non linéaires,

typiquement des ReLU et LeakyReLU, et de couches de normalisation par lots (Batch Normalization). La dernière couche utilise une fonction d'activation sigmoïde pour produire une sortie dans l'intervalle [0; 1], représentant la probabilité de présence ou d'absence de voxels.

Discriminateur

Le discriminateur, quant à lui, est chargé de distinguer les structures 3D de taille $32 \times 32 \times 32$ générées par le générateur des structures 3D réelles, c'est-à-dire issues de l'ensemble d'entraînement et générées par le modèle VOX-STORM. Il utilise une architecture de réseau de neurones convolutifs similaires à celle du générateur, mais avec des couches de convolution adaptées aux volumes 3D et des fonctions d'activation telles que les LeakyReLU pour capturer les caractéristiques discriminatives. La dernière couche utilise une fonction d'activation sigmoïde pour produire une sortie dans l'intervalle [0; 1], représentant la probabilité que l'objet soit réel ou ait été généré par le générateur.

6.2.2 Entrainement

Le principe des GANs est d'entraîner simultanément le discriminateur (Fig. 6.3) et le générateur (Fig. 6.2) au sein d'une même boucle d'entraînement, avec une fonction de perte totale dépendant à la fois des prédictions de l'un et de l'autre. L'idée principale est qu'il faut que le discriminateur soit capable de distinguer aisément les objets réels des objets produits par le générateur afin d'aider ce dernier à s'améliorer et à générer des objets de plus en plus ressemblants aux données d'entraînement.

Fonction de perte

La fonction de perte utilisée est une combinaison de la perte d'un GAN classique (*minimax loss*) et de la *binary cross-entropy loss* (BCE) pour garantir que les structures 3D générées soient réalistes et proches des structures réelles. La perte du GAN est définie comme suit :

$$\mathcal{L}_{GAN}(D, G) = \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{data}(\mathbf{x})}[\log D(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{z} \sim p_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})}[\log(1 - D(G(\mathbf{z})))] \quad (6.5)$$

Dans cette équation :

- $\mathcal{L}_{GAN}(D, G)$ est la perte totale du GAN.
- D représente le discriminateur, et G représente le générateur.
- \mathbf{x} représente les images 3D réelles provenant de la distribution des données $p_{data}(\mathbf{x})$.
- \mathbf{z} représente les images 2D provenant de la distribution $p_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})$, qui est l'entrée du générateur G .
- $\log D(\mathbf{x})$ est la probabilité que les données réelles soient reconnues comme réelles par le discriminateur.
- $\log(1 - D(G(\mathbf{z})))$ est la probabilité que les données générées soient reconnues comme fausses par le discriminateur.

La perte du générateur \mathcal{L}_G vise à tromper le discriminateur en minimisant la BCE entre les sorties du discriminateur pour les données générées et les étiquettes réelles :

$$\mathcal{L}_G = \mathbb{E}_{\mathbf{z} \sim p_{\mathbf{z}}(\mathbf{z})}[\log D(G(\mathbf{z}))] \quad (6.6)$$

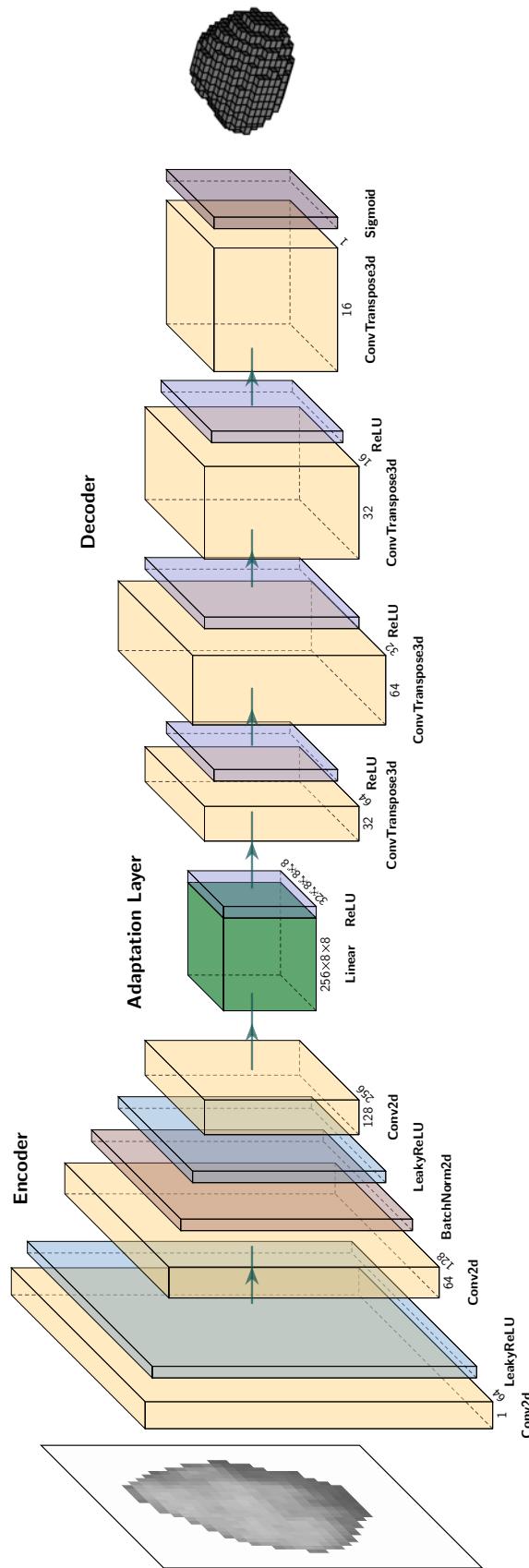


FIGURE 6.2 – Schéma détaillé de l'architecteure du générateur utilisé dans le réseau antagoniste génératif (GAN) pour la génération de structures 3D voxélisées à partir d'images 2D projetées.

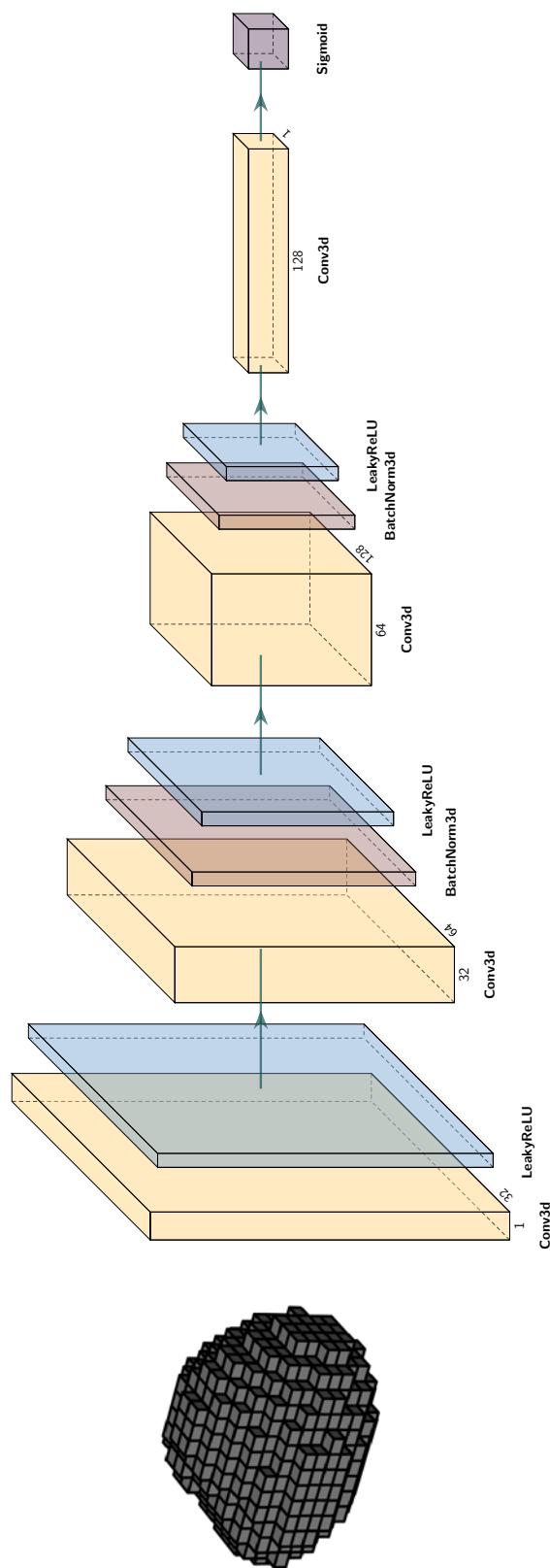


FIGURE 6.3 – Schéma détaillé de l'architecture du discriminateur utilisé dans le réseau antagoniste génératif (GAN) pour évaluer la ressemblance des structures 3D voxélisées générées à partir d'images 2D projetées avec les structures 3D voxélisées issues de l'ensemble d'entraînement.

Paramètre	Valeur / Distribution	Description
n	32	Taille de la grille
n_i	$8 + 17 \cdot \text{Beta}(4, 1)$	Nombre d'itérations
λ	$0.05 + 0.1 \cdot \text{Beta}(4, 1)$	Proportion de voxels à activer
w	1	Poids dans le noyau de convolution K_w
ℓ_A	$3 \cdot \mathcal{U}(0, 1)$	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_A
ℓ_T	$1 + \mathcal{U}(0, 1)$	Longueur de corrélation du champ Gaussien aléatoire G_T
c_A	$8 + 7 \cdot \mathcal{U}(0, 1)$	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_A
c_T	$2 \cdot \mathcal{U}(0, 1)$	Facteur d'intensité de la déformation associé à G_T

TABLE 6.1 – Paramètres et distributions utilisés pour générer l'ensemble de données comptant 40000 éléments avec le modèle VOX-STORM. Le paramètre α n'est pas indiqué car seule la structure voxélisée est utilisée.

Données d'entraînement

Les données d'entraînement sont constituées de 40000 objets 3D voxélisés de taille $32 \times 32 \times 32$ générés par le modèle VOX-STORM, chacun étant associé à une image 2D projetée à niveaux de gris de taille 64×64 . Le Tableau 6.1 indique les paramètres utilisés pour générer cet ensemble de données, ces derniers ayant été choisis afin d'obtenir une relative diversité de caractéristiques morphologiques, et la Fig. 6.4 montre un exemple d'objet 3D de l'ensemble des données, avec sa projection 2D à niveaux de gris associée. En particulier, différentes intensités lumineuses et niveaux de bruitage ont été utilisés afin de dégrader les données et d'éviter le sur-apprentissage.

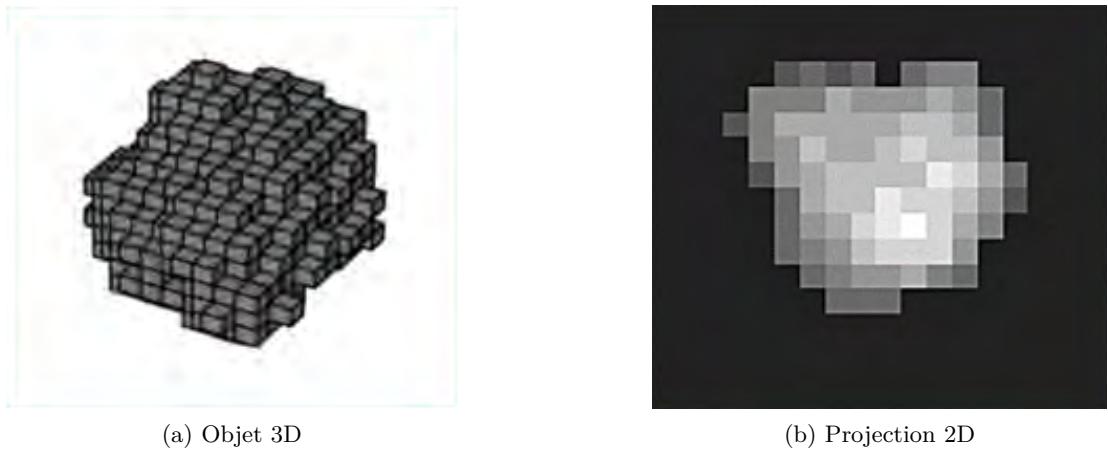


FIGURE 6.4 – Exemple d'objet 3D de taille $32 \times 32 \times 32$ généré par le modèle VOX-STORM avec sa projection 2D de taille 64×64 associée (image à niveaux de gris).

Boucle d'entraînement

La boucle d'entraînement du GAN implique plusieurs étapes et utilise des paramètres spécifiques, comme indiqué dans le Tableau 6.2. Ces étapes sont les suivantes :

- 1. Initialisation des paramètres :** Les paramètres du générateur et du discriminateur sont initialisés. L'algorithme d'optimisation Adam [187] est utilisé avec les paramètres indiqués dans le Tableau 6.2.

2. **Préparation des données :** L'ensemble de données de 40000 éléments est divisé en trois ensembles : 70% pour l'entraînement, 15% pour la validation et 15% pour le test. Chaque mini-batch contient 2048 éléments.
3. **Boucle d'entraînement :** L'entraînement se déroule sur 5000 époques (itérations), et pour chaque époque :
 - **Entraînement du discriminateur :**
 - Générer des échantillons de données fictives à partir des images 2D à niveaux de gris avec le générateur.
 - Calculer les prédictions du discriminateur pour les vraies données ainsi que pour les données générées.
 - Calculer la perte du discriminateur à l'aide de l'équation (6.5) et mettre à jour ses paramètres.
 - **Entraînement du générateur :**
 - Générer des échantillons de données fictives à partir des images 2D.
 - Calculer les prédictions du discriminateur pour ces échantillons.
 - Calculer la perte du générateur (BCE) en comparant les prédictions avec les étiquettes réelles en utilisant l'équation 6.6.
 - Mettre à jour les paramètres du générateur.

En sortie de cette boucle, le générateur est capable de générer des objets 3D à partir d'images 2D à niveaux de gris ressemblants aux données d'entraînement, à savoir des objets générés par le modèle VOX-STORM.

Paramètre	Valeur
Optimiseur (Générateur)	Adam
Taux d'apprentissage (Générateur)	$2 \cdot 10^{-6}$
Betas (Générateur)	(0.5, 0.99)
Optimiseur (Discriminateur)	Adam
Taux d'apprentissage (Discriminateur)	$1 \cdot 10^{-6}$
Betas (Discriminateur)	(0.5, 0.99)
Nombre d'époques	5000
Taille du dataset	40000
Proportion entraînement	70%
Proportion validation	15%
Proportion test	15%
Taille du batch	2048

TABLE 6.2 – Résumé des paramètres d'optimisation et de configuration des données.

6.2.3 Validation

Afin de valider la méthode, ce sont des données indépendantes, et issues de l'ensemble dit de test qui sont utilisées. En effet, ces dernières sont inconnues du générateur car seuls les ensembles d'entraînement et de validation sont utilisés lors de la phase d'apprentissage. La Fig. 6.5 montre quelques exemples d'objets 3D produits par le générateur à partir d'images 2D à niveaux issues de l'ensemble de test. On peut constater que ces objets

générés, sans être totalement identiques aux objets 3D d'origine, présentent malgré tout de fortes ressemblances.

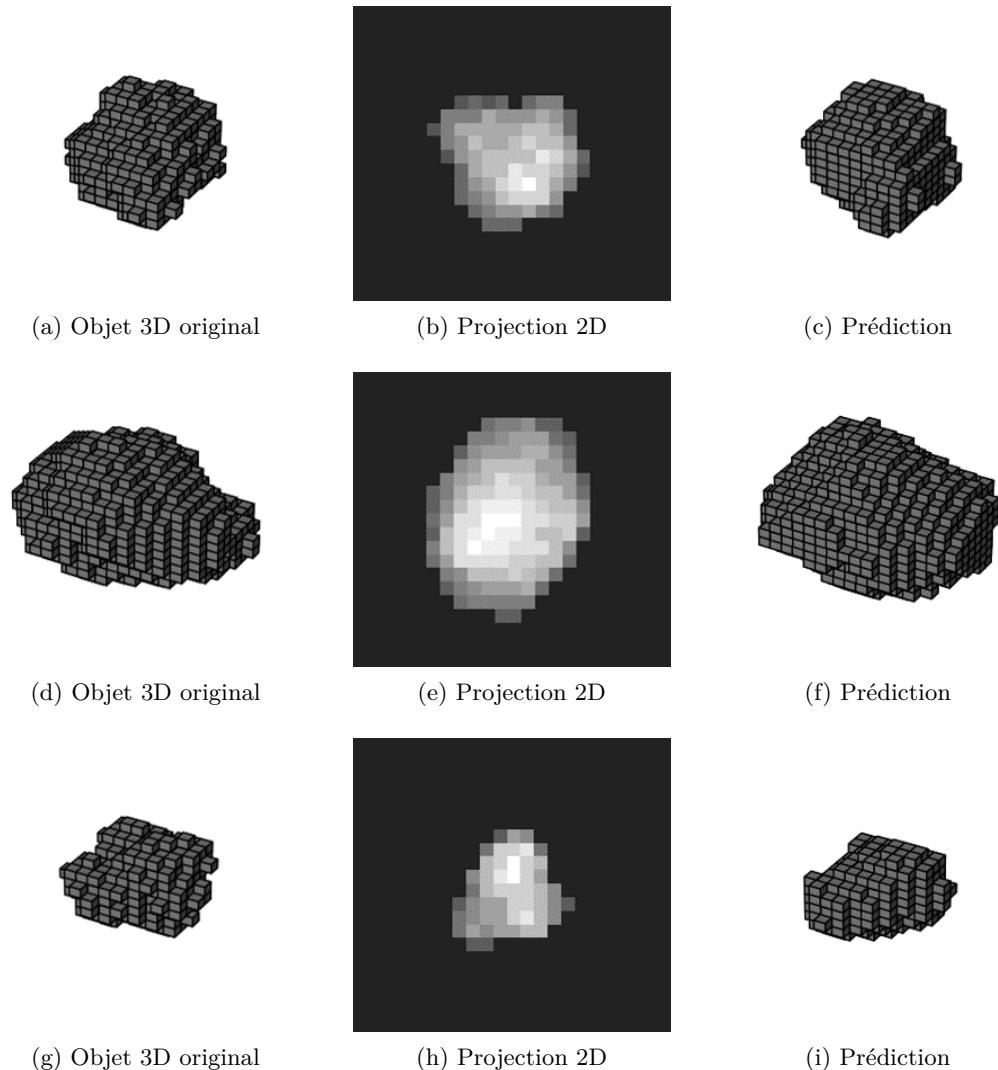


FIGURE 6.5 – Comparaison des objets 3D produits par le générateur à partir d'images 2D issues de l'ensemble de test avec les objets 3D originaux.

En général, les métriques usuelles permettant de valider le processus d'apprentissage d'un modèle d'apprentissage profond sont par exemple l'*accuracy*, la *precision*, ou encore le *recall*, pour ne citer qu'elles. Or, dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons particulièrement à la correspondance des caractéristiques morphologiques 3D de la population d'objets générée par le générateur avec les caractéristiques morphologiques 3D des objets issus de l'ensemble de test.

Par conséquent, ce sont plutôt les distributions de caractéristiques morphologiques 3D qui seront comparées à travers le calcul de leur MAPE ou *Mean Absolute Percentage Error*, qui est une mesure de précision souvent utilisée pour évaluer les prévisions de modèles d'apprentissage profond. Elle est définie comme la moyenne des erreurs absolues en pourcentage des valeurs réelles, et s'exprime par la formule suivante :

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \times 100 \quad (6.7)$$

où :

- n est la taille de l'ensemble de données,
- y_i est la valeur réelle de la i -ème observation,
- \hat{y}_i est la valeur prédictive de la i -ème observation.

La MAPE permet de comparer la précision des prédictions sur différentes échelles de valeurs. Dans le cadre qui nous intéresse, à savoir l'évaluation des prédictions de caractéristiques morphologiques 3D, la MAPE permet de quantifier l'écart moyen entre les caractéristiques de la population de l'ensemble de test et les caractéristiques de la population produite par le générateur.

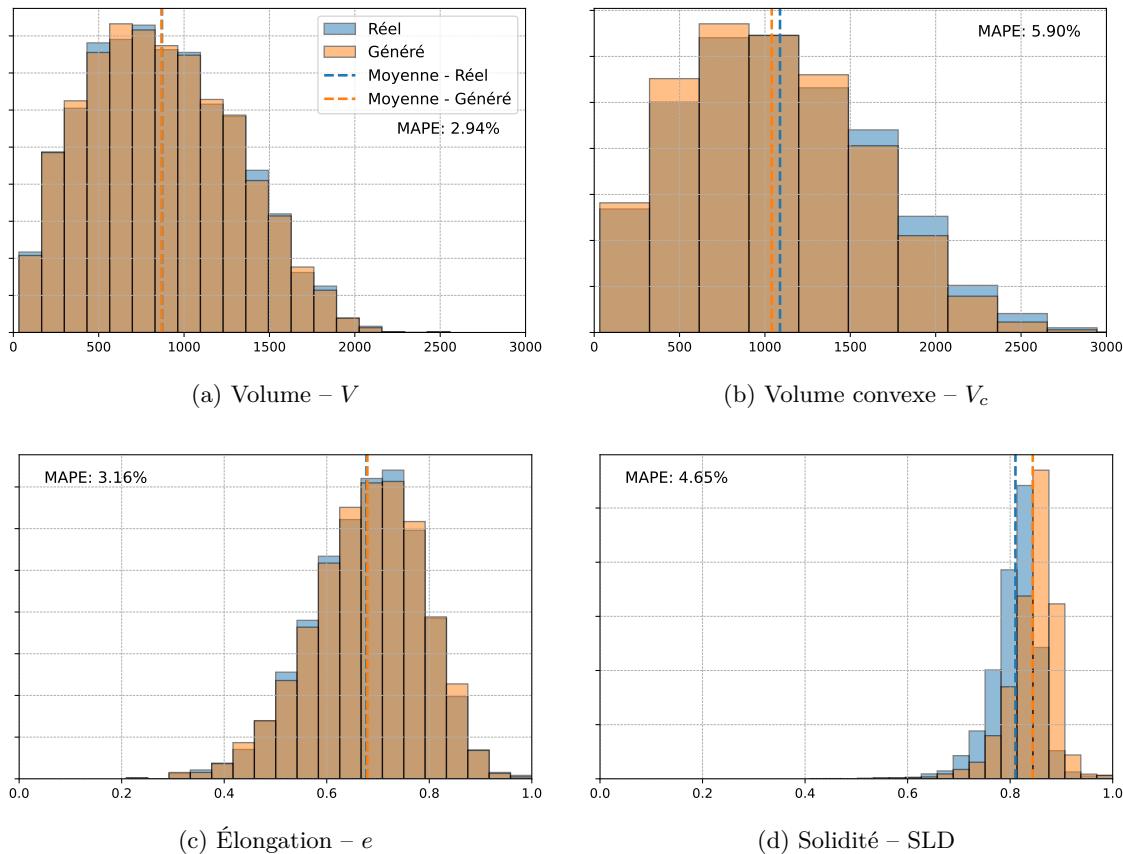


FIGURE 6.6 – Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D entre les objets de l'ensemble de test générés par le modèle VOX-STORM et les objets produits par le générateur à partir des images 2D projetées à niveaux de gris.

La Fig. 6.6 permet de comparer par superposition d'histogrammes les caractéristiques morphologiques 3D des objets de l'ensemble de test générés par le modèle VOX-STORM avec celles des objets produits par le générateur à partir des images 2D à niveaux de gris. Les valeurs moyennes sont indiquées ainsi que les MAPE pour le volume V , le volume convexe V_c , la solidité SLD et l'élongation de l'ellipsoïde équivalent e . Les résultats obtenus sont particulièrement satisfaisants, avec des MAPE relativement faibles (de l'ordre de 5% au maximum), et les distributions de caractéristiques morphologiques 3D sont très similaires. Un écart est clairement visible au niveau du volume convexe, qui est sous-estimé par le générateur, et de la solidité, qui est de fait sur-estimée. Cela s'explique aisément par le fait que nous ne travaillons qu'à partir d'une unique projection, et que nombre de zones concaves peuvent être masquées. De même, l'élongation de l'ellipsoïde équivalent

est également légèrement sur-estimé, pour la même raison. En un sens, le fait que les distributions ne correspondent pas parfaitement est plutôt rassurant, car cela signifie que les bons résultats obtenus ne peuvent pas être attribués à un sur-apprentissage du modèle.

Néanmoins, afin de valider la méthode de manière encore plus indépendante, et étant donné que nous sommes en capacité de générer des ensembles de données à partir de plusieurs modèles différents, la section suivante propose une seconde validation, plus complète, à partir de données synthétiques générées par le modèle SPHERE. Cette démarche permet de supprimer tout biais éventuel, sachant que les modèles d'apprentissage profond ont été entraînés à partir de données générées par le modèle VOX-STORM.

6.3 Caractérisation morphologique 3D à partir d'images in-situ synthétiques

6.3.1 Description de la méthode

En introduction de ce chapitre, les principales motivations derrière le développement du modèle génératif proposé ont été présentées. Il s'agissait en particulier de s'affranchir de certaines limites des approches basées uniquement sur des outils géométriques stochastiques, à savoir la **complexité** de la mise en œuvre de ces méthodes, la **lenteur** de l'étape d'optimisation du processus dans son ensemble (traitement des images, manipulations dans le cas d'images ex-situ, collecte des données), et les problèmes de **transférabilité**, c'est-à-dire le fait que le processus complet de collecte des données et d'ajustement des paramètres du modèle doit être reproduit dès lors qu'une population d'objets différents est étudiée.

La méthode proposée dans ce chapitre permet d'apporter des réponses à chacun de ces points :

- Le générateur prend en entrée une image 2D de taille fixe. Cela signifie qu'il n'est pas nécessaire de calculer directement les caractéristiques morphologiques 2D de chacun des agrégats constituant la population, rendant la méthode très simple d'utilisation.
- Le temps nécessaire à la génération d'un objet 3D à partir d'une image 2D est de l'ordre du centième de seconde, et peut aisément être parallélisé sur un GPU, ce qui rend la méthode particulièrement performante en terme de rapidité d'exécution.
- La base de données d'entraînement se veut suffisamment étendue et variée pour assurer une grande flexibilité du modèle, ce qui lui permet de s'adapter à de nombreux types d'objets très différents. Par ailleurs, la méthode se veut suffisamment robuste pour fonctionner avec des données dégradées, c'est-à-dire bruitées, floutées, et dans des conditions de contraste et de luminosité variables.
- Enfin, contrairement aux méthodes associées à chacun des modèles géométriques stochastiques présentés dans le Chapitre 4 et appliquées à des images ex-situ capturées par un morphogranulomètre au Chapitre 5, la méthode proposée ici ne nécessite d'effectuer aucune hypothèse quant à l'orientation des objets ou à leur morphologie (symétrie, compacité).

Ainsi, afin de conforter les résultats encourageants obtenus précédemment par le modèle proposé sur un ensemble de test, cette section propose une nouvelle validation plus poussée, en utilisant cette fois comme données d'entrée des images synthétiques représentatives des images in-situ. Cette seconde validation a un intérêt pour les raisons suivantes :

- Dans la section précédente, l'entraînement du modèle est validé, avec un certain

succès, à l'aide d'un ensemble de test. Bien que les données de test n'aient jamais été utilisées pour entraîner le modèle, elles ont néanmoins été générées de la même manière, par le même modèle VOX-STORM, et avec le même jeu de paramètres (cf. Tableau 6.1). La nouvelle validation proposée utilise cette fois des données synthétiques générées par un modèle différent, une version modifiée du modèle SPHERE utilisant 4 champs Gaussiens aléatoires, de sorte à supprimer tout biais lié à la façon dont les données de test ou d'entraînement sont générées.

