

Méthodes de machine learning pour la prédiction de trajets de fissures dans les matériaux cimentaires sur la base de descripteurs morphologiques locaux.

K. Pele¹,
J. Baccou^{2,4}, L. Daridon^{3,4}, T. Le Gouic¹, J. Liandrat¹, Y. Monerie^{3,4}, F. Perales^{2,4}

¹ Ecole Centrale de Marseille,

² IRSN/PSN/SEMIA

³ LMGC, UNIVERSITE MONTPELLIER, CNRS (UMR 5508)

⁴ MIST (IRSN-CNRS-UM)

Résumé — La construction d'un matériau numérique s'appuie principalement sur des descripteurs morphologiques permettant de générer des échantillons statistiquement semblables, a minima sur le plan géométrique. Deux microstructures ayant les mêmes descripteurs morphologiques peuvent cependant présenter des *comportements* mécaniques différents. On anticipe aisément que ces différences s'accroissent avec les non linéarités, notamment celles associées aux mécanismes de rupture et de fissuration. Les estimations des taux de fuite à travers le béton des enceintes de confinement des centrales nucléaires sont liées à leur perméabilité, à la tortuosité des chemins de fissures qui peuvent y apparaître. Pour améliorer ces estimations sur des microstructures numériques, nous proposons dans ce travail une approche qui combine descripteurs morphologiques et modèle de prédiction de fissure pour évaluer la similarité entre deux microstructures.

Mots clés — Microstructure mécanique, Fissuration, Descripteurs morphologiques, Machine Learning.

1 Introduction

Ce sujet s'inscrit dans le cadre de l'étude du vieillissement des bétons. Les propriétés thermo-chimio-mécaniques du béton peuvent évoluer au cours du temps, en particulier avec le développement de pathologies telles que les réactions de gonflement interne. Les conséquences de ces évolutions sont délicates à estimer, notamment en termes de fissuration. La nature très hétérogène du béton (granulats de tailles et d'orientations diverses, mortier poreux) rend son étude complexe : sa représentation et ses modélisations numériques aident à sérier les mécanismes les plus significatifs.

Le but est ici de générer un béton numérique représentatif du matériau réel du point de vue de la tortuosité des chemins de fissuration. Cette représentativité se base actuellement majoritairement sur des descripteurs morphologiques de type moments à un ou deux points d'appuis : comme les fractions volumique ou les covariogrammes. Il s'avère cependant, que pour la fissuration du béton, deux microstructures semblables au sens de ces descripteurs peuvent conduire à des faciès de rupture différents (voir FIGURE 1)

Un développement de descripteurs morphologiques spécifiques adaptés aux problèmes de fissuration est nécessaire. Ceux proposés dans ce travail intègrent des informations locales sur la microstructure telles que l'orientation des granulats et la distance aux plus proches voisins dans un cône d'écrantage. Des modèles de prédiction du trajet de fissure basés sur ces descripteurs sont développés. La prédiction de la tortuosité des trajets de fissure sert notamment de critère de validation. Cette étude permet en outre de disposer d'un outil d'estimation rapide — sans calcul de champs — du trajet de fissure.

2 Béton numérique

Covariance spatiale Afin d'obtenir un béton numérique équivalent à un béton réel, l'IRSN a proposé un protocole de génération de microstructures équivalentes et les outils associés sont implémentés dans le logiciel MORCO. Cette *équivalence* est ici à comprendre au sens des moments à un et deux points

d'appui de la fonction caractéristique des phases, notamment au sens de la covariance spatiale $C(x, x+h)$ qui représente, la probabilité qu'à un point x situé dans une phase donnée A , e.g un granulat, corresponde un point $x+h$ dans la même phase [4] :

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

L'extraction par analyse d'image de cette covariance spatiale fournit des paramètres permettant de générer, pour une forme donnée de granulat, des bétons numériques possédant notamment : la même fraction volumique des phases matricielles et inclusionnaires, la même distance de répulsion entre les granulats et la même surface spécifique de granulats (voir FIGURE 1).

Limitations des descripteurs à deux points d'appui La FIGURE 1 présente deux échantillons microstructuraux avec leur faciès de rupture et leur covariogramme selon trois directions différentes. Ces deux microstructures sont statistiquement semblables au sens du covariogramme (voir FIGURE 2) mais leur faciès de rupture diffèrent.