- Jusqu'à présent, les images 2D utilisées pour alimenter le générateur étaient obtenues par simple projection des objets 3D voxélisés, en prenant en compte la luminosité, et en dégradant éventuellement l'image. Néanmoins, dans des conditions réelles, les données d'entrée seront issues de la segmentation d'images in-situ, éventuellement de mauvaise qualité, la segmentation elle-même introduisant un biais qui peut parfois être significatif. Par conséquent, l'idée est de générer des images synthétiques photo-réalistes ressemblant à des images in-situ, et d'utiliser les données issues de la segmentation de ces dernières en entrée du générateur. Cela permettra d'évaluer la robustesse de la méthode dans les conditions d'une application à des images in-situ réelles.
- La méthode proposée pourra être comparée à une approche faisant uniquement appel à des outils de géométries stochastiques. En effet, la méthode proposée au Chapitre 5 pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à l'aide du modèle VOX-STORM ne nécessite aucune hypothèse quant à la morphologie ou à l'orientation des objets. Les résultats des deux approches (géométrie stochastique pure vs. apprentissage profond couplé à la géométrie stochastique) pourront ainsi être comparés, et les avantages de l'une et de l'autre n'en seront que plus nets.

Le processus de validation proposé peut ainsi être décrit en quelques étapes de la manière suivante :

1. Une population \mathcal{A} d'objets synthétiques est générée par le modèle SPHERE amélioré utilisant 4 champs Gaussiens aléatoires.
2. Des rendus 3D de chacun des objets sont générés et des images synthétiques photo-réalistes ressemblant à des images capturées in-situ sont réalisées. En particulier, les images sont floutées, bruitées, la luminosité est variable et les objets peuvent se recouvrir.
3. Les images synthétiques sont segmentées à l'aide de modèles de segmentation par instance basés sur des réseaux de neurones convolutifs.
4. Pour chaque objet détecté, une vignette contenant le masque de segmentation et l'objet segmenté est isolé. Ces vignettes sont redimensionnées afin de correspondre à l'entrée du générateur (64×64 px) et les niveaux de gris sont normalisés.
5. Le générateur entraîné sur des données produites par le modèle VOX-STORM dans la section précédente génère un objet 3D pour chacune des vignettes, ce qui permet de constituer un estimateur $\hat{\mathcal{A}}$ de la population d'origine.
6. Un post-traitement comprenant notamment l'application de l'algorithme *Marching Cubes* (cf. LORENSEN et al. [188]) à une représentation sous forme de nuage de points des objets 3D voxélisés suivi d'un lissage Laplacien (cf. SORKINE et al. [189]) est appliqué à chacun des objets 3D produits par le générateur. Il est destiné à éliminer d'éventuels artefacts et voxels isolés sans pour autant dénaturer la morphologie

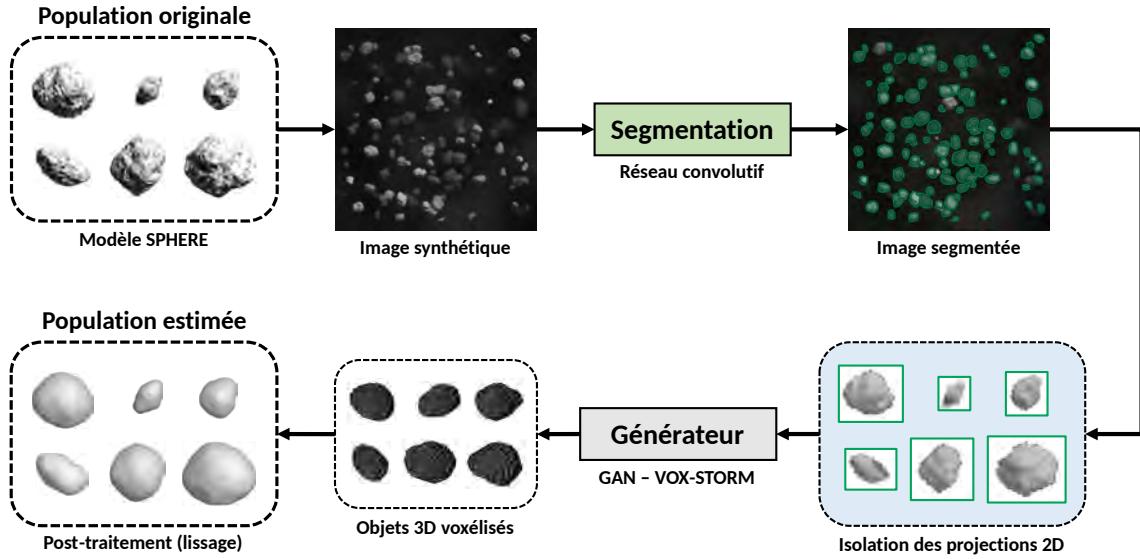


FIGURE 6.7 – Illustration du processus visant à valider la méthode proposée pour estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir d'images in-situ. Une population d'objets synthétiques est générée par le modèle SPHERE, des images photo-réalistes sont créées puis segmentées, et le générateur entraîné à l'aide du modèle VOX-STORM produit une population d'objets 3D à partir des images projetées individuelles issues de la segmentation.

des objets 3D générés, tout en permettant de travailler sur une surface plutôt que sur un objet voxélisé.

7. Les distributions de caractéristiques morphologiques 3D des objets de la population \mathcal{A} peuvent enfin être comparées à celles des objets de la population estimée $\hat{\mathcal{A}}$.

La Fig. 6.7 permet d'illustrer les différentes étapes de ce processus de validation. Par ailleurs, il convient de noter que la façon dont les images synthétiques sont générées et segmentées ne sera pas développée dans cette section, mais sera exposée plus en détail au sein du Chapitre 7 suivant, où les méthodes proposées seront appliquées à des images in-situ réelles capturées à l'aide d'une caméra CCD.

6.3.2 Génération des données

Pour valider la méthode proposée, deux ensembles de données distincts, à savoir deux ensembles de 2000 images chacun, sont générés à l'aide d'une version étendue du modèle SPHERE reposant sur l'utilisation de 4 champs Gaussiens aléatoires. Il est fait en sorte que les images de chacun des deux ensembles ressemblent à des images in-situ capturées par un capteur CCD (voir Chapitre 7 pour plus de détails). Par ailleurs, le fait de générer deux ensembles de données distincts permet également d'utiliser deux populations d'objets aux caractéristiques morphologiques variées. Cela permet ainsi de tester la capacité des modèles à segmenter des images et à générer des objets lorsque ces derniers sont observés dans des conditions de luminosité et de contraste très différentes. En ce qui concerne la morphologie des objets générés pour chacun des ensembles de données, les distributions de taille (volume, diamètre équivalent, aire surfacique) de l'une des populations sont bimodales alors que celles de l'autre sont monomodales, ce qui permet là encore d'évaluer la flexibilité des modèles proposés.

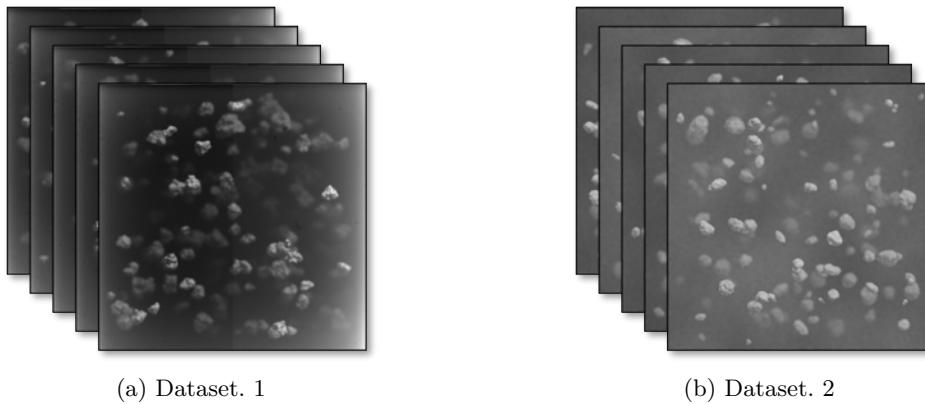


FIGURE 6.8 – Exemple d’images in-situ synthétiques générées à l’aide du modèle SPHERE.

La Fig. 6.8 montre des exemples d’images synthétiques. En moyenne, le *Dataset. 1* compte 80 objets par image, quand le *Dataset. 2* en compte 130, ce qui constitue un total d’environ 160000 agrégats pour le *Dataset. 1* et de 260000 agrégats pour le *Dataset. 2*. Bien que certains objets soient trop peu éclairés pour être visibles ou segmentés correctement, ou encore qu’ils puissent être masqués par d’autres objets plus gros ou au premier plan, le nombre d’individus de chacune des deux populations est suffisant pour obtenir des statistiques représentatives. Par ailleurs, pour chaque objet généré par le modèle SPHERE, l’intégralité de ses caractéristiques morphologiques 3D sont mesurées, ce qui permet de connaître la *vérité terrain* avec précision.

En ce qui concerne la segmentation, un modèle de réseau de neurones convolutif de type MASK R-CNN [147] avec une ossature basée sur l’architecture ResNet101 [190] a été retenue. Il s’agit d’un modèle efficace, ayant déjà fait ses preuves dans le cadre de la segmentation d’agrégats par instance (cf. FREI et al. [1] et MONCHOT et al. [2]), et dont l’entraînement et le mode de fonctionnement seront également détaillés au Chapitre 7 suivant.

Un total de 108312 objets pour le *Dataset. 1* et 182213 objets pour le *Dataset. 2* sont détectés et segmentés, ce qui représente un taux de détection de 68% dans le premier cas, et de 70% dans le second. Cela est par ailleurs plutôt satisfaisant compte tenu de la faible qualité des images et du fait que nombreux d’objets sont pratiquement indiscernables par manque de contraste et de luminosité. Chaque objet est isolé et une image individuelle est générée à partir de sa boîte englobante (*bounding box*). Les dimensions de l’image sont ensuite ajustées, avec un éventuel redimensionnement, afin de correspondre à l’entrée du générateur, c’est-à-dire 64×64 px. La Fig. 6.9 propose quelques exemples d’images segmentées puis recadrées et mises à l’échelle afin de pouvoir alimenter le générateur.

6.3.3 Résultats

Une fois la segmentation automatique des deux ensembles de données réalisée, le générateur pré-entraîné sur des données produites par le modèle VOX-STORM, comme expliqué précédemment, peut effectuer des prédictions, c’est-à-dire qu’il peut générer des objets 3D à partir des vignettes de taille 64×64 px, ces dernières ayant été recadrées, mises à l’échelle et les niveaux de gris ayant été égalisés. La Fig. 6.9 permet de visualiser le processus complet au travers de quelques exemples et de comparer la morphologie de l’objet original généré par le modèle SPHERE avec la prédiction du générateur, après le post-traitement qui correspond à un lissage Laplacien.

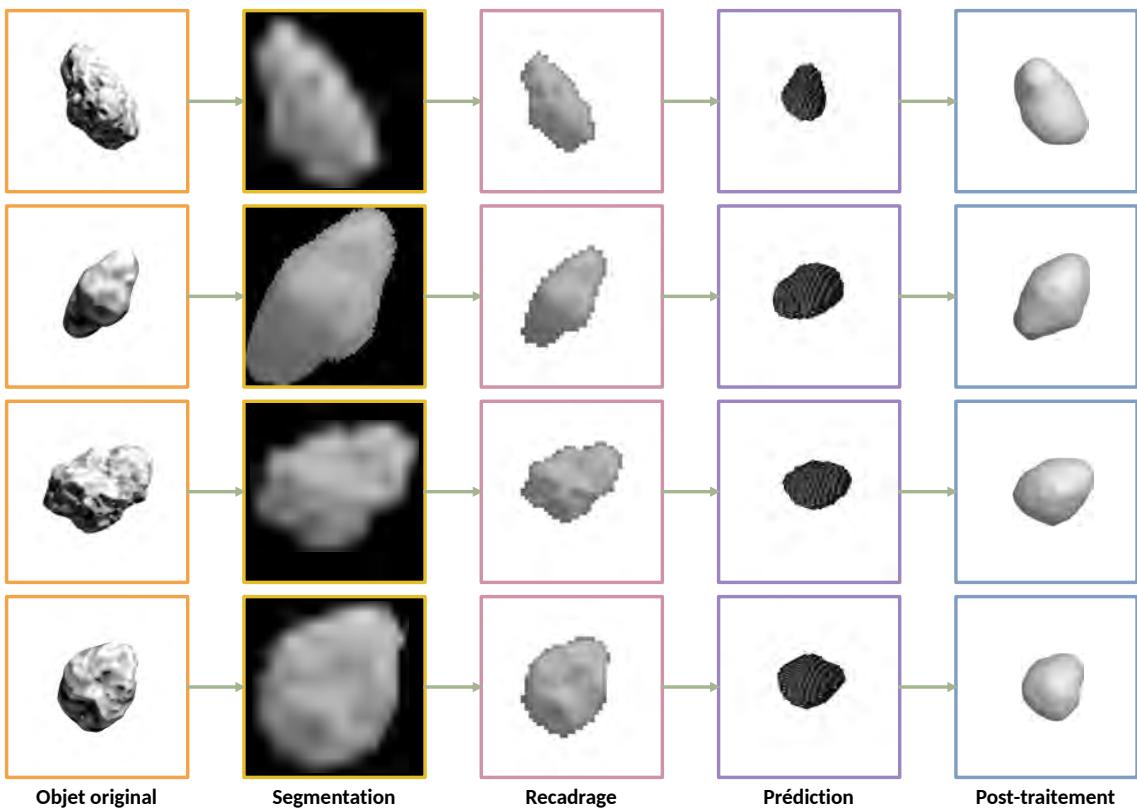


FIGURE 6.9 – Exemple de prédictions du générateur à partir de vignettes extraites par segmentation d’images in-situ synthétiques photo-réalistes.

Deux populations d’objets prédits par le générateur sont ainsi produites pour chacun des deux ensembles de données, ce qui permet d’obtenir deux séries de distributions de caractéristiques morphologiques 3D qu’il est possible de comparer à la *vérité terrain*. Parallèlement à cela, les paramètres du modèle VOX-STORM sont ajustés afin de pouvoir générer des objets correspondant au mieux aux deux ensembles de données considérés, avec la méthode proposée au Chapitre 5, ce qui permet de comparer la méthode proposée basée sur un modèle d’apprentissage profond génératif et une approche utilisant uniquement des outils de géométrie stochastique.

Les Fig. 6.10 et Fig. 6.11 permettent de comparer les performances de ces deux méthodes en affichant les distributions de caractéristiques morphologiques 3D, à savoir la volume V , le diamètre de la sphère équivalente ESD, l’aire surfacique S , l’élargissement de l’ellipsoïde équivalent e , la solidité SLD et la sphéricité Φ_S , ainsi que les histogrammes correspondants aux caractéristiques morphologiques des objets générés par le modèle SPHERE, c’est-à-dire à la *vérité terrain*.

Afin de pouvoir quantifier les performances de chacune des méthodes, les Distances de Variation Totale sont calculées et reportées dans le Tableau. 6.3. Il apparaît ainsi clairement que l’un des objectifs principaux recherché, à savoir le fait de développer une méthode permettant d’obtenir des performances comparables aux approches géométriques stochastiques, sans avoir à passer par un processus complexe de collecte des données, d’ajustement des paramètres au travers d’un processus d’optimisation, le tout de manière rapide, flexible et efficace, est atteint. En effet, les valeurs de TVD obtenues grâce aux deux méthodes sont très proches, la principale différence étant visible dans le cas de l’élargissement, et de la sphéricité, dans une moindre mesure.

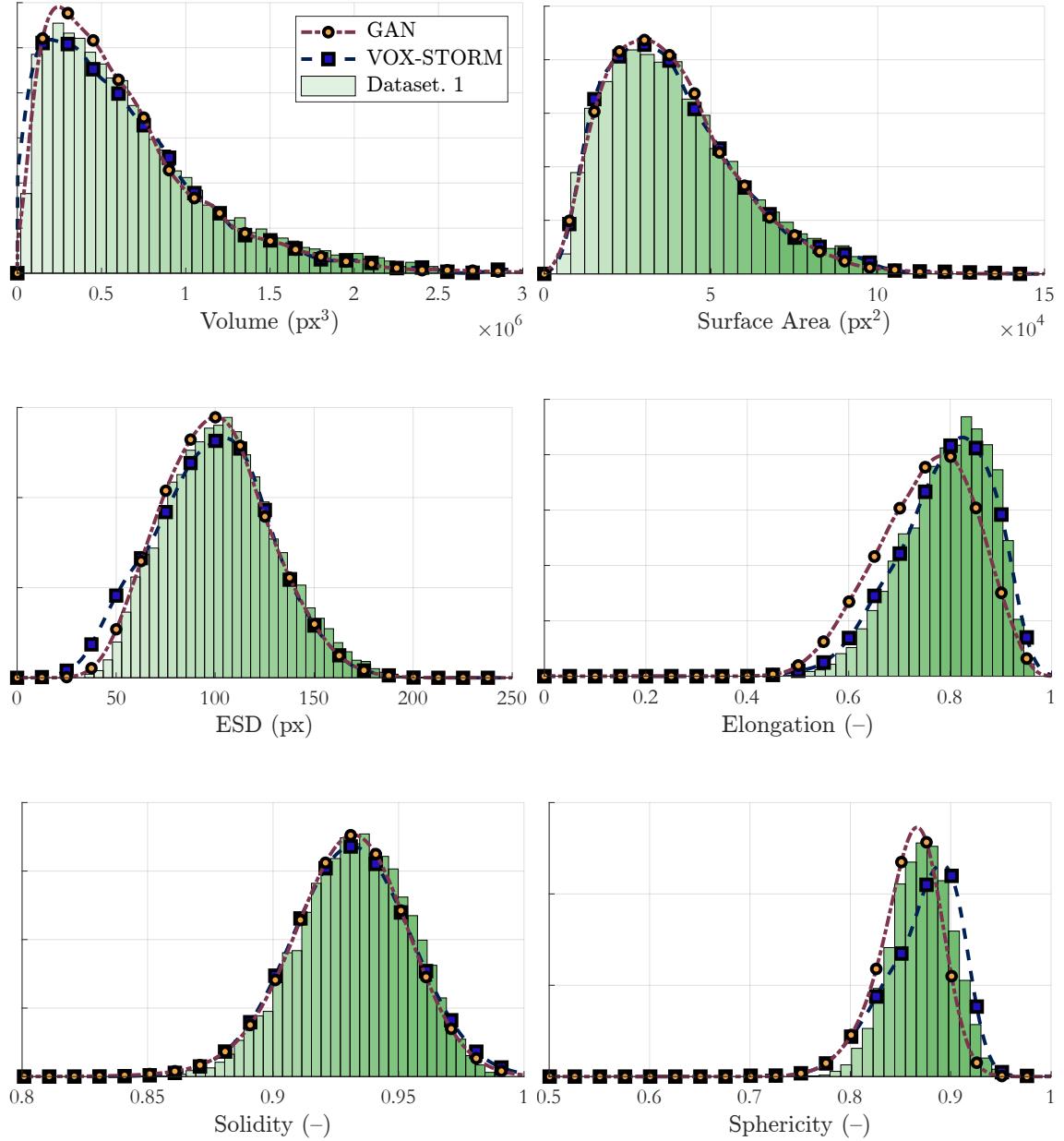


FIGURE 6.10 – Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D prédictes par le générateur (GAN), ainsi que par le modèle VOX-STORM, avec la *vérité terrain* correspondant aux objets synthétiques du *Dataset. 1* générés par le modèle SPHERE. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.

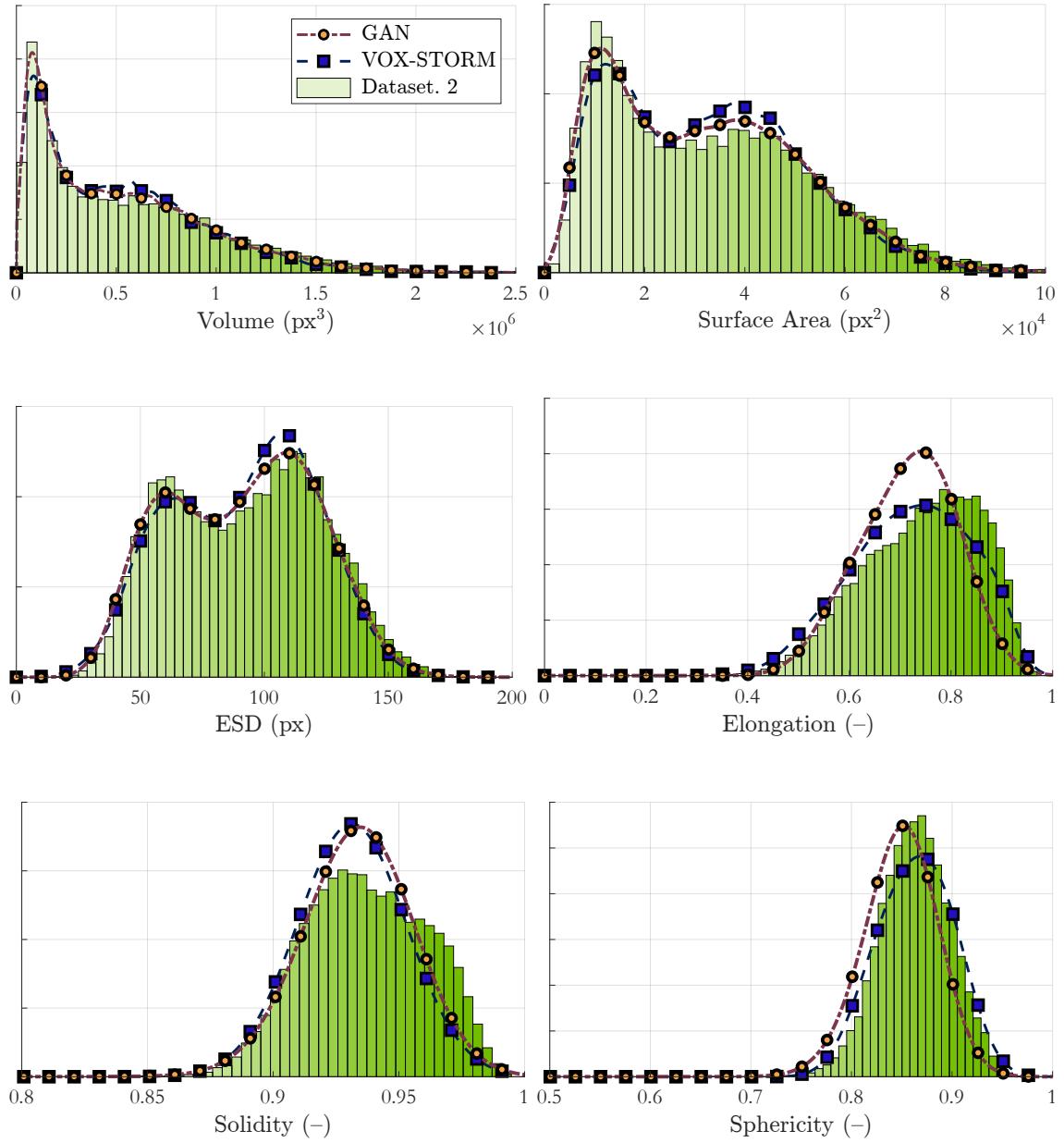


FIGURE 6.11 – Comparaison des distributions de caractéristiques morphologiques 3D prédictes par le générateur (GAN), ainsi que par le modèle VOX-STORM, avec la vérité terrain correspondant aux objets synthétiques du *Dataset. 2* générés par le modèle SPHERE. Les distributions et l'histogramme sont exprimés en termes de fréquence des effectifs et sont normalisés.

Modèle	TVD – Dataset. 1						TVD – Dataset. 2					
	V	S	ESD	e	SLD	Φ_S	V	S	ESD	e	SLD	Φ_S
GAN	0.05	0.04	0.05	0.17	0.13	0.15	0.03	0.04	0.03	0.18	0.18	0.17
VOX-ST.	0.05	0.03	0.06	0.03	0.11	0.11	0.05	0.03	0.05	0.09	0.19	0.07

TABLE 6.3 – Distance de variation totale entre les distributions de caractéristiques morphologiques 3D prédites par les modèles GAN et VOX-STORM obtenues en analysant les images des deux ensembles de données et les *vérités terrain* correspondant aux distributions de caractéristiques morphologiques 3D des objets générés par le modèle SPHERE. Les résultats sont arrondis au centième et les valeurs les plus faibles sont en gras.

6.3.4 Discussion

Les résultats obtenus par cette validation croisée de deux approches différentes sont plutôt satisfaisants, en ce sens que tant pour l'approche basée sur un modèle d'apprentissage profond que sur celle utilisant un modèle géométrique stochastique, les distributions de taille et de forme sont plutôt très bien estimées, avec des Distances de Variation Totale relativement faibles. Les performances légèrement moins bonnes en ce qui concerne les caractéristiques d'angularité et/ou de texture telles que la sphéricité ou la solidité peuvent avoir plusieurs origines, tout comme le fait que l'élongation soit bien mieux approximée par le modèle VOX-STORM que par le GAN.

- **Qualité de l'entrée :** Chacune des approches se base sur des données issues de la segmentation des images synthétiques. Hors, afin de correspondre aux images *in situ* réelles, ces dernières sont fortement dégradées. Cela peut entraîner des erreurs de segmentation qui auront de fait un impact sur les prédictions du générateur ainsi que sur les mesures de caractéristiques morphologiques 2D dont la précision est nécessaire à l'ajustement des paramètres du modèle VOX-STORM. Cet aspect sera davantage étudié au Chapitre 7 suivant.
- **Faible résolution :** Bien que les images générées aient une résolution de 2048×2048 px, là encore pour correspondre aux images réelles, il n'en demeure pas moins que les agrégats eux-mêmes sont de très petite taille, ce qui ne permet pas de capturer fidèlement leur contour ainsi que leur texture. Par conséquent, il devient dès lors très difficile d'estimer avec précision certaines caractéristiques telles que la solidité ou encore la sphéricité. Par ailleurs, la résolution des images en entrée du générateur (64×64), ainsi qu'en sortie ($32 \times 32 \times 32$) est extrêmement faible (bien que dans la norme de l'état de l'art), et ne permet donc pas non plus de générer des objets d'angularité ou de texture particulièrement complexe.
- **Projection unique :** Il convient de garder à l'esprit que l'on ne travaille qu'avec des projections unique de chaque objet, ce qui ne permet pas d'apprécier la géométrie de ces derniers dans leur globalité. Cela est particulièrement important lorsque l'on considère la solidité, des zones de concavité pouvant être cachées, et surtout l'élongation. C'est pour cette dernière caractéristique que le modèle VOX-STORM se montre bien plus performant que le GAN. Néanmoins, le fait que l'on n'a accès qu'à une unique projection ne peut à lui seul expliquer cette différence.
- **Vision globale vs. locale :** Dans le cas du modèle VOX-STORM, les paramètres du modèle sont ajustés en utilisant la connaissance complète des distributions de caractéristiques morphologiques 2D obtenues par segmentation des images. En revanche, en ce qui concerne le GAN, le générateur produit des objets 3D à partir

d'une seule image à niveaux de gris, de manière complètement indépendante. En d'autres termes, le générateur du GAN n'a qu'une vision très limitée du problème, car il ne tient pas compte des caractéristiques 2D des autres objets présents dans la population à simuler, à l'inverse de l'approche géométrique stochastique qui permet d'utiliser l'intégralité des données disponibles lors de la génération d'une population représentative, notamment les distributions jointes des caractéristiques morphologiques 2D. Ceci pourrait expliquer pourquoi le modèle VOX-STORM est plus à-même d'estimer la distribution d'elongation avec précision que le GAN.

En revanche, en ce qui concerne la simplicité de mise en œuvre et la rapidité d'exécution, l'approche utilisant un GAN est imbattable, les résultats étant obtenus en quelques secondes sur une machine dotée d'un GPU Nvidia GeForce RTX 3090 avec 24Go de mémoire GDDR6X, quand l'approche géométrique stochastique nécessite 2h à 3h d'optimisation pour chacun des ensembles de données. Par ailleurs, le processus utilisant le générateur du GAN peut être complètement automatisé, en intégrant l'étape de segmentation, et utilisé tel quel dans n'importe quelle situation, pour n'importe quel ensemble de données.

6.4 Conclusion générale

L'objectif de ce chapitre était la mise en place d'un outil permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats à partir d'images in-situ, rapide d'exécution, simple à mettre en œuvre, sans avoir besoin d'émettre d'hypothèses sur l'orientation ou la géométrie des objets, et qui soit suffisamment robuste pour conserver de bonnes performances, même dans le cas où les images considérées sont fortement dégradées. À la vue des résultats obtenus et présentés dans la section 6.3.3, il apparaît assez clairement que cet objectif semble avoir été atteint. En effet, l'architecture de GAN proposée pour entraîner un modèle de générateur sur des données produites par le modèle VOX-STORM a permis de créer un outil capable d'estimer rapidement les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'objets à partir d'images in-situ. La validation croisée à partir d'images synthétiques générées par le modèle SPHERE a montré que cet outil atteint une précision comparable à celle d'une approche purement géométrique stochastique basée sur l'optimisation des paramètres du modèle VOX-STORM, mais sans toute la complexité de mise en œuvre et de manière complètement automatisée.

Néanmoins, il convient de revenir sur deux points importants :

1. Si l'utilisation du générateur d'un GAN pour estimer les caractéristiques 3D d'une population d'agrégats est extrêmement rapide, c'est parce qu'en amont, un long et coûteux processus d'entraînement a eu lieu. Bien que cela ne constitue pas un frein à l'adoption de la méthode, car le modèle n'a besoin d'être entraîné qu'une seule fois, ce fait mérite d'être souligné
2. Pour entraîner correctement le générateur (ainsi que les modèles de segmentation comme nous le verrons par la suite), il est nécessaire de disposer de grandes bases de données suffisamment variées. En d'autres termes, l'entraînement du GAN n'aurait pas été possible sans le développement préalable de modèles géométriques stochastiques flexibles et performants comme SPHERE ou VOX-STORM.

Ainsi, l'approche basée sur le développement d'un GAN ne vient pas remplacer l'approche géométrique stochastique mais la complète. Il s'agit plus d'une façon de s'affranchir du processus d'optimisation au prix d'une légère perte en terme de précision mais pour

un gain de rapidité et de transférabilité considérable. Par conséquent, le chapitre suivant propose d'appliquer ce processus validé dans la section précédente à des images réelles d'agrégats de latex capturées in-situ par un capteur CCD dans le cadre d'une application réelle.

Chapitre 7

Application à des images in-situ d'agrégats de latex

Contenu du chapitre

7.1	Introduction	139
7.1.1	Contenu du chapitre	139
7.1.2	Problématique générale	140
7.2	Collecte des données expérimentales	140
7.2.1	Description du protocole expérimental	140
7.2.2	Acquisition des images in-situ	141
7.3	Segmentation automatique	143
7.3.1	Description de la méthode	143
7.3.2	Génération d'images synthétiques similaires aux images réelles	144
7.3.2.1	Construction de la base de données	144
7.3.2.2	Validation de la base de données	145
7.3.3	Comparaison des modèles de segmentation	147
7.3.3.1	Sélection des modèles	147
7.3.3.2	Entraînement des modèles	148
7.3.3.3	Comparaison des performances	149
7.3.4	Application aux images in-situ	153
7.4	Caractérisation morphologique d'une population d'agrégats de latex	154
7.4.1	Description de la méthode	154
7.4.2	Résultats	155
7.5	Conclusion générale	157

7.1 Introduction

7.1.1 Contenu du chapitre

Dans ce chapitre, la méthode proposée précédemment à la section 6.3 est appliquée à des images réelles d'agrégats de nanoparticules de latex capturées in-situ. Dans un pre-

mier temps, la méthode de collecte des données expérimentales est présentée, ainsi que la manière de générer des images synthétiques destinées à entraîner des modèles de segmentation automatique, dont les performances seront comparées. Le processus complet visant à estimer les caractéristiques morphologiques 3D des agrégats de nanoparticules de latex est ensuite appliqué et les résultats obtenus sont discutés.

7.1.2 Problématique générale

L'objectif de ce chapitre est de montrer dans quelle mesure les outils développés précédemment permettent de répondre à la problématique générale de cette thèse, à savoir la caractérisation morphologique 3D d'agrégats de nanoparticules de latex à partir d'images 2D, en particulier dans un contexte industriel. En effet, bien que de premiers résultats aient été obtenus au Chapitre 5 en travaillant sur des images réelles capturées par un morphogranulomètre, de nombreuses limitations étaient apparues, notamment du fait qu'il s'agissait d'images ex-situ, de très bonne qualité, ce qui permettait d'émettre de nombreuses hypothèses quant à l'orientation des agrégats, et simplifiait grandement le problème.

Ces conditions particulières ne sont cependant pas représentatives des conditions que l'on peut retrouver dans un contexte industriel. L'utilisation d'images in-situ, par exemple, peut être nécessaire afin d'éviter d'utiliser des techniques d'analyse invasives et/ou destructives et qui peuvent encore entraîner des déformations des agrégats, ou tout simplement parce qu'aucun autre moyen de capturer des images n'est envisageable. Par ailleurs, le fait d'effectuer des mesures in-situ permet de connaître l'évolution des caractéristiques des objets tout au long du processus d'agrégation, et à terme, de contrôler ce dernier en temps réel, si les techniques rapides basées sur des modèles d'apprentissage profond présentées au chapitre précédent peuvent être mises en œuvre.

Ainsi, ce chapitre propose d'appliquer les outils développés précédemment à des images d'agrégats de nanoparticules de latex capturées in-situ. Après avoir présenté les conditions expérimentales dans lesquelles ces images ont été prises, une section sera dédiée à la méthodologie mise en œuvre pour la segmentation. En particulier, différents modèles de segmentation automatique seront brièvement comparés et la façon dont ces derniers ont été entraînés sera présentée. La dernière section présente les résultats obtenus par les différentes méthodes proposées (modèle d'apprentissage profond ou géométrique stochastique) appliquées aux images in-situ, afin de déterminer leur adéquation à un contexte industriel.

7.2 Collecte des données expérimentales

7.2.1 Description du protocole expérimental

Des expériences d'agrégation de latex PMMA, fournies par le groupe industriel ARKEMA France, ont été réalisées dans une cuve agitée (cf. Fig. 5.5).

Caractéristiques de la cuve

- Une cuve cylindrique de 20 L avec un fond torisphérique, positionnée dans une cuve externe de forme cubique pour limiter les effets de courbure.
- Diamètre intérieur de 27 cm et hauteur totale de 37 cm, comprenant une partie cylindrique de 30.5 cm et une partie torisphérique de 6.5 cm.

Système d'agitation

- Une turbine courbe à trois pales de type "*retreat blade impeller*", couramment utilisée dans les industries pharmaceutiques, assure l'agitation du fluide. Le diamètre de l'agitateur est de 16.1 cm.
- L'hélice est fixée à un arbre de 1.5 cm de diamètre placé au centre de la cuve et positionnée à 2.5 cm du fond.
- Un moteur digital haute performance Ika EUROSTAR 400, avec régulation commandée par microprocesseur, maintient une vitesse constante entre 0 et 2000 tr/min, même si la viscosité du fluide change.
- Une contre-pâle à deux doigts, orientée vers le centre de la cuve, est positionnée à 4.5 cm du fond et à 2 cm de la paroi pour améliorer le mélange en conditions turbulentées.

Préparation

- Dans un premier temps, la suspension de latex diluée avec de l'eau déminéralisée est introduite dans la cuve.
- Dans un second temps, une solution saline est injectée à l'aide d'une pompe péristaltique à débit variable pour déstabiliser les particules et favoriser l'agrégation.

Une illustration de la cuve agitée utilisée est notamment visible à la Fig. 7.1(a). Le placement d'une caméra devant la cuve permet de réaliser des images in-situ et par conséquent, de connaître les caractéristiques 2D des agrégats tout au long du processus d'agrégation. Ainsi les agrégats ne subissent aucune déformation (pas de prélèvement) et n'ont a priori pas d'orientation préférentielle.

7.2.2 Acquisition des images in-situ

Pour capturer des images in-situ durant le processus d'agrégation du latex PMMA, un dispositif expérimental spécifique est mis en place. Une caméra est placée devant la cuve agitée, elle-même éclairée par une LED, et une mire est utilisée pour calibrer les images. La Fig. 7.1 propose plusieurs vues de ce dispositif expérimental et des différents éléments qui la composent, et dont les caractéristiques sont détaillées ci-dessous.

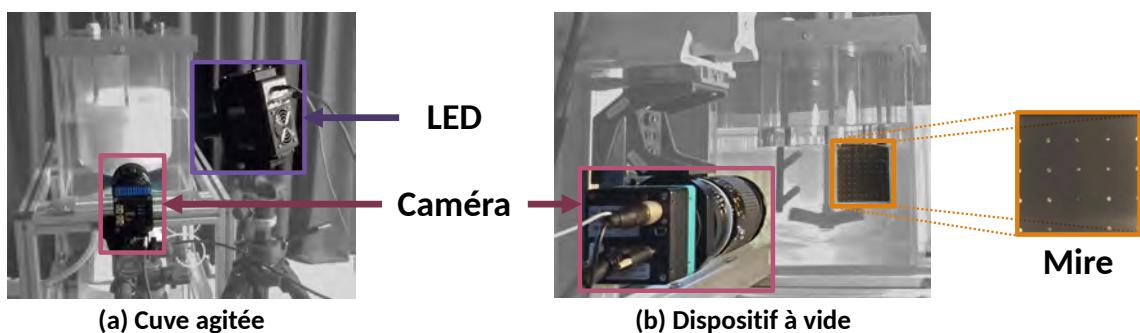


FIGURE 7.1 – Illustration du dispositif expérimental mis en place pour capturer des images in-situ du phénomène d'agrégation du latex PMMA, ainsi que des différents éléments le composant.

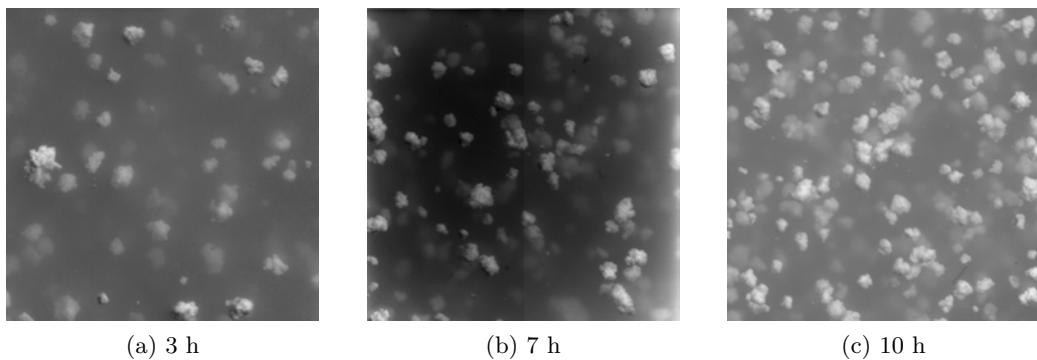


FIGURE 7.2 – Exemples d’images in-situ capturées durant le processus d’agrégation après 3 heures (a), après 7 heures (b) et après 10 heures (c).

Position du plan d’acquisition

- Le plan d’acquisition des images est situé à 5.5 cm de la paroi de la cuve, centré sur l’arbre d’agitation, et à environ 9 cm du fond de la cuve.
- Les images sont prises dans un plan vertical durant les expériences.

Éclairage

- Le plan d’acquisition est éclairé par une lumière bleue de 462 nm émise par une source LED à intensité continue.
- La source LED est fournie par HARDsoft Mikroprocessor Systems, Pologne, et autorisée par DLR, Allemagne.

Caméra et résolution

- Les images ont été acquises à l’aide d’une caméra pco.panda26DS sCMOS équipée d’un capteur CMOS de 5120×5120 pixels.
- La surface couverte par les images est de $4,6 \times 4,6 \text{ cm}^2$ avec une résolution de $8.9 \mu\text{m}/\text{pixel}$.

Calibration des images

- Une mire bidimensionnelle, placée dans le plan focal, permet de calibrer les images pour convertir les pixels de la caméra en unités métriques.
- La mire est composée de 16 carrés mesurant chacun 0.25 cm. La calibration consiste à prendre une image de la mire et à spécifier la distance entre deux points diagonaux.

Des séries de 2000 images sont capturées à différents temps du processus d’agrégation du latex PMMA. La Fig. 7.2 propose des exemples d’images pour chacune de ces séries. En particulier, la qualité est bien moindre que pour les images du morphogranulomètre utilisées au Chapitre 5, avec un contour des objets moins bien défini, et une absence d’orientation des objets dans une direction privilégiée. Enfin, les séries d’images sont acquises assez rapidement si bien qu’on peut faire l’hypothèse que sur une même série d’images, les caractéristiques morphologiques des agrégats n’évoluent pas.

7.3 Segmentation automatique

7.3.1 Description de la méthode

Que ce soit pour l'utilisation de méthodes géométriques stochastiques dont le principe est d'optimiser une fonction de coût pour d'ajuster les paramètres d'un modèle géométrique stochastique ou pour alimenter un modèle d'apprentissage profond permettant de générer des objets 3D à partir d'images 2D, il est nécessaire d'être en mesure de pouvoir segmenter les images in-situ.

Plusieurs techniques de segmentation automatiques ont été envisagées.

- Méthodes de segmentation directes telles que le seuillage local ou adaptatif (BRADLEY et al. [145]), combinées avec des descripteurs de texture (CHEN et al. [191]).
- Segmentation sémantique (ou labels) par apprentissage profond (RÜHLE et al. [56] et RONNEBERGER et al. [146]).
- Segmentation par instance par apprentissage profond (MONCHOT et al. [2] et HU et al. [192]).

Néanmoins, la décision de se concentrer sur les modèles de segmentation par instance plutôt que par labels a été prise, et ce, pour plusieurs raisons.

- Les images capturées par le dispositif optique présentent des variations significatives de luminosité, de contraste et de balance des gris, ce qui rend les méthodes de seuillage directes inadéquates en raison de leur difficulté à s'adapter de manière automatique à des images parfois très différentes.
- En raison de la forte densité d'objets, il existe une quantité importante de chevauchements, ce qui rend les méthodes de segmentation directes et sémantiques inadaptées. En particulier, bien que ces dernières permettent de reconnaître des motifs et des textures, les distances variables des objets par rapport au plan focal introduisent différents degrés de flou d'objectif, ce qui complique leur utilisation.
- Enfin, les modèles d'apprentissage profond présentent l'avantage de pouvoir être aisément utilisés pour des applications temps-réel, ce qui constitue un réel atout si l'on considère un déploiement dans un cadre industriel.

Par conséquent, les modèles de segmentation par instance ont été retenus dans le cadre de cette thèse. Par ailleurs, et compte tenu de son importance dans le domaine de la segmentation d'image d'agrégats ou d'agglomérats (cf. THÉODON et al. [15]), l'architecture Mask R-CNN (HE et al. [147, 193]) a été sélectionnée, et comparée à deux autres architectures de modèles de segmentation par instance à la pointe de l'état de l'art en 2023 : YOLOv8 (JOCHER et al. [194]), connu pour sa rapidité d'exécution et sa capacité à détecter des objets avec précision, et SAM (KIRILLOV et al. [148]), un modèle multimodal polyvalent développé par Meta AI.

Néanmoins, contrairement aux méthodes de seuillage directes, les modèles d'apprentissage profond nécessitent de passer par une phase d'apprentissage, et donc la constitution d'un ensemble d'entraînement. La méthode proposée est donc la suivante :

1. Constituer un ensemble de données (images synthétiques) suffisamment important à l'aide du modèle SPHERE. Il s'agit en l'occurrence des ensembles d'images présentés par la Fig. 6.8 et utilisés pour tester la performance du générateur du GAN présenté au Chapitre 6, Section 6.3.
2. Entraîner les différentes architectures de modèles proposées à partir de ces images synthétiques.

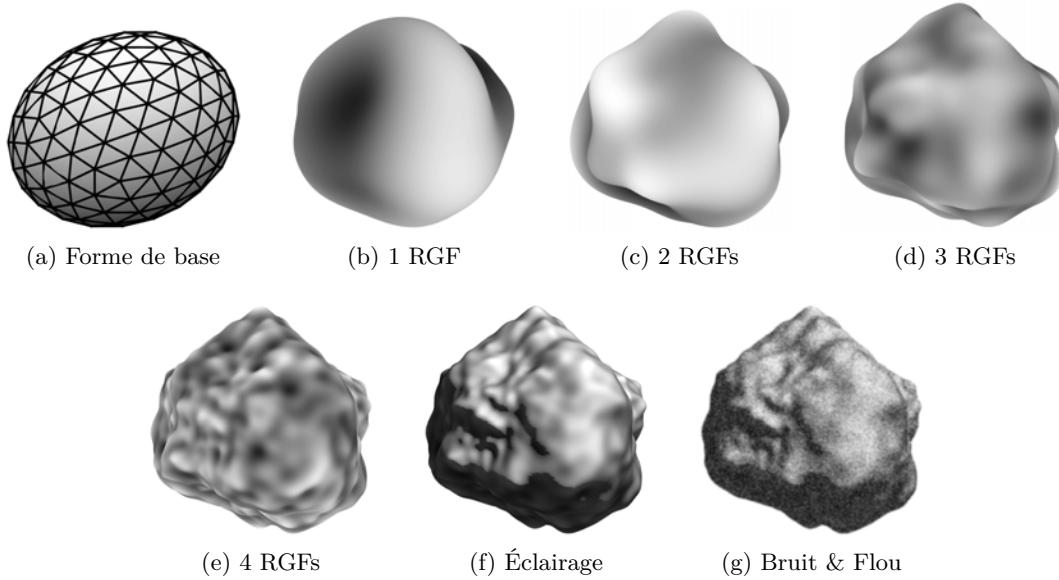


FIGURE 7.3 – Génération séquentielle d’un agrégat à l’aide d’une version étendue du modèle SPHERE : De la forme de base (a) au rendu final (g) avec des déformations progressives de 1 à 4 champs Gaussiens aléatoires (b-e), amélioré par des effets de lumière et d’ombre (f), en finissant par des effets de bruit et de flou (g).

3. Comparer les performances de chacune des architectures en utilisant les métriques usuelles (*accuracy, precision, IoU* etc...) ainsi que la capacité des modèles à retrouver les distributions de caractéristiques morphologiques 2D des agrégats présents sur les images.
4. Sélectionner le modèle le plus performant pour segmenter les images réelles.

Dans la suite de cette section, la génération des données d’entraînement, le processus d’entraînement des modèles de segmentation et la comparaison des performances des modèles sont présentés.

7.3.2 Génération d’images synthétiques similaires aux images réelles

7.3.2.1 Construction de la base de données

Une version étendue du modèle SPHERE est utilisée pour générer des images synthétiques qui ressemblent aux images réelles dont des exemples sont visibles Fig. 7.2. Dans sa version de base, le modèle SPHERE fait appel à deux champs Gaussiens aléatoires 3D (ou RGF pour *Random Gaussian Fields*) pour déformer le maillage d’un ellipsoïde. Afin d’obtenir des objets au rendu encore plus réalistes, le temps de génération des objets n’étant pas une contrainte dans le cadre de la constitution d’une base de données d’entraînement, ce sont quatre champs gaussiens aléatoires qui sont ici utilisés. La Fig. 7.3 permet d’illustrer le processus de création d’un agrégat qui sera ensuite utilisé pour composer une image synthétique.

Des images similaires à celles de la Fig. 7.2 sont ensuite générées comme suit :

1. Pour chaque image, un nombre n d’agrégats est généré à l’aide de la version à quatre RGFs du modèle SPHERE, où n est déterminé par une loi de Poisson de paramètre λ .

2. Les n agrégats sont distribués spatialement de manière uniforme dans l'image finale, avec des applications successives de flou Gaussien et une luminosité croissante pour simuler un effet de profondeur de champ. Le générateur d'images est ainsi un modèle Booléen [195].
3. Des techniques de post-traitement telles que l'application de bruit Gaussien et de flou Gaussien supplémentaires sont utilisées pour obtenir un rendu plus réaliste.

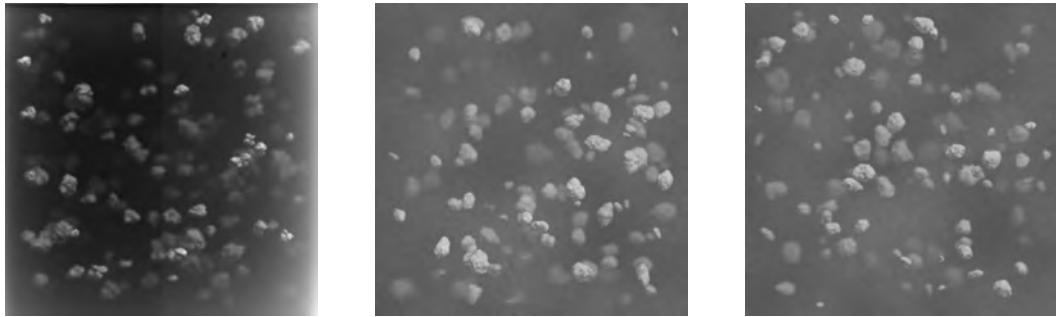


FIGURE 7.4 – Exemples d'images synthétiques générées à l'aide de la version du modèle SPHERE utilisant quatre champs Gaussiens aléatoires.

Des exemples d'images synthétiques avec différentes conditions d'éclairage et concentrations d'agrégats sont présentés par la Fig. 7.4. L'ensemble d'entraînement est constitué de deux ensembles de 2000 images chacun, le Dataset. 1 avec $\lambda = 80$ et le Dataset. 2 avec $\lambda = 130$, le premier, ressemblant aux images in-situ capturées après 7 heures (Fig. 7.2b), utilisant une distribution monomodale pour la taille des agrégats, et le second, ressemblant aux images in-situ capturées après 10 heures (Fig. 7.2c), utilisant une distribution bimodale pour la taille des agrégats. On a donc un ensemble d'environ 460000 agrégats répartis sur un total de 4000 images synthétiques.

7.3.2.2 Validation de la base de données

Pour construire un ensemble de données d'entraînement de qualité, il est essentiel de générer des images synthétiques qui ressemblent fortement aux images in-situ réelles. Cela implique d'ajuster correctement les paramètres du modèle de génération d'agrégats ainsi que les paramètres du moteur de rendu 3D. Il convient alors de définir une métrique pour évaluer la ressemblance des images synthétiques aux images réelles, et s'assurer que les résultats obtenus à partir des données d'entraînement sont transférables aux images réelles.

C'est ainsi la *Fréchet Inception Distance* (FID), une mesure couramment utilisée dans les modèles de type GAN (HEUSEL et al. [196]) pour évaluer la ressemblance entre des images synthétiques et des images réelles, et qui peut généralement être assimilée à un critère de ressemblance en terme de vision humaine, qui est choisie comme métrique. La FID calcule la distance de Fréchet (cf. DOWSON et al. [197]) entre des caractéristiques de haut niveau d'images réelles et d'images générées, extraites par une couche spécifique (la dernière couche) du modèle pré-entraîné Inception-v3 (SZEGEDY et al. [198]). Un score de FID faible indique une similarité plus étroite entre les distributions de caractéristiques des images générées et celles des images réelles, ce qui suggère une grande ressemblance des images synthétiques avec ces dernières.

La FID est calculée de la manière suivante :

1. Toutes les images réelles et générées sont traitées par le modèle Inception-v3 afin d’en extraire les caractéristiques de haut niveau contenues dans la dernière couche.
2. Les moyennes μ et la matrice de covariance Σ des caractéristiques sont calculées pour les deux ensembles d’images.
3. La distance de Fréchet entre les deux ensembles de caractéristiques est calculée à l’aide de leurs moyennes μ_k et de leurs matrices de covariance Σ_k .

La formule explicite de la FID est :

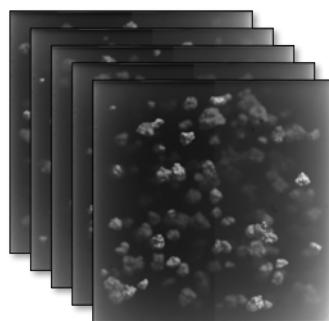
$$\text{FID} = \|\mu_r - \mu_g\|^2 + \text{Tr} \left(\Sigma_r + \Sigma_g - 2\sqrt{\Sigma_r \Sigma_g} \right) \quad (7.1)$$

où μ_r et μ_g sont les vecteurs moyens des caractéristiques des images réelles et générées, respectivement, et Σ_r et Σ_g sont les matrices de covariance des caractéristiques des images réelles et générées, respectivement.

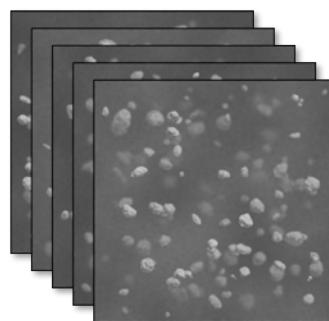
Le tableau 7.1 indique les scores de FID calculés en comparant les Dataset. 1 et Dataset. 2, respectivement, et les images réelles capturées à 7 heures (Fig. 7.2b) et 10 heures (Fig. 7.2c) du processus d’agrégation. Les scores de FID obtenus sont tous deux inférieurs à 100, ce qui est généralement considéré comme assez bon. Néanmoins, les scores de FID peuvent grandement varier selon le contexte et le type d’image étudié. Par conséquent, pour évaluer la qualité des scores de FID de manière plus objective, les ensembles d’images réelles à 7 heures et 10 heures ont été divisés aléatoirement en sous-ensembles de 1000 images. La FID moyenne calculée entre ces sous-ensembles de 1000 images réelles à 7 heures et à 10 heures était respectivement de 66.6 et de 26.7, ce qui constitue un point de référence pour une bonne performance de FID pour ces deux ensembles d’images.

TABLE 7.1 – Comparaison des scores de FID entre les ensembles de données synthétiques et les ensembles d’images réelles réalisées à des moments différents.

	Dataset. 1 (7 heures)	Dataset. 2 (10 heures)
FID	83.1	45.3



(a) Dataset. 1, $\lambda_1 = 80$



(b) Dataset. 2, $\lambda_2 = 130$

FIGURE 7.5 – Illustration des deux ensembles de 2000 images synthétiques générés à l’aide du modèle SPHERE.

La Fig. 7.6 illustre l’évolution du score de FID moyen obtenu en comparant des sous-ensembles d’images réelles de taille croissante. Les ensembles d’images réelles contenant 2000 images chacun, on ne peut comparer que des sous-ensembles de 1000 images au plus. Il est possible de constater que l’évolution des scores de FID moyens semble ralentir

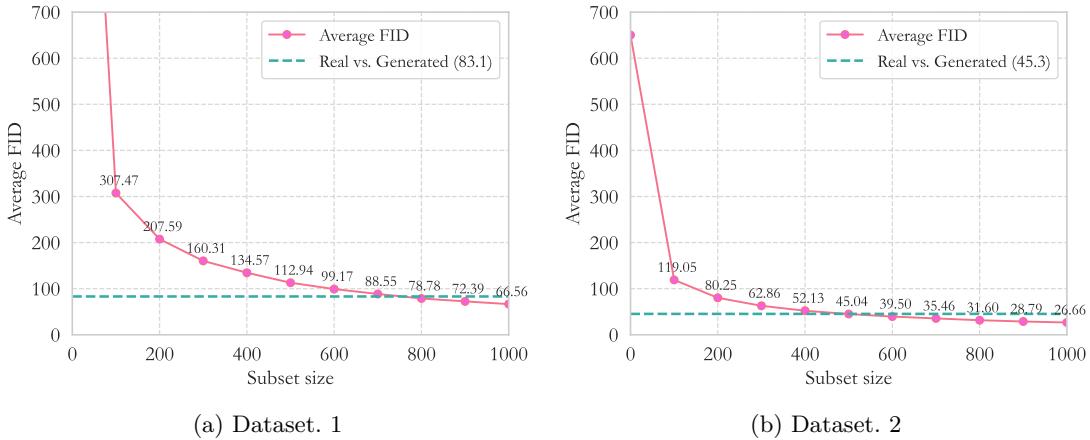


FIGURE 7.6 – Illustration de l'évolution des valeurs moyens de FID en fonction de la taille des sous-ensembles d'images réelles. La ligne pointillée indique le score obtenu en comparant les images réelles avec les images synthétiques.

fortement, ce qui signifie que les scores de FID obtenus en comparant les ensembles de 2000 images réelles avec 2000 images synthétiques indiquent une grande ressemblance entre ces dernières. Ainsi, on dispose d'un ensemble d'entraînement global constitué d'un total de 4000 images synthétiques, les 2000 images du Dataset. 1 et les 2000 autres du Dataset. 2, dont la ressemblance aux images réelles est confirmée par le faible score de FID obtenu.

7.3.3 Comparaison des modèles de segmentation

Contrairement à la segmentation sémantique, qui regroupe les pixels par classe sans faire de distinction entre les objets, la segmentation par instance distingue individuellement les objets de chaque classe. Les modèles de segmentation par instance intègrent la détection d'objets et la segmentation sémantique en trois étapes principales :

- **Détection de régions candidates** : Identification des emplacements potentiels des objets.
- **Délimitation par boîtes englobantes** : Encadrement des objets détectés (Fig. 7.7b).
- **Génération de masques** : Définition précise des contours des objets au niveau du pixel pour une meilleure segmentation (Fig. 7.7c).

Cette approche, illustrée par des modèles tels que Mask R-CNN, permet une analyse détaillée des images en identifiant et en classant chaque objet, tout en fournissant un masque de segmentation individuel pour chacun des objets détectés.

7.3.3.1 Sélection des modèles

Plusieurs modèles de segmentation par instance ont été considérés. La sélection s'est basée sur l'architecture, la performance et l'adaptabilité de chaque modèle aux ensembles d'images à segmenter. Les modèles de type Mask R-CNN ayant déjà été utilisés avec succès afin de segmenter des images d'agrégats (cf. FREI et al. [1]), il a été décidé de les comparer avec deux architectures à la pointe de l'état de l'art, introduites en 2023 : YOLOv8 et SAM. L'architecture YOLO est réputée pour sa grande efficacité pour la détection d'objets, et le modèle SAM permet de pratiquement tout segmenter, et il semblait par conséquent intéressant de mettre ses capacités à l'épreuve.

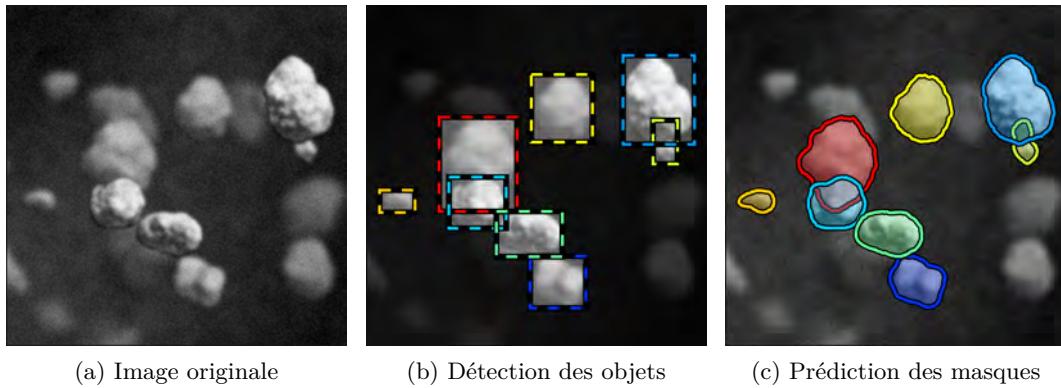


FIGURE 7.7 – Illustration du processus de segmentation par Mask R-CNN.

Pour les modèles Mask R-CNN, les ossatures ResNet50 et ResNet101 ont été retenues car les gains de performance de ResNet152 par rapport à ResNet101 sont relativement faibles en rapport avec la complexité et le temps de calcul supplémentaires (cf. HE et al. [199]). Dans le cas de YOLOv8, les versions *m* et *x* ont été choisies : *m* offre un équilibre entre rapidité d’exécution et précision dans la détection et la segmentation, tandis que *x* est la version la plus sophistiquée (plus de paramètres, temps de calcul plus élevé et meilleure précision au niveau de la détection et la segmentation). SAM a été évalué en utilisant uniquement sa version la plus avancée.

7.3.3.2 Entrainement des modèles

L’ensemble de données d’entraînement se compose de toutes les images des Dataset. 1 et Dataset. 2, avec une résolution réduite de 2048×2048 pixels à 1024×1024 pixels. Cette réduction vise à diminuer le temps d’apprentissage et de prédiction, tout en conservant un niveau de détail élevé. L’ensemble de données de 4000 images est divisé en trois parties : 3000 images (75%) pour l’apprentissage et 500 images (12.5%) chacune pour les ensembles de test et de validation (dans les mêmes proportions pour le Dataset. 1 et le Dataset. 2).

Le processus d’apprentissage est normalisé pour tous les modèles, y compris les deux versions des architectures Mask R-CNN (ResNet50 et ResNet101) et YOLOv8 (*m* et *x*). Les paramètres clés sont résumés dans le tableau 7.2, soulignant que les mêmes paramètres ont bien été appliqués de manière uniforme afin de maintenir la cohérence des conditions d’entraînement de chacun des modèles.

Paramètre	Mask R-CNN	YOLOv8	SAM
Dataset Split	75%/12.5%	75%/12.5%	75%/12.5%
Epochs	50	80	50
Batch Size	32	16	32
Learning Rate	0.001	0.001	0.001

TABLE 7.2 – Résumé des paramètres d’entraînement

Dans le cas de SAM, un modèle multimodal, la spécification des régions d’intérêt est nécessaire. À cette fin, des grilles fines ont été générées et un post-traitement a été utilisé pour supprimer les objets détectés les plus gros, tels que l’arrière-plan ou les superpositions et enchevêtements de nombreux agrégats. L’utilisation d’un modèle basé sur ResNet ou YOLO pour identifier les régions d’intérêt pour SAM avait été envisagée, mais

n'a finalement pas semblé pouvoir apporter un gain de performance très important, en rapport avec l'énorme augmentation de la complexité de mise en œuvre de la méthode. Par ailleurs, chaque modèle, à l'exception de SAM, a été initialisé avec des poids issus d'un pré-entraînement sur l'ensemble de données COCO (Lin et al. [200]) afin de tirer parti de sa grande diversité d'images pour améliorer l'extraction des caractéristiques et garantir des conditions d'entraînement équitables pour une comparaison objective.

7.3.3.3 Comparaison des performances

Pour évaluer les performances des cinq différents modèles, l'ensemble global de test est divisé en fonction de l'origine des images, en distinguant le Dataset. 1 du Dataset. 2. Les modèles sont évalués séparément sur les deux Datasets de test en raison des différences significatives dans la façon dont ils ont été générés et dans l'apparence des images qui les composent. Le Dataset. 1 contient en moyenne 80 objets par image, avec des écarts de luminosité et de contraste très importants, tandis que le Dataset. 2 contient en moyenne 130 objets, avec une luminosité globale et un flou nettement plus élevés (Fig. 7.5). En outre, la distribution de la taille des agrégats dans le Dataset. 1 est donnée par une loi bêta, tandis que celle du Dataset. 2 est bimodale, issue d'une somme de lois bêta. Cette distinction permet d'évaluer la capacité des modèles à identifier avec précision des objets de tailles différentes dans une même image. Les mesures de performance usuelles, définies ci-dessous, sont ensuite calculées, les résultats étant détaillés dans le tableau 7.4.

- **Macro métriques** : Dans le cas de la segmentation par instances à une seule classe, comme c'est le cas ici où la seule classe est « *agrégat* », les macro-métriques (exactitude (*accuracy*), précision (*precision*), rappel (*recall*), F1-mesure (*F1-score*)) calculées à partir d'une matrice de confusion [201] évaluent les performances en considérant chaque objet détecté de manière individuelle puis moyennées.
- **IoU** (*Intersection over Union*) : Une mesure du chevauchement entre masques de segmentation prédits et les objets réels, des IoU élevés indiquant une meilleure précision de la segmentation.
- **AP** (*Average Precision*) : Comme défini par GU et al. [202], il s'agit d'une mesure populaire pour évaluer l'équilibre entre la *precision* et le *recall* à travers différents seuils d'IoU, et qui est calculée par incrément de 0.05, allant d'un IoU de 0.5 à 0.95.
- **ARE** (*Absolute Relative Error*) : Mesure de la précision de la détection des objets en comparant le nombre d'objets détectés au nombre d'objets réels, un ARE plus faible indiquant une plus grande précision du comptage.

Les résultats présentés dans le Tableau 7.4 montrent que tous les modèles sont plus performants sur le Dataset. 1 que sur le Dataset. 2. Cette différence peut être attribuée au contraste plus faible et au niveau de flou plus élevé sur les images du Dataset. 2, mais aussi à la densité d'objets et au taux de chevauchement plus importants. D'ailleurs, l'erreur relative absolue (ARE) montre un taux de détection plus faible pour le Dataset. 2, justement en raison du grand nombre d'objets se recouvrant les uns les autres et d'un flou d'objectif important. L'ARE et la Fig. 7.8 mettent également en évidence les capacités supérieures de détection d'objets de l'architecture YOLOv8-x et SAM, bien que ces modèles tendent parfois à détecter des objets inexistant, et produisant des masques de segmentation de qualité moindre. En particulier, la Fig. 7.9 permet de mettre en évidence le fait que le modèle Mask R-CNN (ResNet101) propose de meilleurs résultats en terme de prédiction de masques de segmentation, ceux prédits par l'architecture YOLO étant généralement plus *anguleux* et moins précis.

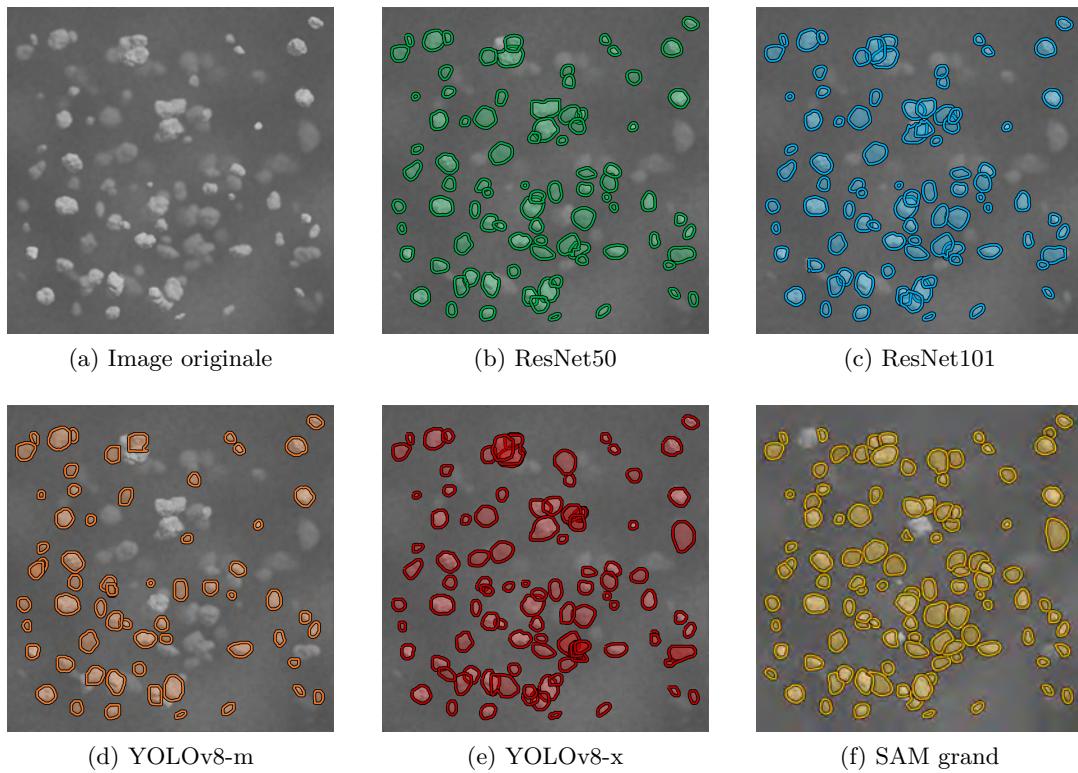


FIGURE 7.8 – Exemple de segmentation d’une image issue de l’ensemble de test du Dataset. 2 par les cinq différents modèles, avec des taux de détection d’objets similaires à ceux présentés dans la dernière colonne (ARE) du Tableau 7.4.

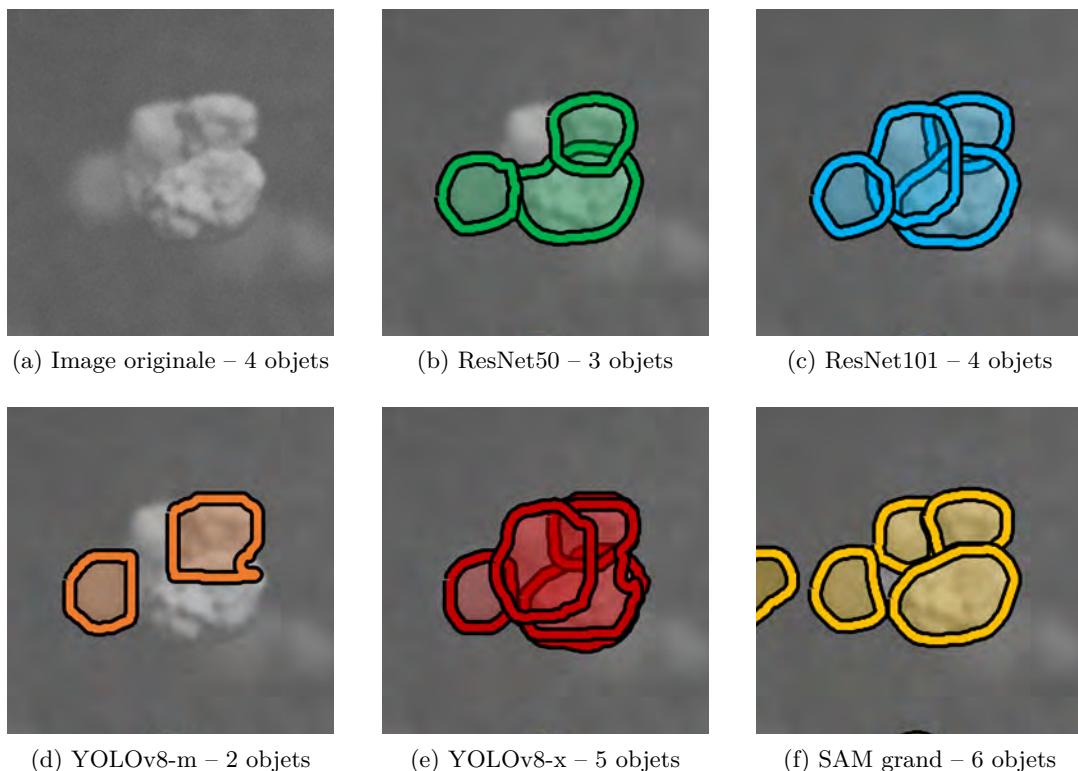


FIGURE 7.9 – Illustration des masques de segmentation prédits par les différents modèles sur un *groupe* d’agrégats.

De manière générale, et compte tenu du déséquilibre entre la proportion de surface couverte par les objets et par l’arrière-plan, l’*accuracy* s’avère être une mesure plutôt inadaptée pour évaluer les performances des modèles. Le modèle Mask R-CNN avec une ossature ResNet101 s’avère être le plus efficace si l’on considère les mesures de *recall*, plus appropriées dans ce contexte. Ces métriques sont significatives car elles sont directement liées à la qualité et la précision des masques de segmentation prédicts.

Cependant, dans le contexte de la caractérisation morphologique des agrégats, les mesures usuelles, bien qu’incontournables dans le domaine de l’apprentissage profond (cf. TIAN et al. [203]), ne sont pas nécessairement adaptées pour évaluer les performances des différents modèles. C’est pour cette raison que les distributions de caractéristiques morphologiques des objets détectés sont calculées et comparées à la vérité terrain (Fig. 7.10).

Dataset. 1							
Modèle	AP	Mean IoU	Accuracy	Precision	Recall	F1 Score	ARE
Mask R-CNN (RN50)	0.66	0.801	0.999	0.864	0.888	0.887	12%
Mask R-CNN (RN101)	0.67	0.807	0.999	0.900	0.917	0.890	12%
YOLOv8-m	0.65	0.796	0.999	0.901	0.873	0.882	10%
YOLOv8-x	0.66	0.802	0.999	0.903	0.881	0.886	6%
SAM grand	0.58	0.756	0.998	0.872	0.861	0.850	10%
Dataset. 2							
Model	AP	Mean IoU	Accuracy	Precision	Recall	F1 Score	ARE
Mask R-CNN (RN50)	0.74	0.843	0.999	0.879	0.943	0.912	37%
Mask R-CNN (RN101)	0.76	0.853	0.999	0.900	0.953	0.918	33%
YOLOv8-m	0.59	0.765	0.999	0.832	0.880	0.860	51%
YOLOv8-x	0.66	0.803	0.999	0.904	0.908	0.886	23%
SAM grand	0.65	0.795	0.999	0.882	0.898	0.876	22%

TABLE 7.4 – Comparatif des différentes métriques calculées pour chacun des modèles de segmentation sur les ensembles de test des Dataset. 1 et Dataset. 2. Les meilleurs scores sont indiqués en gras.

Dataset. 1					
TV	ResNet50	ResNet101	YOLOv8-m	YOLOv8-x	SAM
ECD	0.038	0.017	0.048	0.045	0.045
AR	0.024	0.014	0.024	0.023	0.029
Circularité	0.230	0.140	0.144	0.101	0.226
Convexité	0.091	0.049	0.390	0.278	0.324
Dataset. 2					
TV	ResNet50	ResNet101	YOLOv8-m	YOLOv8-x	SAM
ECD	0.040	0.016	0.079	0.038	0.101
AR	0.030	0.026	0.100	0.072	0.050
Circularité	0.045	0.029	0.123	0.126	0.097
Convexité	0.149	0.113	0.295	0.186	0.180

TABLE 7.5 – Comparaison des distances de Variation Totale calculées entre les distributions de caractéristiques morphologiques prédictes par les modèles et la vérité de terrain pour les Dataset. 1 et Dataset. 2.

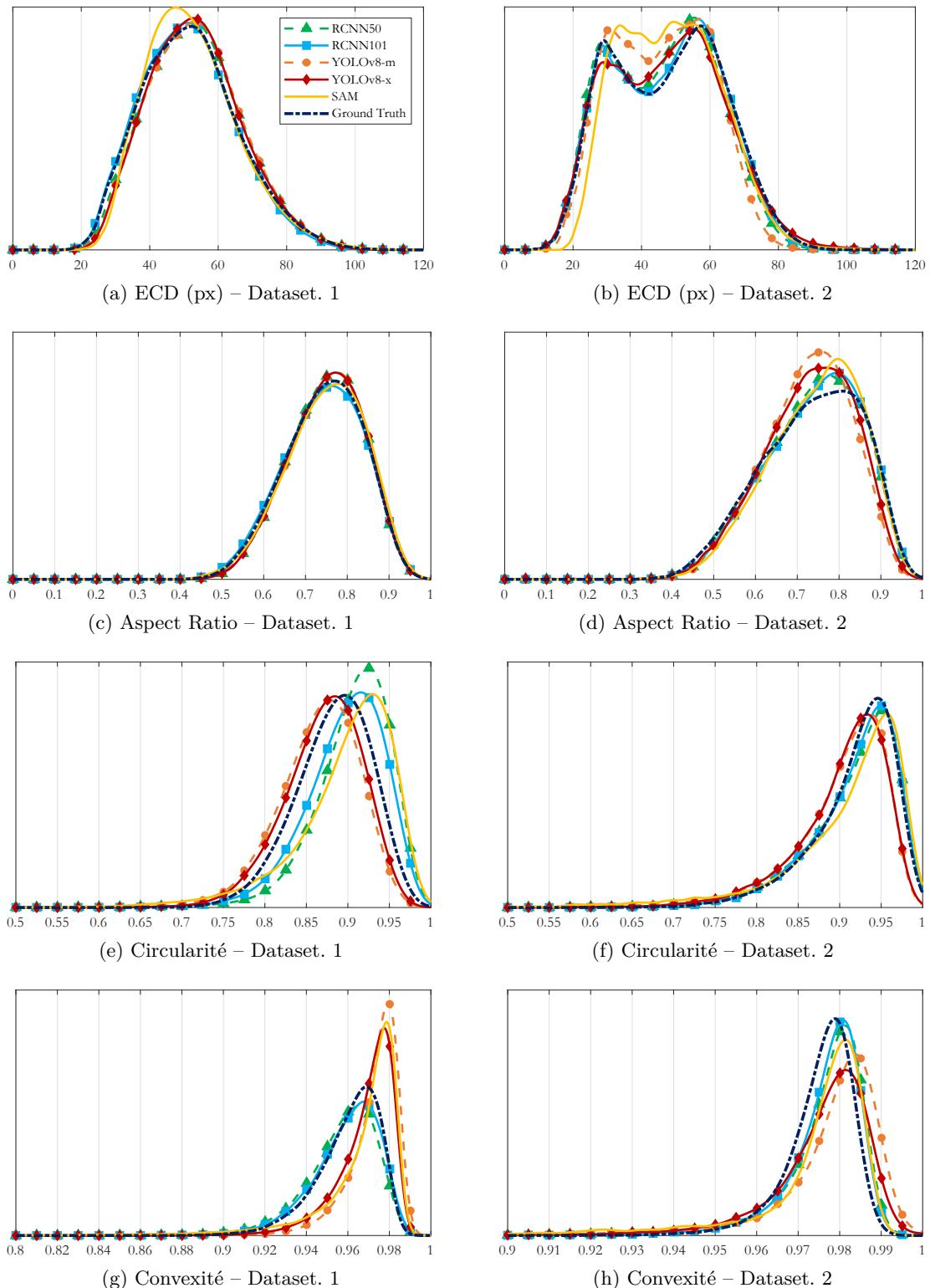


FIGURE 7.10 – Distributions de taille (Diamètre équivalent – ECD), de forme (Aspect Ratio – AR) et d'angularité et texture (Circularité – C et Convexité – Co) déterminées par les différents modèles de segmentation sur les ensembles de test des Dataset. 1 et Dataset. 2.

Les distributions des caractéristiques morphologiques laissent apparaître un très net avantage pour le modèle Mask R-CNN (ResNet101) et ce, pour les deux ensembles d'images. Pour quantifier cet avantage, la Distance de Variation Totale est à nouveau utilisée. Les résultats, présentés dans le Tableau 7.5, confirment le fait que le modèle Mask R-CNN (ResNet101) offre de bien meilleures performances dans le domaine qui nous intéresse, à savoir la qualité des masques de segmentation proposés, et la précision des distributions de caractéristiques morphologiques estimées.

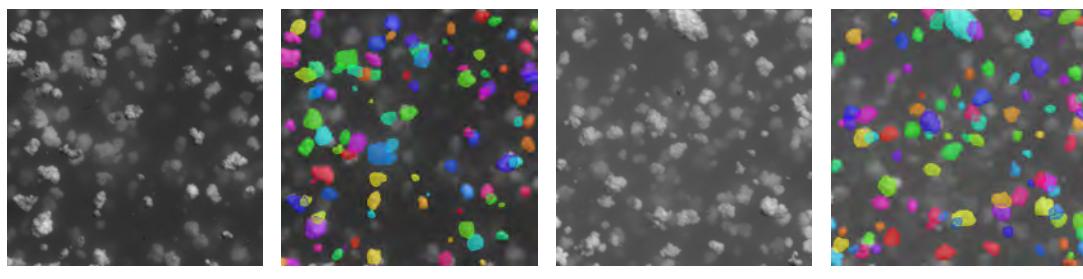
7.3.4 Application aux images in-situ

Le modèle Mask R-CNN (ResNet101) est choisi pour effectuer la segmentation automatique des images in-situ. La Fig. 7.11 propose quelques exemples d'images réelles segmentées et la Fig. 7.12 montre les distributions de caractéristiques morphologiques 2D obtenues. Il apparaît clairement que seule la densité d'objets évolue au cours du temps, ce qui est cohérent avec les observations qui avaient été faites durant la mise en œuvre du protocole expérimental. Ainsi, l'évolution de la taille des agrégats, illustrée par les Fig. 7.12a (distribution en nombre) et Fig. 7.12b (distribution en volume), est extrêmement faible, avec une très légère augmentation du nombre d'objets de grande taille au cours du temps.

En réalité, ces résultats peuvent être expliqués de deux manières :

1. Comme mentionné précédemment, il a pu être observé durant le processus expérimental que l'évolution des caractéristiques morphologiques des agrégats, notamment leur taille, était très limitée. Cela était dû en particulier au type de latex utilisé.
2. L'analyse d'image ne permet de voir que les objets les plus gros, généralement, au delà de $100 \mu\text{m}$. En effet, la caméra utilisée propose une résolution de l'ordre de $10 \mu\text{m}/\text{pixel}$, ce qui ne permet pas de repérer les objets de taille inférieure. Malheureusement, des mesures effectuées en parallèle par diffraction laser par prélèvement successifs montrent qu'une grande proportion (en nombre) de la population d'agrégats est comprise entre 0.1 et $1 \mu\text{m}$. En revanche, ces mesures ne permettent pas d'observer des objets au delà de $1700 \mu\text{m}$, ce qui signifie que la combinaison de ces deux types de mesure est nécessaire pour avoir un aperçu global de l'évolution de la morphologie de la population.

Par conséquent, et bien que les distributions de caractéristiques morphologiques évoluent peu avec le temps, il est bon de constater que ces résultats sont cohérents avec les autres observations et mesures qui ont été effectuées en parallèle de cette expérience. En



(a) Image originale (7 h) (b) Image segmentée (c) Image originale (10 h) (d) Image segmentée

FIGURE 7.11 – Illustration des masques de segmentation prédicts par le modèle Mask R-CNN pour les images in-situ réelles.

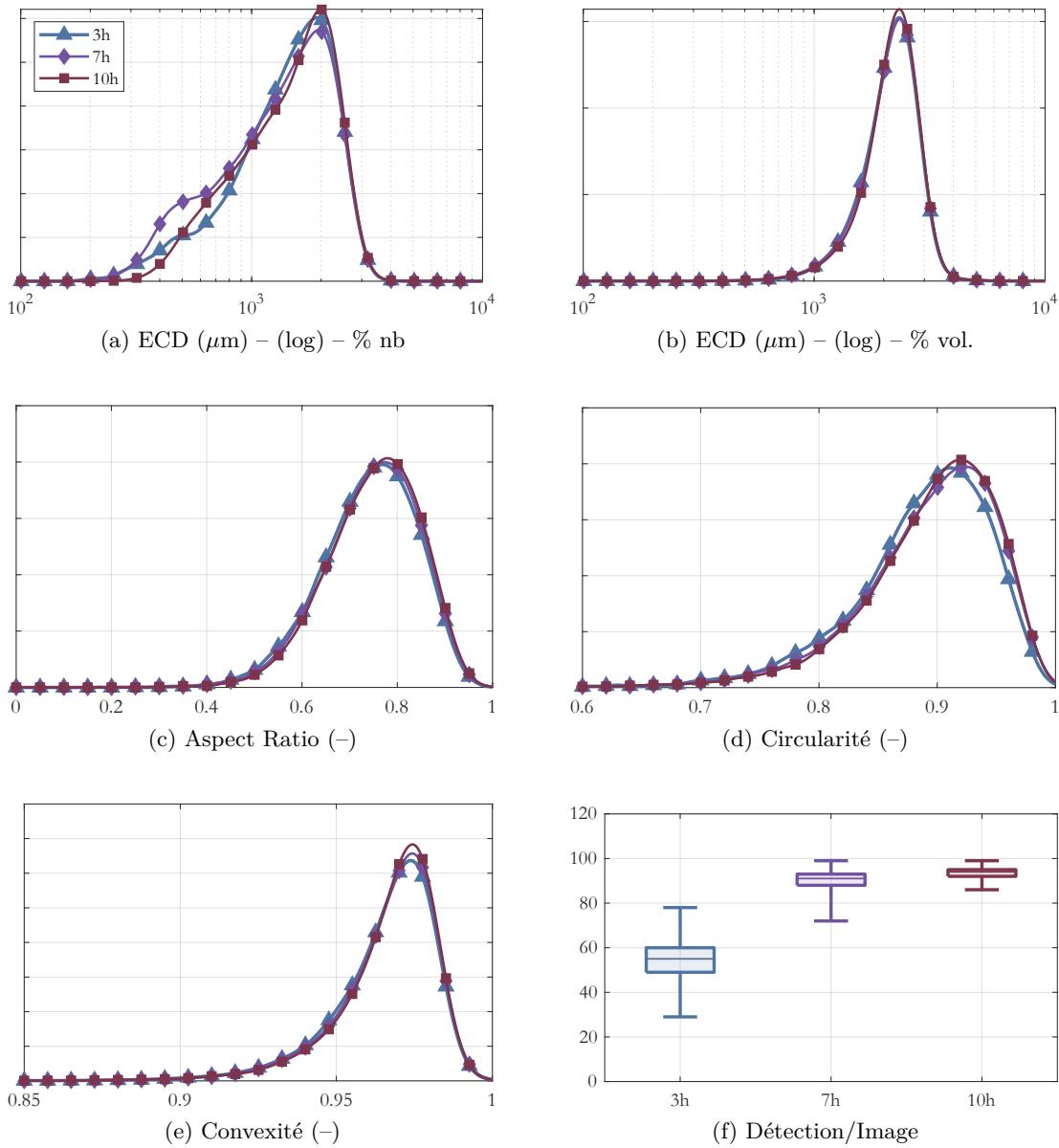


FIGURE 7.12 – Distributions de caractéristiques morphologiques 2D obtenues par segmentation des images in-situ et nombre d’objets détectés par image (f).

particulier, le nombre croissant d’objets détectés par image au cours du temps est bien cohérent avec l’augmentation de la proportion d’objets dont la taille est supérieure à $100 \mu\text{m}$, c’est-à-dire d’objets détectables par le dispositif optique.

7.4 Caractérisation morphologique d’une population d’agrégats de latex

7.4.1 Description de la méthode

Dans cette dernière section, les données recueillies par segmentation des images in-situ sont exploitées afin d’estimer les caractéristiques morphologiques 3D des agrégats. Deux méthodes sont proposées :

1. **Modèle géométrique stochastique** : La première méthode fait uniquement appel à des outils de géométriques stochastiques. Les paramètres du modèle VOX-STORM sont ajustés par minimisation de la fonction de coût définie par l'équation (4.25) en utilisant les distributions de caractéristiques morphologiques 2D des agrégats détectés sur les images in-situ.
2. **Modèle génératif** : La seconde méthode utilise le générateur du GAN présenté au Chapitre 6. Ce dernier génère ainsi une population d'agrégats 3D synthétiques directement à partir des masques de segmentation par le modèle Mask R-CNN.

Il faut par ailleurs rappeler que la segmentation est nécessairement imparfaite (cf. Fig. 7.9), et que, par conséquent, l'utilisation des distributions de caractéristiques morphologiques 2D peut entraîner un biais (cf. Fig. 7.10). L'utilisation d'un modèle d'apprentissage profond est par conséquent également motivé par la possibilité de s'affranchir de ce biais puisque ce sont les masques de segmentation qui alimentent directement le générateur, et non les distributions de caractéristiques morphologiques 2D calculées à partir de ces mêmes masques de segmentation.

7.4.2 Résultats

Les résultats obtenus par les deux différentes approches sont présentés dans la Fig. 7.13. Les distributions de caractéristiques de taille (ECD et aire surfacique) présentent de fortes similarités, tout comme les distributions de caractéristiques de forme (élongation de l'ellipsoïde équivalent). Concernant les caractéristiques morphologiques d'angularité et de texture, les distributions de sphéricité sont également en accord. En revanche, on note un décalage significatif entre les distributions de solidité (rapport volume sur volume convexe) prédites par le GAN et celles qui sont estimées à l'aide du modèle VOX-STORM.

En effet, le modèle VOX-STORM prédit des distributions de solidité de moyennes plus faibles et d'écart-type plus important. Pour expliquer cette différence entre les deux approches, plusieurs hypothèses peuvent être émises :

- Le modèle génératif n'a pas été entraîné sur un ensemble de données suffisamment varié pour générer des objets de faible solidité.
- Le modèle génératif produit des objets voxélisés de dimension $32 \times 32 \times 32$ voxels, ce qui est la norme dans le domaine de la génération d'objets 3D par réseaux convolutifs (cf. GIANNIS et al. [170]), notamment pour des raisons de limitation au niveau de la mémoire vive, mais ce qui entraîne de fait certaines limitations quant à la complexité des formes générées. Ainsi, les objets produits par le générateur sont plutôt compacts et présentent assez peu de zones concaves, d'où leur solidité élevée.
- Enfin, à supposer que le générateur soit assez flexible pour créer des objets de faible solidité, la basse résolution des masques de segmentation et l'entrée de dimension 64×64 pixels peuvent ne pas fournir suffisamment de détails pour lui permettre de produire des objets fortement concaves.

Cette différence notable au niveau des distributions de solidité met à nouveau en avant une limitation de l'approche basée sur un modèle génératif par rapport à une approche purement géométrique stochastique. Néanmoins, la forte correspondance entre les distributions de toutes les autres caractéristiques morphologiques montre qu'il est bien possible d'utiliser le processus complet proposé au Chapitre 6, Section 6.3 pour estimer rapidement les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats de nanoparticules de latex à partir d'images in-situ.

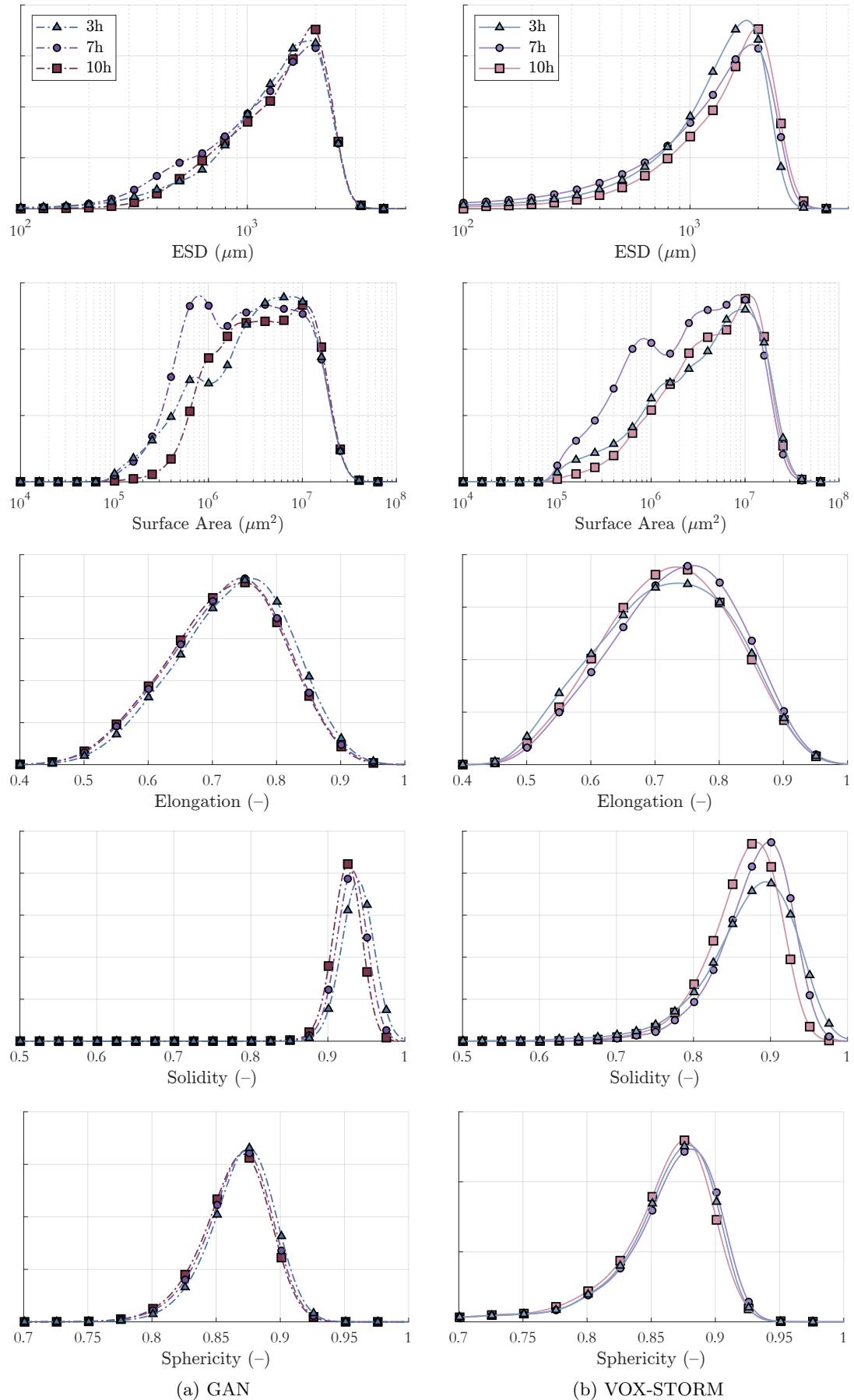


FIGURE 7.13 – Distributions de caractéristiques morphologiques 3D estimées par l’approche basée sur un modèle génératif d’apprentissage profond (a) et par l’approche purement géométrique stochastique utilisant le modèle VOX-STORM (b).

7.5 Conclusion générale

L'objectif de ce chapitre était de montrer dans quelle mesure les outils développés jusqu'ici pouvaient permettre d'estimer les distributions de caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats de latex à partir d'images in-situ. L'idée était en particulier de proposer une méthode applicable dans un contexte industriel.

La méthode proposée peut se résumer en trois étapes :

1. **Collecte des données** à l'aide d'un dispositif expérimental. Des images in-situ sont capturées par une caméra CMOS comme le montre le dispositif illustré par la Fig. 7.1.
2. **Segmentation des images** par un réseau convolutif de type Mask-RCNN.
3. **Estimation des caractéristiques morphologiques 3D** par un modèle d'apprentissage profond (générateur d'un GAN).

La segmentation des images a nécessité la création d'un ensemble d'images synthétiques pour entraîner le modèle Mask R-CNN. Ces images synthétiques ont pu être générées grâce à la capacité du modèle SPHERE à fournir des rendus photoréalistes d'agrégats de latex. Par ailleurs, la ressemblance des images synthétiques aux images réelles a pu être quantifiée en utilisant la FID comme métrique, et plusieurs modèles de segmentation par instance ont pu être comparés afin de sélectionner le plus performant.

L'estimation des caractéristiques morphologiques 3D peut se faire soit par ajustement des paramètres d'un modèle géométrique stochastique (modèle VOX-STORM), soit en utilisant un modèle d'apprentissage profond pré-entraîné à partir de données générées par le modèle VOX-STORM (cf. Section 6.3). Cette dernière approche est plus adaptée à un contexte industriel, car les résultats peuvent être obtenus en quelques secondes (ou quelques minutes pour un ensemble de plusieurs milliers d'images). En revanche, l'approche géométrique stochastique fournit des résultats plus précis (Fig. 6.11 et Fig. 6.10), mais en un temps bien plus long, l'ajustement des paramètres par optimisation d'une fonction de coût pouvant durer quelques heures.

Enfin, les résultats obtenus sont conformes aux attentes pour le type de latex utilisé (PMMA), à savoir que la morphologie des agrégats visibles sur les images, c'est-à-dire dont la taille est de l'ordre de $100 \mu\text{m}$ au minimum, évolue très peu au cours du temps. En effet, c'est principalement aux petites échelles, notamment pour les objets dont la taille est de l'ordre de 0.1 à $100 \mu\text{m}$, que l'évolution morphologique est la plus significative au cours du temps, comme l'ont confirmé des mesures effectuées par diffraction laser.

La méthode proposée pourrait être améliorée en utilisant des images de plus haute résolution, afin de mesurer plus finement les caractéristiques morphologiques 2D, dans le cas d'une approche géométrique stochastique, ou pour améliorer la qualité de l'entrée d'un modèle génératif. Un modèle plus flexible, tel que la version améliorée de VOX-STORM, présentée à la Section 5.3.3, pourrait également être utilisé. Enfin, l'utilisation de modèles de diffusion [204, 205] pourraient être envisagée à la place d'un GAN, dont les limitations sont nombreuses [206].

Chapitre 8

Conclusion & perspectives

Contenu du chapitre

8.1	Conclusion	159
8.1.1	Analyse d'image et segmentation automatique.	159
8.1.2	Modélisation géométrique stochastique 3D	160
8.1.3	Modèles génératifs	160
8.1.4	Application aux données réelles	160
8.2	Perspectives	161
8.2.1	Amélioration de la qualité des données expérimentales.	161
8.2.2	Amélioration des modèles et perspectives théoriques	161

8.1 Conclusion

L'objectif principal de cette thèse, tant au niveau de la problématique industrielle que de la problématique scientifique, était de proposer une méthode permettant d'estimer les caractéristiques morphologiques 3D d'une population d'agrégats de latex à partir d'images 2D projetées. Pour atteindre ces objectifs, plusieurs contributions scientifiques ont été apportées, avec notamment le développement de modèles géométriques stochastiques ou l'utilisation d'un modèle génératif d'apprentissage profond.

Deux approches, l'une utilisant exclusivement des outils géométriques stochastiques, et l'autre basée sur des modèles d'apprentissage profond, ont été validées numériquement, comparées, et appliquées à des images in-situ réelles. En particulier, l'approche utilisant des modèles génératifs est adaptée à une mise en œuvre dans un contexte industriel, du fait de sa rapidité d'exécution.

8.1.1 Analyse d'image et segmentation automatique

Plusieurs techniques permettant de segmenter les images in-situ ont été testées et comparées. Des ensembles d'images synthétiques photo-réalistes ont été générés à l'aide des modèles géométriques stochastiques développés. C'est l'architecture Mask R-CNN basée sur une ossature ResNet101 qui s'est révélée être la plus performante, et qui a été utilisée pour segmenter les images réelles. Par ailleurs, la ressemblance des images synthétiques

avec les images réelles a pu être quantifiée par des mesures de FID (Fréchet Inception Distance), pour s'assurer de la transférabilité des résultats obtenus sur les images synthétiques aux images réelles.

8.1.2 Modélisation géométrique stochastique 3D

Trois différents modèles géométriques stochastiques ont été présentés et proposent chacun des approches différentes. Néanmoins, tous permettent d'exploiter les informations obtenues par analyse d'image, et en particulier les distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées, dans le processus de modélisation. C'est par ailleurs l'une des caractéristiques principales des modèles proposés, et qui les différencie de ce qui existe déjà dans la littérature. De plus, deux des modèles ont pour objectif de limiter autant que possible le temps de génération d'un objet, cette composante étant particulièrement importante dans une approche géométrique stochastique. Ils permettent ainsi de générer des agrégats ou des objets granulaires bien plus rapidement que ce que proposent les modèles comparables que l'on peut trouver dans la littérature. Enfin, il se sont révélés capables d'être suffisamment flexibles pour reproduire avec fidélité les distributions de caractéristiques morphologiques 2D projetées d'agrégats de latex, ces dernières ayant été mesurées à partir d'images ex-situ et in-situ.

8.1.3 Modèles génératifs

Un modèle a été proposé pour générer des objets 3D à partir d'images 2D. Contrairement à ce qui existe dans la littérature [170], une unique projection est utilisée, cette dernière étant une image à niveaux de gris plutôt qu'une image binaire, comme c'est communément le cas. Ce modèle a été entraîné avec des données générées par VOX-STORM. Dans le même temps, un processus complet, allant de la segmentation des images 2D à l'estimation des distributions de caractéristiques morphologiques 3D, en passant par la génération d'une population d'objets 3D à partir de chacun des masques de segmentation individuels, a été proposé. Ce processus a été validé numériquement à l'aide d'images synthétiques produites par le modèle SPHERE, l'indépendance des données d'entraînement par rapport aux données de test permettant ainsi une validation plus robuste et de meilleure qualité.

8.1.4 Application aux données réelles

Les validations numériques et l'application des méthodes aux images réelles ont permis de comparer les deux approches proposées. De manière générale, l'approche purement « géométrique stochastique » offre des résultats légèrement supérieurs. En revanche, elle est assez peu adaptée à un contexte industriel, du fait de la lenteur et de la complexité de sa mise en œuvre, ainsi que par l'absence totale de transférabilité des résultats. Par ailleurs, les différences en termes de distribution de taille (ECD, aire surfacique, volume) et dans une moindre mesure, de forme (critères d'élongation), se sont révélées minimes. Ainsi, l'approche basée sur un modèle génératif d'apprentissage profond est non-seulement applicable dans un contexte industriel, mais elle est également adaptée à toute application expérimentale similaire.

8.2 Perspectives

À l'issue de cette thèse, plusieurs perspectives peuvent être envisagées afin d'améliorer les approches proposées et d'élargir leur champ d'application.

8.2.1 Amélioration de la qualité des données expérimentales

La principale limitation rencontrée lors de ces travaux est la qualité parfois insuffisante des images in-situ. En effet, leur faible résolution (en rapport avec la taille des objets) et leur piètre qualité (flou, bruit) rendent difficile la délimitation précise des contours des objets à segmenter, nuisant ainsi à la qualité de la segmentation et à la précision des mesures de caractéristiques 2D. Bien que l'impact soit limité sur l'estimation des caractéristiques de taille et de forme, l'angularité et la texture des objets ne peuvent être correctement évaluées. Afin de pallier ces problèmes, des méthodes d'amélioration des images ou la constitution de nouveaux ensembles de données pourraient être envisagées.

Par ailleurs, il s'est avéré que les populations d'agrégats de latex étudiées à travers les images in-situ n'étaient pas suffisamment diversifiées pour mettre pleinement en avant l'intérêt des méthodes proposées. De plus, la quasi-absence de mesures expérimentales permettant de conforter les prédictions effectuées constitue également une limitation. Bien que certaines mesures par diffraction laser montrent la cohérence des résultats obtenus et que les simulations numériques tendent à valider les méthodes, un nombre plus important de mesures expérimentales permettrait d'apporter davantage de crédit aux deux approches développées.

8.2.2 Amélioration des modèles et perspectives théoriques

Une autre perspective majeure repose sur l'amélioration des modèles proposés. Une version améliorée du modèle VOX-STORM a par exemple été proposée à la Section 5.3.3 du Chapitre 5, et une version du modèle SPHERE utilisant quatre champs Gaussiens aléatoires a été utilisée pour générer des images synthétiques ressemblant aux images réelles. L'établissement de relations analytiques entre les paramètres des modèles et la morphologie des objets générés pourrait apporter un éclairage théorique bienvenu et permettre d'accélérer considérablement le processus d'optimisation, qui constitue l'un des principaux désavantages de l'approche géométrique stochastique. Bien que cela soit généralement difficile [207], des résultats analytiques existent par exemple au sujet des champs aléatoires anisotropes [208, 209], dont l'utilisation dans le modèle SPHERE pourrait permettre d'obtenir des morphologies plus complexes.

De même, le modèle génératif du GAN pourrait être amélioré en produisant des objets de taille supérieure, bien que cela nécessite de très grandes puissances de calcul. Une approche alternative serait de concevoir un modèle utilisant les objets produits par le générateur du GAN comme objets de base, puis de les déformer à l'aide de champs aléatoires, à l'instar du modèle SPHERE avec des ellipsoïdes. Cette approche permettrait d'apporter de la texture aux objets parfois trop lisses générés par le GAN, tout en restant extrêmement rapide. Par ailleurs, l'utilisation de modèles de diffusion plutôt que de GANs pourrait être investiguée, ces derniers se révélant aujourd'hui plus efficaces pour la génération d'images 2D, 3D et de vidéos.

Enfin, donner un sens physique aux paramètres des modèles pourrait permettre de mieux comprendre l'impact des paramètres opératoires sur la morphologie des objets [210]. Une approche multi-échelle consistant à agglomérer des agrégats, eux-mêmes générés par

l'un des trois modèles présentés, mériterait d'être explorée. L'utilisation de graphes aléatoires pour modéliser une sorte de squelette des objets pourrait également être envisagée, permettant probablement de mieux appréhender les phénomènes de rupture se produisant durant le processus d'agrégation et conduisant à des distributions de caractéristiques morphologiques particulières. Un proto-modèle de ce type, limité pour l'instant à des agrégats « plats », a été proposé par THÉODON et al. [211]. Il serait par exemple possible de généraliser ce genre de modèle en utilisant des techniques d'apprentissage automatique comme celles proposées par PHON-AMNUAISUK et al. [212] permettant d'estimer un squelette 3D à partir d'une image 2D.

Annexe A

Caractéristiques morphologiques

Les tableaux ci-dessous indiquent le nombre d'occurrences ainsi que le nombre de définitions recensées pour chacune des caractéristiques morphologiques utilisées parmi les 145 articles sélectionnés pour mener à bien la SLR [15] évoquée dans les Chapitres 2 et 3.

Caractéristiques de Taille

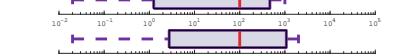
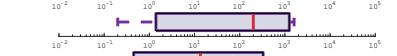
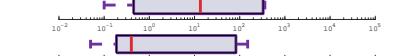
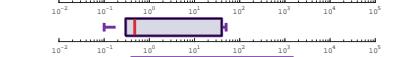
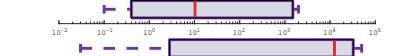
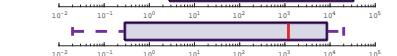
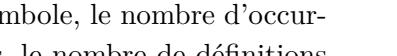
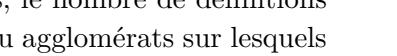
Caractéristique	Symbol	Nb. de Déf.	Nb. d'occ.	Répartition des tailles (μm)
Aire Projectée	A	1	63	
Périmètre	P	1	31	
Diam. du Cercle Équiv.	ECD	1	27	
Diamètre de Feret	F	1	23	
Longueur	L	5	18	
Nb. de Part. Primaires	N_p	1	17	
Rayon de Giration	R_g	4	16	
Diamètre	d	2	9	
Hauteur	H	1	8	
Diam. de la Sphère Équiv.	ESD	1	8	
Aire Surfacique	S	1	5	
Largeur	W	2	4	

TABLE A.1 – Liste des 12 caractéristiques de taille avec leur symbole, le nombre d'occurrences dans l'ensemble des documents de recherche sélectionnés, le nombre de définitions différentes, et la distribution de la taille moyenne des agrégats ou agglomérats sur lesquels elles sont mesurées. Le marqueur rouge sur les diagrammes en boîte représente la médiane.

Caractéristiques de Forme

Caractéristique	Symbol	Nb. de Déf.	Nb. d'occ.	Répartition des tailles (μm)
Dimension Fractale	D_f	7	33	
Circularité	C	5	26	
Aspect Ratio	AR	7	17	
Élongation	e	8	15	
Sphéricité	Φ_S	10	12	
Aplatissement	f_{flat}	2	4	
Compacité	O	2	3	
Anisotropie	X	1	3	
Facteur de Forme	SF	2	3	
Complexité	Y	1	2	
Sectional Aspect Ratio	SAR	1	1	
Plane Geometry Factor	PGF	1	1	
Coefficient Axial	—	1	1	
Excentricité	E_c	1	1	
Aire Fractale	A_F	1	1	
Robustesse	Ω_1	1	1	

TABLE A.2 – Liste des 16 caractéristiques de forme avec leur symbole, le nombre d'occurrences dans l'ensemble des articles de recherche sélectionnés, le nombre de définitions différentes et la répartition de la taille moyenne des agrégats ou agglomérats sur lesquels elles sont mesurées.

Caractéristiques d'Angularité

Caractéristique	Symbol	Nb. de Déf.	Nb. d'occ.	Répartition des tailles (μm)
Concavité	CAV	6	14	
Convexité	Co	4	9	
Rugosité	RO	4	8	
Angularité	AF/AI	6	8	
Rondeur	R	4	7	
Solidité	SLD	2	5	
Ratio de Couverture	Z	1	2	
Étendue	—	1	1	

TABLE A.3 – Liste des 8 caractéristiques d'angularité avec leur symbole, le nombre d'occurrences dans l'ensemble des articles de recherche sélectionnés, le nombre de définitions différentes et la répartition de la taille moyenne des agrégats ou agglomérats sur lesquels elles sont mesurées.

Caractéristiques de Texture

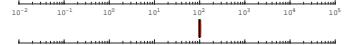
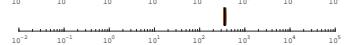
Caractéristique	Symbole	Nb. de Déf.	Nb. d'occ.	Répartition des tailles (μm)
Texture	TX/TF	3	6	
Simplicité	<i>Si</i>	1	1	
Hétérogénéité	—	1	1	
Clumpiness	—	1	1	
Lacunarité	Λ	1	1	
Signature	—	1	1	

TABLE A.4 – Liste des 6 caractéristiques de texture avec leur symbole, le nombre d'occurrences dans l'ensemble des articles de recherche sélectionnés, le nombre de définitions différentes et la répartition de la taille moyenne des agrégats ou agglomérats sur lesquels elles sont mesurées.

Caractéristiques de Structure

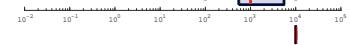
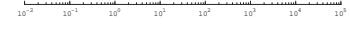
Caractéristique	Symbole	Nb. de Déf.	Nb. d'occ.	Répartition des tailles (μm)
Porosité	ε	5	11	
Degré d'Agglomération	AD	3	5	
Nombre de Coordination	—	1	4	
Densité d'Empaquetage	η	1	1	

TABLE A.5 – Liste des 4 caractéristiques de structure avec leur symbole, le nombre d'occurrences dans l'ensemble des articles de recherche sélectionnés, le nombre de définitions différentes et la répartition de la taille moyenne des agrégats ou agglomérats sur lesquels elles sont mesurées.

Annexe B

Maillage d'une sphère

La déformation du maillage d'une sphère à partir d'un champ aléatoire peut être difficile à mettre en œuvre. Les techniques traditionnelles utilisent des bruits sphériques (par exemple, Perlin ou Simplex) ou des champs aléatoires qui doivent satisfaire à des conditions de périodicité. Pour toutes ces raisons, l'utilisation d'un maillage quelconque peut parfois s'avérer difficile à mettre en œuvre. Par exemple, MOLLON et al. [11] utilisent un maillage géodésique à 2562 sommets obtenu par trois subdivisions successives d'un icosaèdre. La maille est ensuite déformée par plusieurs champs Gaussiens aléatoires 2D dont les matrices de covariance sont toutes précalculées pour différentes longueurs de corrélation. Cependant, cette méthode n'est pas applicable à d'autres maillages comme par exemple des maillages irréguliers ou aléatoires. Dans cette annexe, cinq maillages différents d'une sphère sont déformés à partir du modèle SPHERE et les erreurs relatives de différentes caractéristiques morphologiques sont calculées, en prenant comme référence les mesures obtenues pour un maillage régulier à 10242 sommets d'une icosphère.

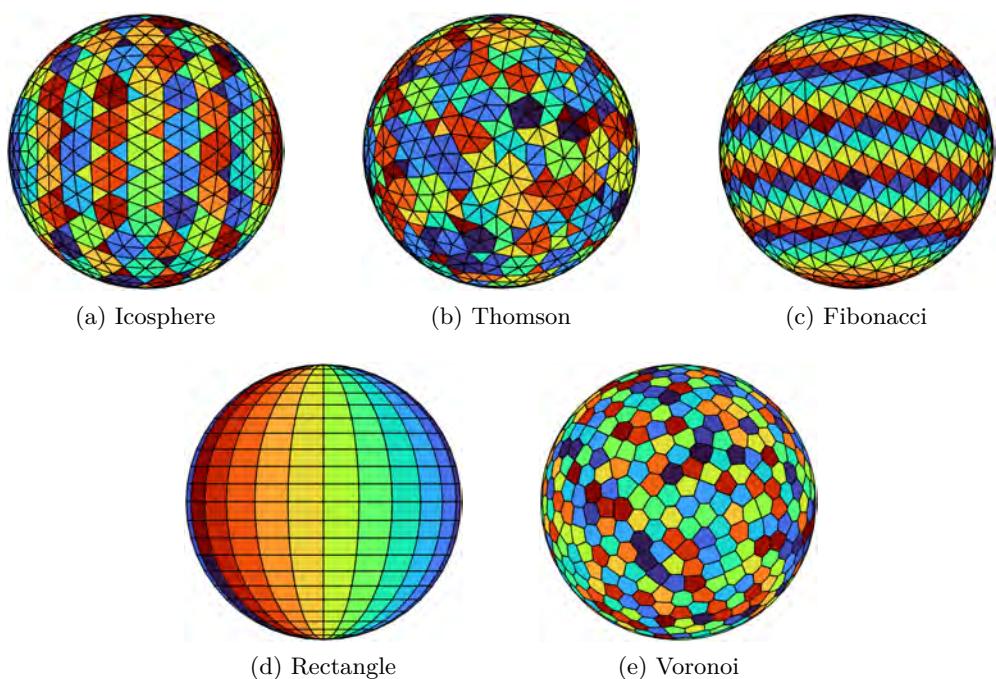


FIGURE B.1 – Illustration de cinq types de maillages sphériques différents comptant un total de 642 sommets.

Une sphère peut être maillée de différentes manières en fonction du contexte et des exigences. Par exemple, certaines applications peuvent nécessiter un maillage régulier ou uniforme. Les cinq maillages comparés sont définis comme suit.

1. Un maillage géodésique (ici une icosphère) peut être obtenu par subdivisions successives d'un polygone régulier, dans ce cas un icosaèdre (Fig. B.1a). Par exemple, trois subdivisions permettent d'obtenir une maille de 2562 sommets, et quatre subdivisions une maille de 10242 sommets. Si cette méthode présente l'avantage de fournir une distribution spatiale uniforme des points sur la sphère, elle ne permet pas de choisir un nombre spécifique de sommets pour une application particulière (KENT [213]).
2. Une configuration de Thomson (*T-design*) propose également une distribution uniforme des sommets du maillage sur la surface de la sphère (Fig. B.1b). Elle peut être obtenue par *minimisation de l'énergie* à partir d'une configuration initiale en déplaçant les sommets de manière à ce qu'ils soient le plus éloignés les uns des autres. Il peut être coûteux en temps de calcul, mais le nombre de sommets est laissé à l'appréciation de l'utilisateur (BRAUCHART et al. [214]).
3. Un maillage basé sur une grille de Fibonacci (Fig. B.1c) a l'avantage d'être extrêmement facile à implémenter, mais l'inconvénient majeur est la distribution quasi uniforme des points qui peut ne pas convenir à certaines applications (KEINERT et al. [215]).
4. Un maillage rectangulaire ou quadrilatéral est une subdivision classique d'une sphère le long des méridiens et des parallèles, et présente l'avantage d'être très facile à construire (Fig. B.1d). Cependant, la distribution des sommets n'est pas uniforme, avec une forte densité aux pôles, et la taille des faces est plus importante à l'équateur. C'est le maillage utilisé par la fonction **sphere** de MATLAB®.
5. Un maillage de Voronoï fournit une distribution uniforme des sommets sur la surface de la sphère. Le maillage peut être obtenu en appliquant successivement l'algorithme de relaxation de Loyd à toute distribution aléatoire de points sur la sphère (DU et al. [216]), ou en ajoutant itérativement de nouveaux sommets (AUGENBAUM et al. [217]). Dans les faits, la génération de ce maillage avec l'assurance d'une distribution spatiale quasi uniforme des sommets peut se révéler très coûteuse en termes de temps de calcul.

Dix objets différents sont générés à l'aide du modèle SPHERE, chaque objet utilisant les cinq différents types de maillages avec le même nombre de sommets (à l'exception des maillages géodésiques). Les caractéristiques morphologiques de forme et de taille sont mesurées et comparées aux valeurs obtenues à partir d'un maillage géodésique (icosphère) à 10242 sommets. La Fig. B.2 montre que pour une maille de 10000 sommets, les erreurs relatives sont inférieures à 0.2%. En outre, les courbes d'erreur relative sont toutes très similaires, ce qui confirme que la méthode de déformation par champ aléatoire 3D utilisée par le modèle SPHERE est bien indépendante du maillage utilisé.

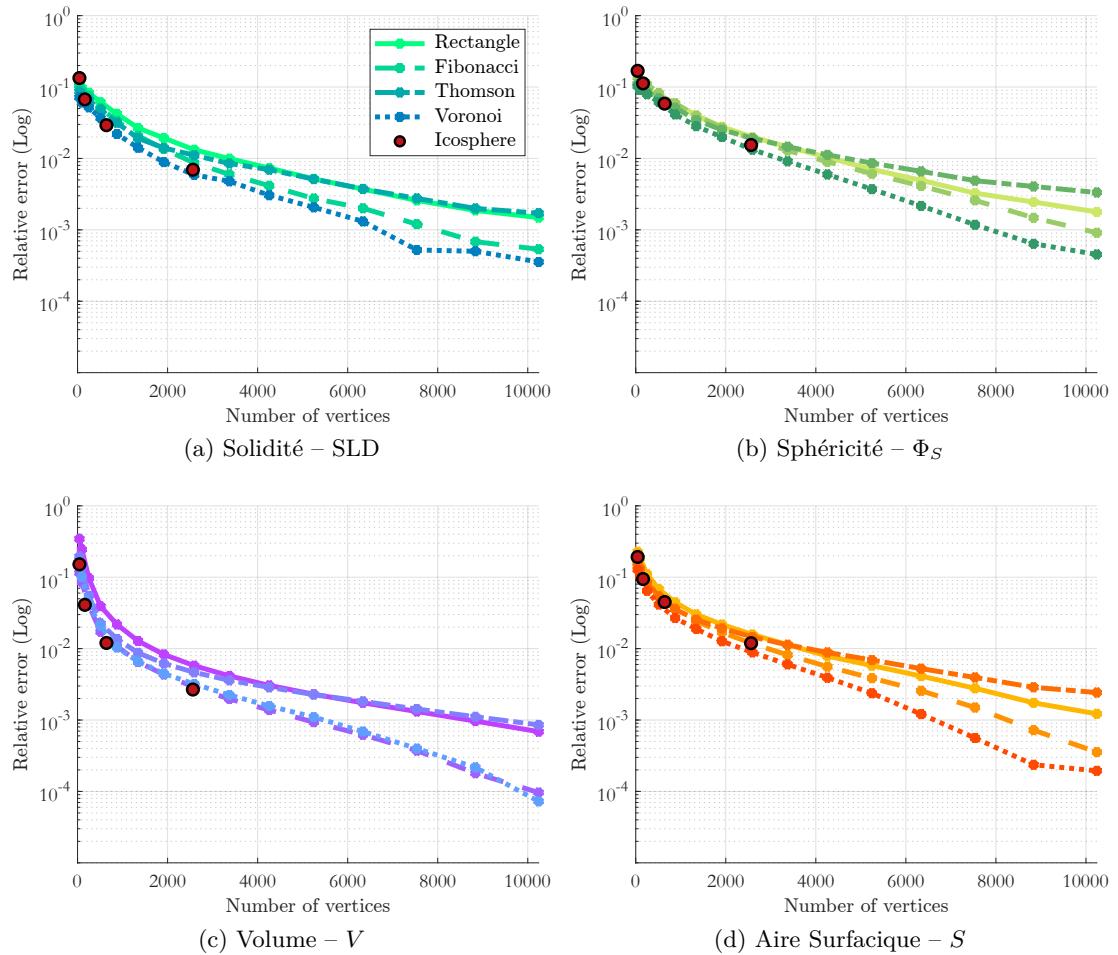


FIGURE B.2 – Illustration des écarts relatifs entre les mesures effectuées sur des objets générés avec le modèle SPHERE à partir de cinq maillages différents. Les mesures de référence sont effectuées sur une icosphère à 10242 sommets.

Annexe C

Illustrations supplémentaires d'agrégats imprimés en 3D

La Fig. C.1 montre une série d'images d'agrégats imprimés en 3D à partir du fichier STL de référence évoqué au Chapitre 5, celles-ci ayant toutes été capturées par un morphogranulomètre. Par ailleurs, cette figure illustre clairement le fait que les objets considérés ont tendance à s'orienter dans une direction privilégiée sous l'effet de la gravité, et accrédite l'hypothèse selon laquelle les objets observés à l'aide d'un morphogranulomètre le sont dans une direction orthogonale au diamètre maximal de Feret.

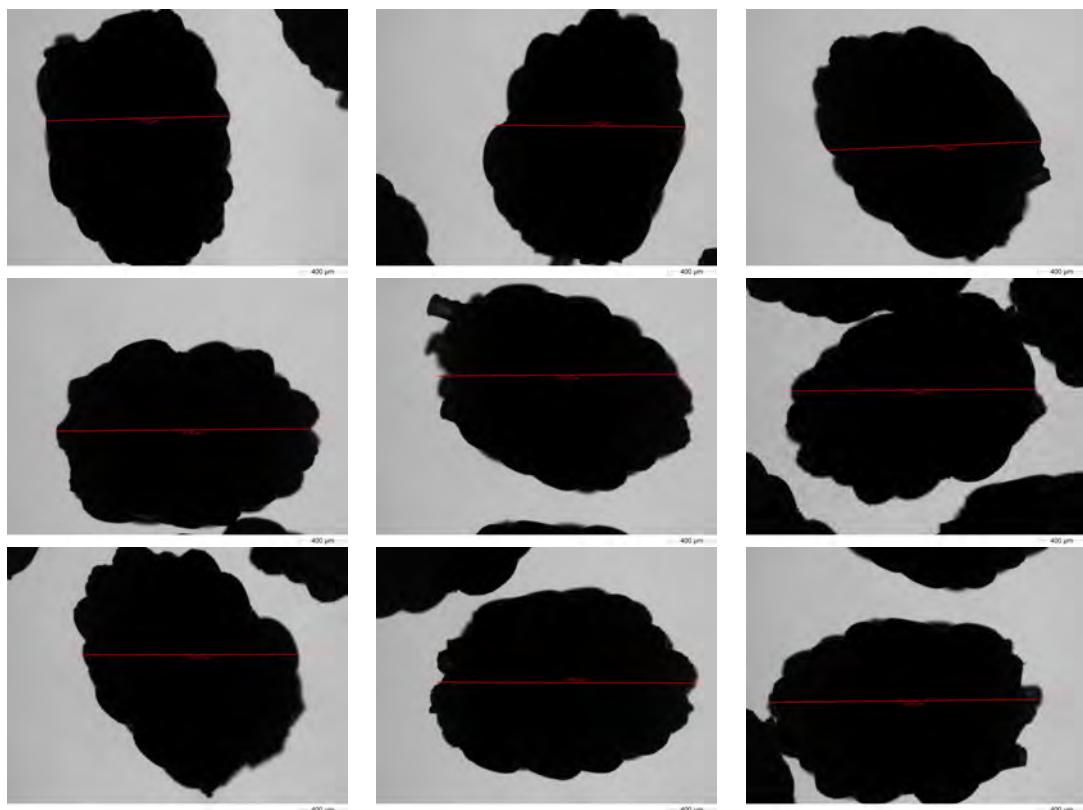


FIGURE C.1 – Visualisation des agrégats imprimés en 3D. Images capturées par un morphogranulomètre.

Bibliographie

- [1] M. FREI et al. « Image-based size analysis of agglomerated and partially sintered particles via convolutional neural networks ». In : *Powder Technology* 360 (2020), p. 324-336. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2019.10.020>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003259101930854X> (cf. p. xiii, 14, 15, 132, 147).
- [2] P. MONCHOT et al. « Deep Learning Based Instance Segmentation of Titanium Dioxide Particles in the Form of Agglomerates in Scanning Electron Microscopy ». In : *Nanomaterials* 11.4 (2021). ISSN : 2079-4991. DOI : 10.3390/nano11040968. URL : <https://www.mdpi.com/2079-4991/11/4/968> (cf. p. xiii, 14, 15, 132, 143).
- [3] A. MEHLE et al. « In-line recognition of agglomerated pharmaceutical pellets with density-based clustering and convolutional neural network ». In : *2017 Fifteenth IAPR International Conference on Machine Vision Applications (MVA)*. 2017, p. 9-12. DOI : 10.23919/MVA.2017.7986760 (cf. p. xiii, 12, 14, 15).
- [4] J. MORÁN et al. « Monte Carlo Aggregation Code (MCAC) Part 1: Fundamentals ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 569 (2020), p. 184-194. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.02.039>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979720301855> (cf. p. xiii, 21, 23).
- [5] J. MORÁN et al. « FracVAL: An improved tunable algorithm of cluster-cluster aggregation for generation of fractal structures formed by polydisperse primary particles ». In : *Computer Physics Communications* 239 (2019), p. 225-237. ISSN : 0010-4655. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.01.015>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465519300323> (cf. p. xiii, 22, 23, 51).
- [6] O. V. TOMCHUK et al. « Modeling fractal aggregates of polydisperse particles with tunable dimension ». In : *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 605 (2020), p. 125331. ISSN : 0927-7757. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2020.125331>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775720309249> (cf. p. xiii, 23, 24, 50).
- [7] E. GUESNET et al. « A growth model for the generation of particle aggregates with tunable fractal dimension ». In : *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 513 (2019), p. 63-73. ISSN : 0378-4371. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.07.061>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437118309336> (cf. p. xiii, 22, 23, 50, 51).

- [8] G. MOLLON et al. « Generating realistic 3D sand particles using Fourier descriptors ». In : *Granular Matter* 15.1 (fév. 2013), p. 95-108. ISSN : 1434-7636. DOI : 10.1007/s10035-012-0380-x. URL : <https://doi.org/10.1007/s10035-012-0380-x> (cf. p. xiii, 24, 25, 92).
- [9] X. WEI et al. « Surface subdivision-based method for modeling three-dimensional aggregate with controllable concavity and texture in asphalt concrete mesostructure ». In : *Powder Technology* 434 (2024), p. 119311. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.119311>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003259102301094X> (cf. p. xiii, 25-27, 44, 50, 91, 92).
- [10] J. ZHANG et al. « 3D meso-scale modeling of reinforcement concrete with high volume fraction of randomly distributed aggregates ». In : *Construction and Building Materials* 164 (2018), p. 350-361. ISSN : 0950-0618. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2017.12.229>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950061817326351> (cf. p. xiii, 24, 26, 27, 91, 92).
- [11] G. MOLLON et al. « 3D generation of realistic granular samples based on random fields theory and Fourier shape descriptors ». In : *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 279 (2014), p. 46-65. ISSN : 0045-7825. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cma.2014.06.022>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782514002084> (cf. p. xiii, 24, 26, 27, 44, 47, 50, 62, 63, 92, 167).
- [12] D. WEI et al. « A simple method for particle shape generation with spherical harmonics ». In : *Powder Technology* 330 (2018), p. 284-291. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.02.006>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591018301189> (cf. p. xiii, 25-27, 44, 48, 62, 91).
- [13] R. I. JELDRES et al. « Population balance modelling to describe the particle aggregation process: A review ». In : *Powder Technology* 326 (2018), p. 190-207. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2017.12.033>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003259101730983X> (cf. p. 3).
- [14] T. BOZADA et al. « Sysrev: A FAIR Platform for Data Curation and Systematic Evidence Review ». In : *Frontiers in Artificial Intelligence* 4 (2021). ISSN : 2624-8212. DOI : 10.3389/frai.2021.685298. URL : <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2021.685298> (cf. p. 8).
- [15] L. THÉODON et al. « Morphological characterization of aggregates and agglomerates by image analysis: A systematic literature review ». In : *Powder Technology* 430 (2023), p. 119033. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.119033>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591023008161> (cf. p. 8, 10, 27, 30, 60, 61, 143, 163).
- [16] M. J. GRANT et al. « A typology of reviews: an analysis of 14 review types and associated methodologies ». In : *Health Information & Libraries Journal* 26.2 (2009), p. 91-108. DOI : <https://doi.org/10.1111/j.1471-1842.2009.00848.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1471-1842.2009.00848.x>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1471-1842.2009.00848.x> (cf. p. 8).

- [17] B. A. KITCHENHAM et al. *Guidelines for performing Systematic Literature Reviews in Software Engineering*. English. Rapp. tech. EBSE 2007-001. Keele University et Durham University Joint Report, juill. 2007. URL : https://www.elsevier.com/__data/promis_misc/525444systematicreviewsguide.pdf (cf. p. 8).
- [18] G. NICHOLS et al. « A Review of the Terms Agglomerate and Aggregate with a Recommendation for Nomenclature Used in Powder and Particle Characterization ». In : *Journal of Pharmaceutical Sciences* 91.10 (2002), p. 2103-2109. ISSN : 0022-3549. DOI : <https://doi.org/10.1002/jps.10191>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022354916310942> (cf. p. 9).
- [19] A. L. N. GUARIEIRO. *An Investigation on Morphology and Fractal Dimension of Diesel and Diesel-Biodiesel Soot Agglomerates*. en. Sous la dir. d'A. EIGUREN-FERNANDEZ et al. 2017 (cf. p. 11).
- [20] F. PATIÑO et al. « Soot primary particle sizing in a n-heptane doped methane/air laminar coflow diffusion flame by planar two-color TiRe-LII and TEM image analysis ». In : *Fuel* 266 (2020), p. 117030. ISSN : 0016-2361. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117030>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236120300259> (cf. p. 11).
- [21] F. EINAR KRUIS et al. « Characterization of Agglomerated and Aggregated Aerosol Particles Using Image Analysis ». In : *Particle & Particle Systems Characterization* 11.6 (1994), p. 426-435. DOI : <https://doi.org/10.1002/ppsc.19940110605>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/ppsc.19940110605>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ppsc.19940110605> (cf. p. 11, 13, 19).
- [22] S. WEINBRUCH et al. « The heterogeneous composition of working place aerosols in a nickel refinery: a transmission and scanning electron microscope study ». In : *J. Environ. Monit.* 4 (3 2002), p. 344-350. DOI : [10.1039/B110504N](https://doi.org/10.1039/B110504N). URL : <http://dx.doi.org/10.1039/B110504N> (cf. p. 11).
- [23] W. G. SHIN et al. « The effect of particle morphology on unipolar diffusion charging of nanoparticle agglomerates in the transition regime ». In : *Journal of Aerosol Science* 41.11 (2010), p. 975-986. ISSN : 0021-8502. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2010.07.004>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850210001539> (cf. p. 11).
- [24] J. MCCALLISTER et al. « Influence of agglomerate morphology on micro cold spray of Ag nanopowders ». In : *Journal of Aerosol Science* 151 (2021), p. 105648. ISSN : 0021-8502. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2020.105648>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002185022030135X> (cf. p. 11).
- [25] P. BORN et al. « Ligand-dominated temperature dependence of agglomeration kinetics and morphology in alkyl-thiol-coated gold nanoparticles ». In : *Phys. Rev. E* 87 (6 juin 2013), p. 062313. DOI : [10.1103/PhysRevE.87.062313](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.062313). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.062313> (cf. p. 11).
- [26] T. W. VASICEK et al. « Thermoresponsive nanoparticle agglomeration/aggregation in salt solutions: Dependence on graft density ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 506 (2017), p. 338-345. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.07.044>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979717308123> (cf. p. 11).

- [27] A. M. HORST et al. « Dispersion of TiO₂ Nanoparticle Agglomerates by Pseudomonas aeruginosa ». In : *Applied and Environmental Microbiology* 76.21 (2010), p. 7292-7298. DOI : 10.1128/AEM.00324-10. eprint : <https://journals.asm.org/doi/pdf/10.1128/AEM.00324-10>. URL : <https://journals.asm.org/doi/abs/10.1128/AEM.00324-10> (cf. p. 11).
- [28] V. FREYRE-FONSECA et al. « Morphological and Physicochemical Characterization of Agglomerates of Titanium Dioxide Nanoparticles in Cell Culture Media ». In : *Journal of Nanomaterials* 2016 (jan. 2016), p. 5937932. ISSN : 1687-4110. DOI : 10.1155/2016/5937932. URL : <https://doi.org/10.1155/2016/5937932> (cf. p. 11).
- [29] M. VUČAK et al. « Effect of precipitation conditions on the morphology of calcium carbonate: quantification of crystal shapes using image analysis ». In : *Powder Technology* 97.1 (1998), p. 1-5. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(97\)03375-5](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(97)03375-5). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591097033755> (cf. p. 11).
- [30] C. FRANCES et al. « Particle morphology of ground gibbsite in different grinding environments ». In : *International Journal of Mineral Processing* 61.1 (2001), p. 41-56. ISSN : 0301-7516. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0301-7516\(00\)00025-9](https://doi.org/10.1016/S0301-7516(00)00025-9). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301751600000259> (cf. p. 11).
- [31] M. M. APETRI et al. « Secondary Structure of α -Synuclein Oligomers: Characterization by Raman and Atomic Force Microscopy ». In : *Journal of Molecular Biology* 355.1 (2006), p. 63-71. ISSN : 0022-2836. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2005.10.071>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022283605013318> (cf. p. 11).
- [32] J. ADAMCIK et al. « Understanding amyloid aggregation by statistical analysis of atomic force microscopy images ». In : *Nature Nanotechnology* 5.6 (juin 2010), p. 423-428. ISSN : 1748-3395. DOI : 10.1038/nnano.2010.59. URL : <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.59> (cf. p. 11).
- [33] L. GUÉRIN et al. « Dynamics of aggregate size and shape properties under sequenced flocculation in a turbulent Taylor-Couette reactor ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 491 (2017), p. 167-178. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2016.12.042>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021979716310426> (cf. p. 12, 18, 57).
- [34] L. GUÉRIN et al. « Fractal dimensions and morphological characteristics of aggregates formed in different physico-chemical and mechanical flocculation environments ». In : *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 560 (2019), p. 213-222. ISSN : 0927-7757. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2018.10.017>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775718313153> (cf. p. 12, 18, 57).
- [35] I. ATALAR et al. « Effect of different binders on reconstitution behaviors and physical, structural, and morphological properties of fluidized bed agglomerated yoghurt powder ». In : *Drying Technology* 37.13 (2019), p. 1656-1664. DOI : 10.1080/07373937.2018.1529038. eprint : <https://doi.org/10.1080/07373937.2018.1529038>. URL : <https://doi.org/10.1080/07373937.2018.1529038> (cf. p. 12).

- [36] A. MEHLE et al. « In-line agglomeration degree estimation in fluidized bed pellet coating processes using visual imaging ». In : *International Journal of Pharmaceutics* 546.1 (2018), p. 78-85. ISSN : 0378-5173. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2018.05.024>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378517318303223> (cf. p. 12).
- [37] W. OMAR. « Experimental investigations of adipic acid agglomeration behavior under different operating conditions using image analysis technique QICPIC software ». In : *Particulate Science and Technology* 38.6 (2020), p. 740-746. DOI : 10.1080/02726351.2019.1620386. eprint : <https://doi.org/10.1080/02726351.2019.1620386> (cf. p. 12).
- [38] F. MAGGI et al. « Agglomeration in Solid Rocket Propellants: Novel Experimental and Modeling Methods ». In : 2011 (cf. p. 12).
- [39] B. JIN et al. « Three-dimensional spatial distributions of agglomerated particles on and near the burning surface of aluminized solid propellant using morphological digital in-line holography ». In : *Aerospace Science and Technology* 106 (2020), p. 106066. ISSN : 1270-9638. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ast.2020.106066>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1270963820307483> (cf. p. 12).
- [40] O. COHEN et al. « Agglomeration in Composite Propellants Containing Different Nano-Aluminum Powders ». In : *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* 47.9 (2022), e202100320. DOI : <https://doi.org/10.1002/prep.202100320>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/prep.202100320>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/prep.202100320> (cf. p. 12).
- [41] A.-F. BLANDIN et al. « Using In Situ Image Analysis to Study the Kinetics of Agglomeration in Suspension ». In : *Particle & Particle Systems Characterization* 17.1 (2000), p. 16-20. DOI : [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-4117\(200003\)17:1<16::AID-PPSC16>3.0.CO;2-I](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-4117(200003)17:1<16::AID-PPSC16>3.0.CO;2-I) (cf. p. 12).
- [42] A. BLANDIN et al. « Modelling of agglomeration in suspension: Application to salicylic acid microparticles ». In : *Powder Technology* 156.1 (2005), p. 19-33. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2005.05.049>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591005002792> (cf. p. 12).
- [43] C.-Y. KUO et al. « Morphological Study of Coarse Aggregates Using Image Analysis ». In : *Journal of Materials in Civil Engineering* 10.3 (1998), p. 135-142. DOI : [10.1061/\(ASCE\)0899-1561\(1998\)10:3\(135\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0899-1561(1998)10:3(135)) (cf. p. 12).
- [44] M. KAMANI et al. « Investigation of the changes in aggregate morphology during different aggregate abrasion/degradation tests using image analysis ». In : *Construction and Building Materials* 314 (2022), p. 125614. ISSN : 0950-0618. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.125614>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950061821033511> (cf. p. 12).
- [45] D. R. OCHSENBEIN et al. « Agglomeration of Needle-like Crystals in Suspension: I. Measurements ». In : *Crystal Growth & Design* 15.4 (avr. 2015), p. 1923-1933. ISSN : 1528-7483. DOI : [10.1021/acs.cgd.5b00094](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.5b00094) (cf. p. 12, 16).

- [46] Y. HUO et al. « Online Detection of Particle Agglomeration during Solution Crystallization by Microscopic Double-View Image Analysis ». In : *Industrial & Engineering Chemistry Research* 56.39 (oct. 2017), p. 11257-11269. ISSN : 0888-5885. DOI : 10.1021/acs.iecr.7b02439. URL : <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.7b02439> (cf. p. 12, 15).
- [47] H. MÜLLER et al. « From spores to fungal pellets: A new high-throughput image analysis highlights the structural development of *Aspergillus niger* ». In : *Biotechnology and Bioengineering* 119.8 (2022), p. 2182-2195. DOI : <https://doi.org/10.1002/bit.28124>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/bit.28124>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/bit.28124> (cf. p. 12).
- [48] A. LOWE et al. « Fragmentation dynamics of single agglomerate-to-wall impaction ». In : *Powder Technology* 378 (2021), p. 561-575. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2020.10.021>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591020309645> (cf. p. 13).
- [49] E. ZHALEHRAJABI et al. « Modelling of urea aggregation efficiency via particle tracking velocimetry in fluidized bed granulation ». In : *Chemical Engineering Science* 223 (2020), p. 115737. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2020.115737>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250920302694> (cf. p. 13).
- [50] D. BARTCZAK et al. « Changes in silica nanoparticles upon internalisation by cells: size, aggregation/agglomeration state, mass- and number-based concentrations ». In : *Toxicol. Res.* 7 (2 2018), p. 172-181. DOI : 10.1039/C7TX00323D. URL : <http://dx.doi.org/10.1039/C7TX00323D> (cf. p. 13).
- [51] S. TOHNO et al. « Shape Analysis of Particles by an Image Scanner and a Microcomputer: Application to Agglomerated Aerosol Particles [Translated][†] ». In : *KONA Powder and Particle Journal* 6 (1988), p. 2-14. DOI : 10.14356/kona.1988004 (cf. p. 13, 32).
- [52] N. OTSU. « A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms ». In : *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* 9.1 (1979), p. 62-66. DOI : 10.1109/TSMC.1979.4310076 (cf. p. 13, 40).
- [53] M. SEZGIN et al. « Survey over image thresholding techniques and quantitative performance evaluation ». In : *Journal of Electronic Imaging* 13.1 (2004), p. 146-165. DOI : 10.1117/1.1631315. URL : <https://doi.org/10.1117/1.1631315> (cf. p. 13).
- [54] E. V. ERSHOV et al. « Methods of handling of in-bulk agglomeration layer image representation for granulometric composition assessment ». In : *Pattern Recognition and Image Analysis* 19.1 (mars 2009), p. 103-105. ISSN : 1555-6212. DOI : 10.1134/S1054661809010180. URL : <https://doi.org/10.1134/S1054661809010180> (cf. p. 13).
- [55] M.-N. PONS et al. « Morphological analysis of pharmaceutical powders ». In : *Powder Technology* 128.2 (2002). 3rd French Colloquium on Powder Science & Technology, p. 276-286. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(02\)00177-8](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(02)00177-8). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591002001778> (cf. p. 13).

- [56] B. RÜHLE et al. « Workflow towards automated segmentation of agglomerated, non-spherical particles from electron microscopy images using artificial neural networks ». In : *Scientific Reports* 11.1 (mars 2021), p. 4942. ISSN : 2045-2322. DOI : 10.1038/s41598-021-84287-6. URL : <https://doi.org/10.1038/s41598-021-84287-6> (cf. p. 14, 15, 143).
- [57] J. LINS et al. « Potential of Deep Learning Methods for Deep Level Particle Characterization in Crystallization ». In : *Applied Sciences* 12.5 (2022). ISSN : 2076-3417. DOI : 10.3390/app12052465. URL : <https://www.mdpi.com/2076-3417/12/5/2465> (cf. p. 14, 15).
- [58] J. BALS et al. « Deep learning for automated size and shape analysis of nanoparticles in scanning electron microscopy ». In : *RSC Adv.* 13 (5 2023), p. 2795-2802. DOI : 10.1039/D2RA07812K. URL : <http://dx.doi.org/10.1039/D2RA07812K> (cf. p. 15).
- [59] M. ESTER et al. « A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise ». In : *Proceedings of the Second International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. KDD'96. Portland, Oregon : AAAI Press, 1996, p. 226-231 (cf. p. 15).
- [60] E. M. ÅLANDER et al. « Characterization of paracetamol agglomerates by image analysis and strength measurement ». In : *Powder Technology* 130.1 (2003), p. 298-306. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(02\)00208-5](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(02)00208-5). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591002002085> (cf. p. 15).
- [61] T. LIU et al. « An Investigation of Practical Approximate Nearest Neighbor Algorithms ». In : *Advances in Neural Information Processing Systems*. Sous la dir. de L. SAUL et al. T. 17. MIT Press, 2004. URL : https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2004/file/1102a326d5f7c9e04fc3c89d0ede88c9-Paper.pdf (cf. p. 15).
- [62] P.-J. DE TEMMERMAN et al. « Quantitative characterization of agglomerates and aggregates of pyrogenic and precipitated amorphous silica nanomaterials by transmission electron microscopy ». In : *Journal of Nanobiotechnology* 10.1 (juin 2012), p. 24. ISSN : 1477-3155. DOI : 10.1186/1477-3155-10-24. URL : <https://doi.org/10.1186/1477-3155-10-24> (cf. p. 15).
- [63] N. FARIA et al. « Quantification of the morphology of sucrose crystals by image analysis ». In : *Powder Technology* 133.1 (2003), p. 54-67. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0032-5910\(03\)00078-0](https://doi.org/10.1016/S0032-5910(03)00078-0). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591003000780> (cf. p. 16).
- [64] B. G. BABIN et al. « Discriminant Analysis: An Overview ». In : *International Encyclopedia of Statistical Science*. Sous la dir. de M. LOVRIC. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011, p. 388-390. ISBN : 978-3-642-04898-2. DOI : 10.1007/978-3-642-04898-2_212. URL : https://doi.org/10.1007/978-3-642-04898-2_212 (cf. p. 16).
- [65] F. ROS et al. « Agglomerates processing on in-flight images of granular products ». In : *Vision, Sensors, and Control for Automated Manufacturing Systems*. Sous la dir. de S. S. BREIDENTHAL et al. T. 2063. International Society for Optics et Photonics. SPIE, 1993, p. 120-128. DOI : 10.1117/12.164960. URL : <https://doi.org/10.1117/12.164960> (cf. p. 16).

- [66] B. BERNARD-MICHEL et al. « Classification of Crystal Shape Using Fourier Descriptors and Mathematical Morphology ». In : *Particle & Particle Systems Characterization* 14.4 (1997), p. 193-200. DOI : <https://doi.org/10.1002/ppsc.199700041>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/ppsc.199700041>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ppsc.199700041> (cf. p. 16, 42).
- [67] M. FREI et al. « Fully automated primary particle size analysis of agglomerates on transmission electron microscopy images via artificial neural networks ». In : *Powder Technology* 332 (2018), p. 120-130. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.03.032>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591018302249> (cf. p. 16).
- [68] Y. HUO et al. « In-situ crystal morphology identification using imaging analysis with application to the L-glutamic acid crystallization ». In : *Chemical Engineering Science* 148 (2016), p. 126-139. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.03.039>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925091630152X> (cf. p. 16).
- [69] R. FERNANDEZ MARTINEZ et al. « Use of decision tree models based on evolutionary algorithms for the morphological classification of reinforcing nano-particle aggregates ». In : *Computational Materials Science* 92 (2014), p. 102-113. ISSN : 0927-0256. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.05.038>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025614003565> (cf. p. 16, 17).
- [70] P. A. VIKHAR. « Evolutionary algorithms: A critical review and its future prospects ». In : *2016 International Conference on Global Trends in Signal Processing, Information Computing and Communication (ICGTSPICC)*. 2016, p. 261-265. DOI : [10.1109/ICGTSPICC.2016.7955308](https://doi.org/10.1109/ICGTSPICC.2016.7955308) (cf. p. 17).
- [71] J. LÓPEZ-DE-URALDE et al. « Automatic Morphological Categorisation of Carbon Black Nano-aggregates ». In : *Database and Expert Systems Applications*. Sous la dir. de P. G. BRINGAS et al. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2010, p. 185-193. ISBN : 978-3-642-15251-1 (cf. p. 17).
- [72] B. B. MACHADO et al. « A complex network approach for nanoparticle agglomeration analysis in nanoscale images ». In : *Journal of Nanoparticle Research* 19.2 (fév. 2017), p. 65. ISSN : 1572-896X. DOI : [10.1007/s11051-017-3760-7](https://doi.org/10.1007/s11051-017-3760-7). URL : <https://doi.org/10.1007/s11051-017-3760-7> (cf. p. 17).
- [73] S. MATSUTANI et al. *Measuring Agglomeration of Agglomerated Particles Pictures*. 2013. arXiv : 1302.5150 [cs.CE] (cf. p. 17).
- [74] M. PETRERE. « The variance of the index (R) of aggregation of Clark and Evans ». In : *Oecologia* 68.1 (déc. 1985), p. 158-159. ISSN : 1432-1939. DOI : [10.1007/BF00379489](https://doi.org/10.1007/BF00379489). URL : <https://doi.org/10.1007/BF00379489> (cf. p. 17).
- [75] C. JIN et al. « 3D Quantification for Aggregate Morphology Using Surface Discretization Based on Solid Modeling ». In : *Journal of Materials in Civil Engineering* 31.7 (2019), p. 04019123. DOI : [10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002766](https://doi.org/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002766) (cf. p. 17).

- [76] R. PASHMINEHAZAR et al. « Three dimensional characterization of morphology and internal structure of soft material agglomerates produced in spray fluidized bed by X-ray tomography ». In : *Powder Technology* 300 (2016). 7th International Granulation Workshop 2015: Granulation across the length scales, p. 46-60. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2016.03.053>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591016301565> (cf. p. 17).
- [77] L. ZHAO et al. « A digitalized 2D particle database for statistical shape analysis and discrete modeling of rock aggregate ». In : *Construction and Building Materials* 247 (2020), p. 117906. ISSN : 0950-0618. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2019.117906>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0950061819333598> (cf. p. 17, 65).
- [78] Q. LIAO et al. « Brownian Dynamics Simulation of Film Formation of Mixed Polymer Latex in the Water Evaporation Stage ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 227.1 (2000), p. 84-94. ISSN : 0021-9797. DOI : <https://doi.org/10.1006/jcis.2000.6867>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002197970096867X> (cf. p. 17).
- [79] F. MARTÍNEZ-PEDRERO et al. « Structure and stability of aggregates formed by electrical double-layered magnetic particles ». In : *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 306.1 (2007). INTERFACES AGAINST POLLUTION 2006, p. 158-165. ISSN : 0927-7757. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2007.03.029>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775707002531> (cf. p. 18).
- [80] S. TANG et al. « Characterising latex particles and fractal aggregates using image analysis ». In : *Colloid and Polymer Science* 277.4 (avr. 1999), p. 325-333. ISSN : 1435-1536. DOI : [10.1007/s003960050388](https://doi.org/10.1007/s003960050388). URL : <https://doi.org/10.1007/s003960050388> (cf. p. 18).
- [81] J. C. RUSS et al. *Practical Stereology*. Practical Stereology vol. 1. Kluwer Academic/Plenum, 2000. ISBN : 9780306464768. URL : https://books.google.fr/books?id=i7sT_nauz5gC (cf. p. 18).
- [82] H. J. G. GUNDERSEN et al. « The efficiency of systematic sampling in stereology and its prediction* ». In : *Journal of Microscopy* 147.3 (1987), p. 229-263. DOI : <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1987.tb02837.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1365-2818.1987.tb02837.x>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-2818.1987.tb02837.x> (cf. p. 18).
- [83] L. M. CRUZ-ORIVE. « Unbiased Stereology: Three-Dimensional Measurement in Microscopy. By C. V. HOWARD and M. G. REID. (Pp. xviii+246; illustrated; £19.95 paperback; ISBN 1 85996 071 5.) Oxford: BIOS. 1998. » In : *Journal of Anatomy* 194.1 (1999), p. 153-157. DOI : <https://doi.org/10.1046/j.1469-7580.1999.194101536.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1046/j.1469-7580.1999.194101536.x>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1046/j.1469-7580.1999.194101536.x> (cf. p. 18).

- [84] S. A. SALTIKOV. « The Determination of the Size Distribution of Particles in an Opaque Material from a Measurement of the Size Distribution of Their Sections ». In : *Stereology*. Sous la dir. de H. ELIAS. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1967, p. 163-173. ISBN : 978-3-642-88260-9 (cf. p. 18).
- [85] Y.-H. XU et al. « An improved stereologic method for three-dimensional estimation of particle size distribution from observations in two dimensions and its application ». In : *Computer Methods and Programs in Biomedicine* 72.1 (2003), p. 1-20. ISSN : 0169-2607. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0169-2607\(02\)00115-3](https://doi.org/10.1016/S0169-2607(02)00115-3). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169260702001153> (cf. p. 18).
- [86] D. L. SAHAGIAN et al. « 3D particle size distributions from 2D observations: stereology for natural applications ». In : *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 84.3 (1998), p. 173-196. ISSN : 0377-0273. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0377-0273\(98\)00043-2](https://doi.org/10.1016/S0377-0273(98)00043-2). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377027398000432> (cf. p. 18).
- [87] R. JAGNOW et al. « Stereological techniques for solid textures ». In : *ACM Trans. Graph.* 23.3 (août 2004), p. 329-335. ISSN : 0730-0301. DOI : 10.1145/1015706.1015724. URL : <https://doi.org/10.1145/1015706.1015724> (cf. p. 18).
- [88] M. D. HIGGINS. « Measurement of crystal size distributions ». In : *American Mineralogist* 85.9 (sept. 2000), p. 1105-1116. ISSN : 0003-004X. DOI : 10.2138/am-2000-8-901. eprint : <https://pubs.geoscienceworld.org/msa/ammin/article-pdf/85/9/1105/3604344/gsammin.85.9.1105.pdf>. URL : <https://doi.org/10.2138/am-2000-8-901> (cf. p. 18).
- [89] E. E. UNDERWOOD. « The stereology of projected images ». In : *Journal of Microscopy* 95.1 (1972), p. 25-44. DOI : <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.1972.tb03709.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1365-2818.1972.tb03709.x>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-2818.1972.tb03709.x> (cf. p. 19).
- [90] A.-L. CAUCHY. *Oeuvres complètes : sér., t. 1. mémoires extraits du journal de l'école polytechnique*. Oeuvres complètes. Gauthier-Villars, 1908 (cf. p. 19).
- [91] L. FERET. *La Grosseur des grains des matières pulvérulentes*. Eidgen. Materialprüfungsanstalt a. d. Eidgen. Technischen Hochschule. URL : <https://books.google.fr/books?id=Qf-MPgAACAAJ> (cf. p. 19).
- [92] A. BOTTEMULLER et al. « Granulometric Analysis of Maltodextrin Particles Observed by Scanning Electron Microscopy ». In : *2023 IEEE 13th International Conference on Pattern Recognition Systems (ICPRS)*. 2023, p. 1-7. DOI : 10.1109/ICPRS58416.2023.10179067 (cf. p. 19).
- [93] B. PRESLES et al. « Volume estimation of 3D particles with known convex shapes from its projected areas ». In : *2010 2nd International Conference on Image Processing Theory, Tools and Applications*. 2010, p. 399-404. DOI : 10.1109/IPTA.2010.5586763 (cf. p. 19, 60).
- [94] B. PRESLES et al. « Size and shape estimation of 3-D convex objects from their 2-D projections: application to crystallization processes ». In : *Journal of Microscopy* 248.2 (2012), p. 140-155. DOI : <https://doi.org/10.1111/j.1365-2818.2012.03658.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1365-2818.2012.03658.x>.

- 1365–2818.2012.03658.x. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-2818.2012.03658.x> (cf. p. 19).
- [95] G. VICKERS. « The projected areas of ellipsoids and cylinders ». In : *Powder Technology* 86.2 (1996), p. 195-200. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(95\)03049-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(95)03049-2). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032591095030492> (cf. p. 19, 42).
- [96] M. de LANGLARD et al. « Estimation of 3D geometrical properties of spheroid-like particle systems using projection images ». In : *2020 10th International Symposium on Signal, Image, Video and Communications (ISIVC)*. 2021, p. 1-6. DOI : <10.1109/ISIVC49222.2021.9487552> (cf. p. 19, 60, 69, 78, 92).
- [97] M. de LANGLARD et al. « Bayesian Inference of a Parametric Random Spheroid from its Orthogonal Projections ». In : *Methodology and Computing in Applied Probability* 23.2 (juin 2021), p. 549-567. ISSN : 1573-7713. DOI : <10.1007/s11009-020-09806-w> (cf. p. 19, 20, 42, 60, 78).
- [98] S. OUTAL et al. « A new method for estimating the 3D size-distribution curve of fragmented rocks out of 2D images ». In : *Image Analysis and Stereology* 27.2 (mai 2011), p. 97-105. DOI : <10.5566/ias.v27.p97-105>. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/835> (cf. p. 20).
- [99] R. KING. « Determination of the distribution of size of irregularly shaped particles from measurements on sections or projected areas ». In : *Powder Technology* 32.1 (1982), p. 87-100. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(82\)85009-2](https://doi.org/10.1016/0032-5910(82)85009-2). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032591082850092> (cf. p. 20).
- [100] G. VALLEBUONA et al. « A procedure to estimate weight particle distributions from area measurements ». In : *Minerals Engineering* 16.4 (2003), p. 323-329. ISSN : 0892-6875. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0892-6875\(03\)00014-1](https://doi.org/10.1016/S0892-6875(03)00014-1). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0892687503000141> (cf. p. 20).
- [101] R. KING. « Measurement of particle size distribution by image analyser ». In : *Powder Technology* 39.2 (1984), p. 279-289. ISSN : 0032-5910. DOI : [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(84\)85045-7](https://doi.org/10.1016/0032-5910(84)85045-7). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0032591084850457> (cf. p. 20).
- [102] C. LIN et al. « Plant-site evaluations of the OPSA system for on-line particle size measurement from moving belt conveyors ». In : *Minerals Engineering* 13.8 (2000), p. 897-909. ISSN : 0892-6875. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0892-6875\(00\)00077-7](https://doi.org/10.1016/S0892-6875(00)00077-7). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0892687500000777> (cf. p. 20).
- [103] S. AL-THYABAT et al. « An improved estimation of size distribution from particle profile measurements ». In : *Powder Technology* 166.3 (2006), p. 152-160. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2006.05.008>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591006001677> (cf. p. 20).
- [104] J. KEMENY. *Practical technique for determining the size distribution of blasted benches, waste dumps and heap leach sites*. English (US). 1994 (cf. p. 20).

- [105] N. H. MAERZ. « Reconstructing 3-D Block Size Distributions from 2-D Measurements on Sections ». In : *Measurement of Blast Fragmentation*. 1st Edition. Routledge, 1996, p. 5. ISBN : 9780203747919 (cf. p. 20).
- [106] J. SCHLEIFER et al. « Fragmentation Assessment using the FragScan System: Quality of a Blast ». In : *Fragblast* 6.3-4 (2002), p. 321-331. DOI : 10.1076/frag.6.3.321.14049. eprint : <https://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1076/frag.6.3.321.14049>. URL : <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1076/frag.6.3.321.14049> (cf. p. 20).
- [107] M. KEMPKES et al. « Measurement of particle size and shape by FBRM and in situ microscopy ». In : *Chemical Engineering Science* 63.19 (2008). Model-Based Experimental Analysis, p. 4656-4675. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2007.10.030>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250907008159> (cf. p. 20).
- [108] J. EGGLERS et al. « Measurement of size and shape distributions of particles through image analysis ». In : *Chemical Engineering Science* 63.22 (2008), p. 5513-5521. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2008.08.007>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925090800417X> (cf. p. 20).
- [109] M. KEMPKES et al. « Measurement of 3D particle size distributions by stereoscopic imaging ». In : *Chemical Engineering Science* 65.4 (2010), p. 1362-1373. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2009.10.008>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250909007106> (cf. p. 20).
- [110] P. LARSEN et al. « Model-based object recognition to measure crystal size and shape distributions from in situ video images ». In : *Chemical Engineering Science* 62.5 (2007), p. 1430-1441. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2006.11.018>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250906007135> (cf. p. 20).
- [111] M. de LANGARD et al. « A 3D stochastic model for geometrical characterization of particles in two-phase flow applications ». In : *Image Analysis and Stereology* 37.3 (2018), p. 233-247. DOI : 10.5566/ias.1942. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/1942> (cf. p. 20, 42, 60).
- [112] K. DIA et al. « Retrieving mean volumetric properties of multiphase flows from 2D images: A new approach combining deep learning algorithms and 3D modelling ». In : *Chemical Engineering Science* 279 (2023), p. 118933. ISSN : 0009-2509. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.118933>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000925092300489X> (cf. p. 20).
- [113] R. K. CHAKRABARTY et al. « FracMAP: A user-interactive package for performing simulation and orientation-specific morphology analysis of fractal-like solid nano-agglomerates ». In : *Computer Physics Communications* 180.8 (2009), p. 1376-1381. ISSN : 0010-4655. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.01.026>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465509000411> (cf. p. 21).

- [114] K. KADOTA et al. « Aggregation modeling of calcium carbonate particles by Monte Carlo simulation ». In : *Journal of Nanoparticle Research* 13.12 (déc. 2011), p. 7209-7218. ISSN : 1572-896X. DOI : 10.1007/s11051-011-0635-1. URL : <https://doi.org/10.1007/s11051-011-0635-1> (cf. p. 21).
- [115] H.-J. SCHMID et al. « Monte Carlo simulation of aggregate morphology for simultaneous coagulation and sintering ». In : *Journal of Nanoparticle Research* 6.6 (déc. 2004), p. 613-626. ISSN : 1572-896X. DOI : 10.1007/s11051-004-2161-x. URL : <https://doi.org/10.1007/s11051-004-2161-x> (cf. p. 22).
- [116] R. THOUY et al. « A cluster-cluster aggregation model with tunable fractal dimension ». In : *Journal of Physics A: Mathematical and General* 27.9 (mai 1994), p. 2953. DOI : 10.1088/0305-4470/27/9/012. URL : <https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/27/9/012> (cf. p. 22).
- [117] P. MEAKIN. « Diffusion-limited aggregation in three dimensions: Results from a new cluster-cluster aggregation model ». In : *Journal of Colloid and Interface Science* 102.2 (1984), p. 491-504. ISSN : 0021-9797. DOI : [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(84\)90252-2](https://doi.org/10.1016/0021-9797(84)90252-2). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021979784902522> (cf. p. 22).
- [118] T. A. WITTEN et al. « Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon ». In : *Phys. Rev. Lett.* 47 (19 nov. 1981), p. 1400-1403. DOI : 10.1103/PhysRevLett.47.1400. URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.1400> (cf. p. 22, 43).
- [119] S. G. ALVES et al. « Cluster-cluster aggregation with particle replication and chemotaxy: a simple model for the growth of animal cells in culture ». In : *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2010 (2010), P09012. URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:118724631> (cf. p. 22).
- [120] J. R. NICOLÁS-CARLOCK et al. « Fractality à la carte: a general particle aggregation model ». In : *Scientific Reports* 6.1 (jan. 2016), p. 19505. ISSN : 2045-2322. DOI : 10.1038/srep19505. URL : <https://doi.org/10.1038/srep19505> (cf. p. 22).
- [121] Z. DONG et al. « Nanostructure characterization of asphalt-aggregate interface through molecular dynamics simulation and atomic force microscopy ». In : *Fuel* 189 (2017), p. 155-163. ISSN : 0016-2361. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.10.077>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236116310390> (cf. p. 22).
- [122] A. L. ZHELEZNYAKOVA. « A cost-effective computational approach based on molecular dynamics for generating 3D packs of irregularly-shaped grains in a container of complex geometry ». In : *Powder Technology* 394 (2021), p. 403-423. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2021.08.070>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591021007579> (cf. p. 23).
- [123] M. MOREAUD et al. « Multi-scale stochastic morphological models for 3D complex microstructures ». In : *2018 17th Workshop on Information Optics (WIO)*. 2018, p. 1-3. DOI : 10.1109/WIO.2018.8643455 (cf. p. 23).
- [124] M. MOREAUD et al. « Simulation of Large Aggregate Particles System With a New Morphological Model ». In : *Image Analysis and Stereology* 40.2 (2021), p. 71-84. DOI : 10.5566/ias.2488. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/2488> (cf. p. 23, 27, 50, 51).

- [125] D. JEULIN. « Some Dense Random Packings Generated by the Dead Leaves Model ». In : *Image Analysis and Stereology* 38.1 (avr. 2019), p. 3-13. DOI : 10.5566/ias.2081. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/2081> (cf. p. 24).
- [126] M. WOZNIAK et al. « Comparison of methods to derive morphological parameters of multi-fractal samples of particle aggregates from TEM images ». In : *Journal of Aerosol Science* 47 (2012), p. 12-26. ISSN : 0021-8502. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2011.12.008>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850211001984> (cf. p. 24).
- [127] L. ZHANG et al. « Computational Analysis of Thermal Conductivity of Asphalt Mixture Using Virtually Generated Three-Dimensional Microstructure ». In : *Journal of Materials in Civil Engineering* 29.12 (2017), p. 04017234. DOI : 10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002081. eprint : [https://ascelibrary.org/doi/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002081](https://ascelibrary.org/doi/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002081). URL : [https://ascelibrary.org/doi/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0002081](https://ascelibrary.org/doi/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0002081) (cf. p. 24, 91, 92).
- [128] G. MOLLON et al. « Fourier–Voronoi-based generation of realistic samples for discrete modelling of granular materials ». In : *Granular Matter* 14.5 (sept. 2012), p. 621-638. ISSN : 1434-7636. DOI : 10.1007/s10035-012-0356-x. URL : <https://doi.org/10.1007/s10035-012-0356-x> (cf. p. 24).
- [129] C. B. BARBER et al. « The quickhull algorithm for convex hulls ». In : *ACM Trans. Math. Softw.* 22.4 (déc. 1996), p. 469-483. ISSN : 0098-3500. DOI : 10.1145/235815.235821. URL : <https://doi.org/10.1145/235815.235821> (cf. p. 25).
- [130] L. THEODON et al. « GRAPE: A Stochastic Geometrical 3D Model for Aggregates of Particles With Tunable 2D Morphological Projected Properties ». In : *Image Analysis & Stereology* 42.1 (2023), p. 1-16. ISSN : 1854-5165. DOI : 10.5566/ias.2875. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/2875> (cf. p. 27).
- [131] L. THÉODON et al. « A stochastic model based on Gaussian random fields to characterize the morphology of granular objects ». In : *Pattern Recognition* 149 (2024), p. 110255. ISSN : 0031-3203. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2024.110255>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031320324000062> (cf. p. 27, 44).
- [132] L. THÉODON et al. « VOX-STORM: A stochastic 3D model based on a dual voxel-mesh architecture for the morphological characterization of aggregates ». In : *Powder Technology* 444 (2024), p. 119983. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2024.119983>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591024006260> (cf. p. 27).
- [133] K. FALCONER. « Hausdorff Measure and Dimension ». In : *Fractal Geometry*. John Wiley & Sons, Ltd, 2003. Chap. 2, p. 27-38. ISBN : 9780470013854. DOI : <https://doi.org/10.1002/0470013850.ch2>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/0470013850.ch2>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/0470013850.ch2> (cf. p. 31).
- [134] A. HAMIEH et al. « Temperature influence on MBS latex aggregate morphology ». In : *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 676 (2023), p. 132139. ISSN : 0927-7757. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2023.132139>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775723012232> (cf. p. 31, 57, 87, 102, 107).

- [135] M. da MOTTA et al. « Automated monitoring of activated sludge in a pilot plant using image analysis ». en. In : *Water Sci Technol* 43.7 (2001), p. 91-96 (cf. p. 32).
- [136] B. J. FLORIO et al. « The use of the perimeter-area method to calculate the fractal dimension of aggregates ». In : *Powder Technology* 343 (2019), p. 551-559. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.11.030>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591018309343> (cf. p. 33).
- [137] M. SOOS et al. « Aggregate Breakup in a Contracting Nozzle ». In : *Langmuir* 26.1 (jan. 2010), p. 10-18. ISSN : 0743-7463. DOI : 10.1021/la903982n. URL : <https://doi.org/10.1021/la903982n> (cf. p. 34).
- [138] C. M. SORENSEN. « Light Scattering by Fractal Aggregates: A Review ». In : *Aerosol Science and Technology* 35.2 (2001), p. 648-687. DOI : 10.1080/02786820117868. eprint : <https://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/02786820117868>. URL : <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/02786820117868> (cf. p. 34, 108).
- [139] E. PIRARD et al. « Robustness of Planar Shape Descriptors of Particles ». English. In : *Proceedings Mathematical Geology Congress*. Toronto, Canada, 2005 (cf. p. 35).
- [140] Z. KULPA. « Area and perimeter measurement of blobs in discrete binary pictures ». In : *Computer Graphics and Image Processing* 6.5 (1977), p. 434-451. ISSN : 0146-664X. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0146-664X\(77\)80021-X](https://doi.org/10.1016/S0146-664X(77)80021-X). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0146664X7780021X> (cf. p. 35).
- [141] B. BRADEN. « The Surveyor's Area Formula ». In : *The College Mathematics Journal* 17.4 (1986), p. 326-337. DOI : 10.1080/07468342.1986.11972974. eprint : <https://doi.org/10.1080/07468342.1986.11972974>. URL : <https://doi.org/10.1080/07468342.1986.11972974> (cf. p. 36).
- [142] L. YANG et al. « Mva'94 Iapr Workshop on Machine Vision Applications Methods to Estimate Areas and Perimeters of Blob-like Objects: a Comparison ». In : URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:6365147> (cf. p. 37).
- [143] G. LEHMANN et al. « Efficient N-Dimensional Surface Estimation Using Crofton Formula and Run-Length Encoding ». In : (fév. 2012). DOI : 10.54294/wdu86d (cf. p. 38).
- [144] E. SPANIER. *Algebraic Topology*. Springer New York, 2012, p. 481. ISBN : 9781468493221. URL : <https://books.google.fr/books?id=iKx3BQAAQBAJ> (cf. p. 38).
- [145] D. BRADLEY et al. « Adaptive Thresholding using the Integral Image ». In : *Journal of Graphics Tools* 12.2 (2007), p. 13-21. DOI : 10.1080/2151237X.2007.10129236. eprint : <https://doi.org/10.1080/2151237X.2007.10129236>. URL : <https://doi.org/10.1080/2151237X.2007.10129236> (cf. p. 40, 143).
- [146] O. RONNEBERGER et al. « U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation ». In : *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2015*. Sous la dir. de N. NAVAB et al. Cham : Springer International Publishing, 2015, p. 234-241. ISBN : 978-3-319-24574-4 (cf. p. 41, 143).
- [147] K. HE et al. *Mask R-CNN*. 2018. arXiv : 1703.06870 [cs.CV] (cf. p. 41, 132, 143).
- [148] A. KIRILLOV et al. *Segment Anything*. 2023. arXiv : 2304.02643 [cs.CV] (cf. p. 41, 143).

- [149] G. D. SCOTT et al. « The density of random close packing of spheres ». In : *Journal of Physics D: Applied Physics* 2.6 (juin 1969), p. 863. DOI : 10.1088/0022-3727/2/6/311. URL : <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/2/6/311> (cf. p. 43).
- [150] B. D. LUBACHEVSKY et al. « Geometric properties of random disk packings ». In : *Journal of Statistical Physics* 60.5 (sept. 1990), p. 561-583. ISSN : 1572-9613. DOI : 10.1007/BF01025983. URL : <https://doi.org/10.1007/BF01025983> (cf. p. 43).
- [151] D. P. LANDAU et al. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 4^e éd. Cambridge University Press, 2014 (cf. p. 44).
- [152] A. MEHTA et al. « A sequential addition and migration method for generating microstructures of short fibers with prescribed length distribution ». In : *Computational Mechanics* 70.4 (oct. 2022), p. 829-851. ISSN : 1432-0924. DOI : 10.1007/s00466-022-02201-x. URL : <https://doi.org/10.1007/s00466-022-02201-x> (cf. p. 44).
- [153] C. SOHLER. « Generating random star-shaped polygons ». In : *Canadian Conference on Computational Geometry*. 1999. URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:9867154> (cf. p. 45).
- [154] P. ADLER et al. « Flow in simulated porous media ». In : *International Journal of Multiphase Flow* 16.4 (1990), p. 691-712. ISSN : 0301-9322. DOI : [https://doi.org/10.1016/0301-9322\(90\)90025-E](https://doi.org/10.1016/0301-9322(90)90025-E). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030193229090025E> (cf. p. 45).
- [155] Z. LIANG et al. « A reconstruction technique for three-dimensional porous media using image analysis and Fourier transforms ». In : *Journal of Petroleum Science and Engineering* 21.3 (1998), p. 273-283. ISSN : 0920-4105. DOI : [https://doi.org/10.1016/S0920-4105\(98\)00077-1](https://doi.org/10.1016/S0920-4105(98)00077-1). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920410598000771> (cf. p. 45).
- [156] A. LANG et al. « Fast simulation of Gaussian random fields ». In : 17.3 (2011), p. 195-214. DOI : doi:10.1515/mcma.2011.009. URL : <https://doi.org/10.1515/mcma.2011.009> (cf. p. 45, 61).
- [157] M. UNSER. « Splines: a perfect fit for signal and image processing ». In : *IEEE Signal Processing Magazine* 16.6 (1999), p. 22-38. DOI : 10.1109/79.799930 (cf. p. 47).
- [158] H. MOUSSAOUI et al. « Stochastic geometrical modeling of solid oxide cells electrodes validated on 3D reconstructions ». In : *Computational Materials Science* 143 (2018), p. 262-276. ISSN : 0927-0256. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.11.015>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025617306432> (cf. p. 47).
- [159] R. KINDERMANN et al. *Markov random fields and their applications*. T. 1. American Mathematical Society, 1980. ISBN : 978-0-8218-5001-5. DOI : <http://dx.doi.org/10.1090/conm/001> (cf. p. 47).
- [160] R. REISS. *A Course on Point Processes*. Springer series in statistics. Springer-Verlag, 1993. ISBN : 9780387979243. URL : <https://books.google.fr/books?id=kRTvAAAAMAAJ> (cf. p. 47).

- [161] G. J. HETTINGA et al. « Noisy gradient meshes: Augmenting gradient meshes with procedural noise ». In : *Graphical Models* 103 (2019), p. 101024. ISSN : 1524-0703. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.gmod.2019.101024>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1524070319300153> (cf. p. 48, 61).
- [162] J. B. SPJUT et al. « Hardware-Accelerated Gradient Noise for Graphics ». In : *Proceedings of the 19th ACM Great Lakes Symposium on VLSI*. GLSVLSI '09. Boston Area, MA, USA : Association for Computing Machinery, 2009, p. 457-462. ISBN : 9781605585222. DOI : 10.1145/1531542.1531647. URL : <https://doi.org/10.1145/1531542.1531647> (cf. p. 48, 61).
- [163] L. THEODON et al. « Estimating the Parameters of a Stochastic Geometrical Model for Multiphase Flow Images Using Local Measures ». In : *Image Analysis and Stereology* 40.3 (2021), p. 115-125. DOI : 10.5566/ias.2638. URL : <https://www.ias-iss.org/ojs/IAS/article/view/2638> (cf. p. 51).
- [164] S. KIRKPATRICK et al. « Optimization by Simulated Annealing ». In : *Science* 220.4598 (1983), p. 671-680. DOI : 10.1126/science.220.4598.671. eprint : <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.220.4598.671>. URL : <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.220.4598.671> (cf. p. 59).
- [165] F. P. KUHL et al. « Elliptic Fourier features of a closed contour ». In : *Computer Graphics and Image Processing* 18.3 (1982), p. 236-258. ISSN : 0146-664X. DOI : [https://doi.org/10.1016/0146-664X\(82\)90034-X](https://doi.org/10.1016/0146-664X(82)90034-X). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0146664X8290034X> (cf. p. 60, 73).
- [166] J. S. CRAMPTON. « Elliptic Fourier shape analysis of fossil bivalves: some practical considerations ». In : *Lethaia* 28.2 (1995), p. 179-186. DOI : <https://doi.org/10.1111/j.1502-3931.1995.tb01611.x>. eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/j.1502-3931.1995.tb01611.x>. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1502-3931.1995.tb01611.x> (cf. p. 60, 73, 74).
- [167] R. BELLMAN. *Adaptive Control Processes: A Guided Tour*. Princeton University Press, 1961. ISBN : 9780691079011. URL : <http://www.jstor.org/stable/j.ctt183ph6v> (visité le 02/05/2024) (cf. p. 62).
- [168] E. GARBOCZI et al. « 3D analytical mathematical models of random star-shape particles via a combination of X-ray computed microtomography and spherical harmonic analysis ». In : *Advanced Powder Technology* 28.2 (2017), p. 325-339. ISSN : 0921-8831. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.apt.2016.10.014>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921883116302953> (cf. p. 62).
- [169] T. UEDA. « Particle Shape Generation using Spherical Harmonic Modeling and Principal Component Analysis and Application of the Discrete Element Method ». In : *Journal of the Society of Powder Technology, Japan* 60.3 (mars 2023), p. 143-148. ISSN : 0386-6157. DOI : 10.4164/sptj.60.143. URL : <https://cir.nii.ac.jp/crid/1390577441946904064> (cf. p. 62).
- [170] K. GIANNIS et al. « Predicting 3D particles shapes based on 2D images by using convolutional neural network ». In : *Powder Technology* 432 (2024), p. 119122. ISSN : 0032-5910. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2023.119122>. URL :

- <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0032591023009051> (cf. p. 65, 118, 119, 155, 160).
- [171] J. KARCH. « Improving on Adjusted R-Squared ». In : *Collabra: Psychology* 6.1 (sept. 2020), p. 45. ISSN : 2474-7394. DOI : 10.1525/collabra.343. eprint : <https://online.ucpress.edu/collabra/article-pdf/6/1/45/483406/343-4856-1-pb.pdf>. URL : <https://doi.org/10.1525/collabra.343> (cf. p. 71, 87).
- [172] C. COSTA et al. « Quantitative evaluation of Tarocco sweet orange fruit shape using optoelectronic elliptic Fourier based analysis ». In : *Postharvest Biology and Technology* 54.1 (2009), p. 38-47. ISSN : 0925-5214. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.postharvbio.2009.05.001>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925521409000921> (cf. p. 73).
- [173] J. KENNEDY et al. « Particle swarm optimization ». In : *Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks*. T. 4. 1995, 1942-1948 vol.4. DOI : 10.1109/ICNN.1995.488968 (cf. p. 74).
- [174] S. HAN et al. « A random algorithm for 3D modeling of solid particles considering elongation, flatness, sphericity, and convexity ». In : *Computational Particle Mechanics* 10.1 (fév. 2023), p. 19-44. ISSN : 2196-4386. DOI : 10.1007/s40571-022-00475-9. URL : <https://doi.org/10.1007/s40571-022-00475-9> (cf. p. 78).
- [175] H. EDELSBRUNNER et al. « On the shape of a set of points in the plane ». In : *IEEE Transactions on Information Theory* 29.4 (1983), p. 551-559. DOI : 10.1109/TIT.1983.1056714 (cf. p. 79, 80).
- [176] P. SOILLE. *Morphological Image Analysis: Principles and Applications*. Springer Berlin Heidelberg, 2013. ISBN : 9783662050880. URL : <https://books.google.fr/books?id=ZFzxCAAAQBAJ> (cf. p. 81).
- [177] G. LEACH. « Improving Worst-Case Optimal Delaunay Triangulation Algorithms ». In : 1992. URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:18356714> (cf. p. 82, 111).
- [178] A. B. TSYBAKOV. *Introduction to Nonparametric Estimation*. 1st. Springer Publishing Company, Incorporated, 2008. ISBN : 0387790519 (cf. p. 90).
- [179] CGTRADER. *Blackberry 001 3D Model*. Accessed: 2024-06-29. 2024. URL : <https://www.cgtrader.com/3d-models/food/fruit/blackberry-001> (cf. p. 98).
- [180] K. P. DAO et al. « 3D Fourier transformation light scattering for reconstructing extend angled resolved light scattering of individual particles ». In : 2021. URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:231846707> (cf. p. 108).
- [181] P. W. BARBER et al. *Light Scattering by Particles: Computational Methods*. World Scientific, 1990. DOI : 10.1142/0784. eprint : <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/0784>. URL : <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/0784> (cf. p. 108).
- [182] E. LOZANO et al. « An efficient algorithm to generate random sphere packs in arbitrary domains ». In : *Computers & Mathematics with Applications* 71.8 (2016), p. 1586-1601. ISSN : 0898-1221. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2016.02.032>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122116300864> (cf. p. 111).

- [183] K. FU et al. « Single image 3D object reconstruction based on deep learning: A review ». In : *Multimedia Tools and Applications* 80 (2020), p. 463-498. URL : <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:225273174> (cf. p. 119).
- [184] I. J. GOODFELLOW et al. *Generative Adversarial Networks*. 2014. arXiv : 1406.2661 [stat.ML] (cf. p. 120).
- [185] A. K. DUBEY et al. « Comparative Study of Convolution Neural Network's Relu and Leaky-Relu Activation Functions ». In : *Applications of Computing, Automation and Wireless Systems in Electrical Engineering*. Sous la dir. de S. MISHRA et al. Singapore : Springer Singapore, 2019, p. 873-880. ISBN : 978-981-13-6772-4 (cf. p. 121).
- [186] S. IOFFE et al. « Batch Normalization: Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift ». In : *CoRR* abs/1502.03167 (2015). arXiv : 1502.03167. URL : <http://arxiv.org/abs/1502.03167> (cf. p. 121).
- [187] D. P. KINGMA et al. *Adam: A Method for Stochastic Optimization*. 2017. arXiv : 1412.6980 [cs.LG] (cf. p. 125).
- [188] W. E. LORENSEN et al. « Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm ». In : *Proceedings of the 14th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*. SIGGRAPH '87. New York, NY, USA : Association for Computing Machinery, 1987, p. 163-169. ISBN : 0897912276. DOI : 10.1145/37401.37422. URL : <https://doi.org/10.1145/37401.37422> (cf. p. 130).
- [189] O. SORKINE et al. « Laplacian surface editing ». In : *Proceedings of the 2004 Eurographics/ACM SIGGRAPH Symposium on Geometry Processing*. SGP '04. Nice, France : Association for Computing Machinery, 2004, p. 175-184. ISBN : 3905673134. DOI : 10.1145/1057432.1057456. URL : <https://doi.org/10.1145/1057432.1057456> (cf. p. 130).
- [190] K. HE et al. *Deep Residual Learning for Image Recognition*. 2015. arXiv : 1512.03385 [cs.CV] (cf. p. 132).
- [191] J. CHEN et al. « Automatic Dynamic Texture Segmentation Using Local Descriptors and Optical Flow ». In : *IEEE Transactions on Image Processing* 22.1 (2013), p. 326-339. DOI : 10.1109/TIP.2012.2210234 (cf. p. 143).
- [192] X. HU et al. « Online measurement and segmentation algorithm of coarse aggregate based on deep learning and experimental comparison ». In : *Construction and Building Materials* 327 (2022), p. 127033. ISSN : 0950-0618. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2022.127033> (cf. p. 143).
- [193] K. HE et al. « Mask R-CNN ». In : *2017 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*. 2017, p. 2980-2988. DOI : 10.1109/ICCV.2017.322 (cf. p. 143).
- [194] G. JOCHER et al. *Ultralytics YOLO*. Version 8.0.0. Jan. 2023. URL : <https://github.com/ultralytics/ultralytics> (cf. p. 143).
- [195] B. D. RIPLEY. « Stochastic Geometry and its Applications ». In : *Journal of the Royal Statistical Society Series A* 151.1 (jan. 1988), p. 239-240. DOI : 10.2307/2982216. URL : <https://ideas.repec.org/a/bla/jorssa/v151y1988i1p239-240.html> (cf. p. 145).

- [196] M. HEUSEL et al. « GANs Trained by a Two Time-Scale Update Rule Converge to a Nash Equilibrium ». In : *CoRR* abs/1706.08500 (2017). arXiv : 1706.08500. URL : <http://arxiv.org/abs/1706.08500> (cf. p. 145).
- [197] D. DOWSON et al. « The Fréchet distance between multivariate normal distributions ». In : *Journal of Multivariate Analysis* 12.3 (1982), p. 450-455. ISSN : 0047-259X. DOI : [https://doi.org/10.1016/0047-259X\(82\)90077-X](https://doi.org/10.1016/0047-259X(82)90077-X) (cf. p. 145).
- [198] C. SZEGEDY et al. « Rethinking the Inception Architecture for Computer Vision ». In : *CoRR* abs/1512.00567 (2015). arXiv : 1512.00567. URL : <http://arxiv.org/abs/1512.00567> (cf. p. 145).
- [199] K. HE et al. « Deep residual learning for image recognition ». In : *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*. 2016, p. 770-778 (cf. p. 148).
- [200] T.-Y. LIN et al. « Microsoft COCO: Common Objects in Context ». In : *Computer Vision – ECCV 2014*. Sous la dir. de D. FLEET et al. Cham : Springer International Publishing, 2014, p. 740-755 (cf. p. 149).
- [201] T. FAWCETT. « An introduction to ROC analysis ». In : *Pattern Recognition Letters* 27.8 (2006). ROC Analysis in Pattern Recognition, p. 861-874. ISSN : 0167-8655. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2005.10.010> (cf. p. 149).
- [202] W. GU et al. « A review on 2D instance segmentation based on deep neural networks ». In : *Image and Vision Computing* 120 (2022), p. 104401. ISSN : 0262-8856. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.imavis.2022.104401> (cf. p. 149).
- [203] Y. TIAN et al. « Recent advances on loss functions in deep learning for computer vision ». In : *Neurocomputing* 497 (2022), p. 129-158. ISSN : 0925-2312. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2022.04.127> (cf. p. 151).
- [204] Z. CHEN et al. *V3D: Video Diffusion Models are Effective 3D Generators*. 2024. arXiv : 2403.06738 (cf. p. 157).
- [205] P. T. JUNLIN HAN Filippou Kokkinos. « VFusion3D: Learning Scalable 3D Generative Models from Video Diffusion Models ». In : *arXiv preprint arXiv:2403.12034* (2024) (cf. p. 157).
- [206] P. DHARIWAL et al. « Diffusion Models Beat GANs on Image Synthesis ». In : *Advances in Neural Information Processing Systems*. Sous la dir. de M. RANZATO et al. T. 34. Curran Associates, Inc., 2021, p. 8780-8794. URL : https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2021/file/49ad23d1ec9fa4bd8d77d02681df5cfa-Paper.pdf (cf. p. 157).
- [207] B. FIGLIUZZI et al. « Modelling the Microstructure and the Viscoelastic Behaviour of Carbon Black Filled Rubber Materials from 3D Simulations ». In : *Technische Mechanik - European Journal of Engineering Mechanics* 36.1-2 (juill. 2019), p. 32-56. DOI : 10.24352/UB.OVGU-2017-009. URL : <https://journals.ub.ovgu.de/index.php/techmech/article/view/690> (cf. p. 161).
- [208] BIERMÉ, HERMINE et al. « Estimation of anisotropic Gaussian fields through Radon transform ». In : *ESAIM: PS* 12 (2008), p. 30-50. DOI : 10.1051/ps:2007031. URL : <https://doi.org/10.1051/ps:2007031> (cf. p. 161).
- [209] A. ESTRADE et al. « Anisotropic Gaussian wave models ». In : *ALEA : Latin American Journal of Probability and Mathematical Statistics* XVII (2020). URL : <https://hal.science/hal-01745706> (cf. p. 161).

- [210] J. YON et al. « From monomers to agglomerates: A generalized model for characterizing the morphology of fractal-like clusters ». In : *Journal of Aerosol Science* 151 (2021), p. 105628. ISSN : 0021-8502. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2020.105628>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021850220301166> (cf. p. 161).
- [211] L. THÉODON et al. « A stochastic 3D model based on random graphs to characterize the morphology of compact aggregates using image analysis ». In : *2024 IEEE 12th International Symposium on Signal, Image, Video and Communications (ISIVC)*. 2024, p. 1-6. DOI : <10.1109/ISIVC61350.2024.10577874> (cf. p. 162).
- [212] S. PHON-AMNUAISUK et al. « Visual-Based Positioning and Pose Estimation ». In : *Neural Information Processing*. Sous la dir. de H. YANG et al. Cham : Springer International Publishing, 2020, p. 597-605. ISBN : 978-3-030-63820-7 (cf. p. 162).
- [213] B. R. KENT. « Meshes, models and textures ». In : *3D Scientific Visualization with Blender®*. 2053-2571. Morgan & Claypool Publishers, 2015, 3-1 to 3-9. ISBN : 978-1-6270-5612-0. DOI : <10.1088/978-1-6270-5612-0ch3>. URL : <https://dx.doi.org/10.1088/978-1-6270-5612-0ch3> (cf. p. 168).
- [214] J. S. BRAUCHART et al. « Distributing many points on spheres: Minimal energy and designs ». In : *Journal of Complexity* 31.3 (2015). Oberwolfach 2013, p. 293-326. ISSN : 0885-064X. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.jco.2015.02.003>. URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0885064X15000205> (cf. p. 168).
- [215] B. KEINERT et al. « Spherical Fibonacci Mapping ». In : *ACM Trans. Graph.* 34.6 (nov. 2015). ISSN : 0730-0301. DOI : <10.1145/2816795.2818131>. URL : <https://doi.org/10.1145/2816795.2818131> (cf. p. 168).
- [216] Q. DU et al. « Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms ». In : *SIAM Review* 41.4 (1999), p. 637-676. DOI : <10.1137/S0036144599352836>. eprint : <https://doi.org/10.1137/S0036144599352836>. URL : <https://doi.org/10.1137/S0036144599352836> (cf. p. 168).
- [217] J. M. AUGENBAUM et al. « On the construction of the Voronoi mesh on a sphere ». In : *Journal of Computational Physics* 59.2 (1985), p. 177-192. ISSN : 0021-9991. DOI : [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(85\)90140-8](https://doi.org/10.1016/0021-9991(85)90140-8). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999185901408> (cf. p. 168).

École Nationale Supérieure des Mines
de Saint-Étienne

NNT: 2024EMSEM049

Author: Léo THÉODON

Title: Morphometric characterization of particle aggregates using image analysis and stochastic geometry

Speciality: Image and form sciences

Keywords: Stochastic Geometry, Modeling, Aggregates, Image Analysis, Pattern Recognition

Abstract

This thesis is part of the MORPHING project funded by the French National Research Agency (ANR) and addresses an industrial issue raised by the company ARKEMA. It aims to develop methods for characterizing the 3D morphology of latex nanoparticle aggregates in an industrial context, using 2D in-situ images. Indeed, the morphological properties of these aggregates strongly influence the quality of the final products and the efficiency of the processes, but can only be estimated through imaging under production conditions.

The thesis tackles this problem from two complementary angles: a scientific approach aimed at developing 3D stochastic geometric models exploiting 2D information from image analysis, and an industrial approach targeting near real-time implementation. Several contributions are made, including three original stochastic geometric models allowing the generation of 3D aggregates from 2D morphometric measurements, as well as a deep learning generative model to directly estimate 3D morphology from 2D images.

These approaches are validated numerically and experimentally on in-situ and ex-situ images. The results show that the purely stochastic geometric approach offers slightly higher accuracy, while the deep learning approach is more suitable for an industrial context due to its speed and simplicity of implementation. Areas for improvement are identified regarding the quality of experimental data and the optimization of models.

This thesis thus opens new perspectives for the 3D morphological characterization of aggregate populations through 2D image analysis, by proposing efficient methods applicable to industrial conditions. Its results could benefit many processes where morphological control of products is a key challenge.

NNT : 2024EMSEM049

Auteur : Léo THÉODON

Titre : Caractérisation morphométrique d'agrégats de particules par analyse d'image et géométrie stochastique

Spécialité : Sciences des Images et des Formes

Mots-Clefs : Géométrie Stochastique, Modélisation, Agrégats, Analyse d'image, Reconnaissance de motifs

Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le cadre du projet MORPHING financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) et d'une problématique industrielle posée par l'entreprise ARKEMA. Elle vise à développer des méthodes pour caractériser la morphologie 3D d'agrégats de nanoparticules de latex dans un contexte industriel, à partir d'images 2D in-situ. En effet, les propriétés morphologiques de ces agrégats influencent fortement la qualité des produits finis et l'efficacité des procédés, mais ne peuvent être estimées que par imagerie en conditions de production.

La thèse aborde cette problématique sous deux angles complémentaires : une approche scientifique visant à développer des modèles géométriques stochastiques 3D exploitant les informations 2D issues de l'analyse d'image, et une approche industrielle ciblant une mise en œuvre en quasi temps réel. Plusieurs contributions sont apportées, notamment trois modèles géométriques stochastiques originaux permettant de générer des agrégats 3D à partir de mesures morphométriques 2D, ainsi qu'un modèle génératif d'apprentissage profond pour estimer directement la morphologie 3D à partir d'images 2D.

Ces approches sont validées numériquement et expérimentalement sur des images in-situ et ex-situ. Les résultats montrent que l'approche purement géométrique stochastique offre une précision légèrement supérieure, tandis que l'approche par apprentissage profond est plus adaptée à un contexte industriel de par sa rapidité et sa simplicité de mise en œuvre. Des pistes d'amélioration sont identifiées concernant la qualité des données expérimentales et l'optimisation des modèles.

Cette thèse ouvre ainsi de nouvelles perspectives pour la caractérisation morphologique 3D de populations d'agrégats par analyse d'images 2D, en proposant des méthodes efficaces applicables aux conditions industrielles. Ses résultats pourront bénéficier à de nombreux procédés dont la maîtrise morphologique des produits est un enjeu clé.