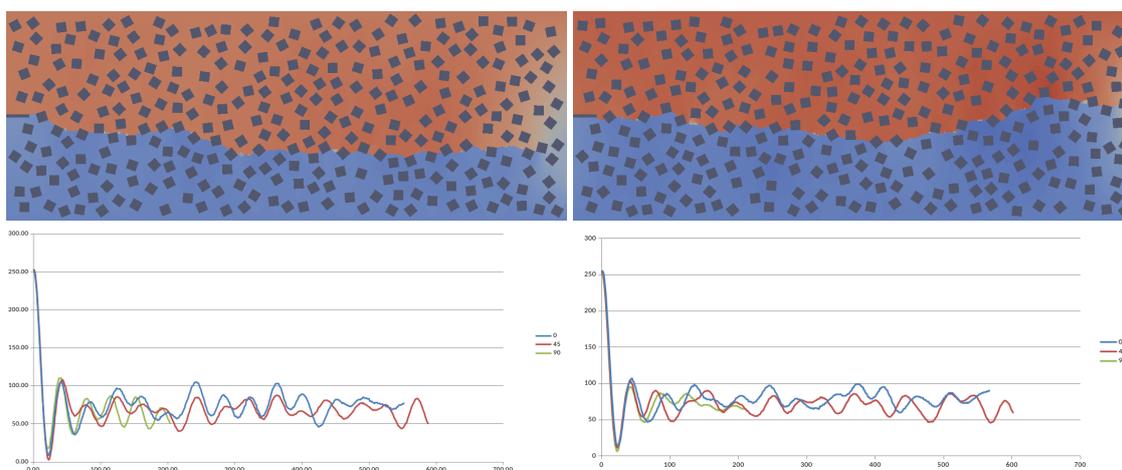


FIGURE 1 – Béton numérique pré-entailé chargé en mode I : inclusions carrées distribuées aléatoirement en espace et en orientation, sans recouvrement, environ 300 inclusions et 25% de fraction volumique. À gauche : microstructure "a". À droite : microstructure "b". En haut : microstructures et état fissuré. En bas : covariogrammes dans trois directions.

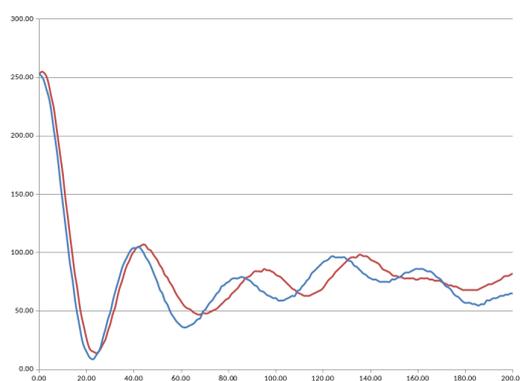


FIGURE 2 – Covariogrammes combinés des microstructures "a" et "b" dans la direction principale de propagation de la fissure.

Nous proposons par la suite une approche afin d'évaluer de façon pertinente la similarité des deux microstructures vis-à-vis de la fissuration. Le point de départ est l'enrichissement des descripteurs par des informations locales associées à la microstructure.

3 Descripteurs morphologiques pour la fissuration locale

La configuration locale de la microstructure influe sur le trajet de fissuration. Dans le cadre d'une propagation de fissure macroscopiquement en mode I, la présence de défauts tels que les granulats génère trois types de perturbations : (i) une hétérogénéité des champs mécaniques locaux, (ii) un accroissement des zones de faiblesses (interfaces inclusions/matrice) qui constituent localement des zones privilégiées de fissuration, (iii) des zones à contourner pour la fissure.

Le type (i) est essentiellement mécanique et ne saurait être pris en compte par des descripteurs morphologiques (pas de prise en compte des concentrations de contraintes par exemple). Les types (ii) et (iii) sont de nature plus géométrique : minimiser l'énergie de rupture en favorisant le passage de la fissure par les interfaces inclusions/matrice et contourner les granulats tout en respectant la direction macroscopique de mode I (supposée connue). Ces deux derniers types peuvent être caractérisés par deux descripteurs locaux : les angles et les distances aux n grains les plus proches dans un cône autour de la direction de mode I, chaque granulat écrantant ceux situés en aval de la fissure.

Ces descripteurs sont évalués sur un ensemble de points décrivant un contour polygonal des granulats ; des trajectoires simulées de fissure (ces simulations ne sont pas détaillées ici) servent de base d'apprentissage pour l'identification d'un modèle de prédiction de fissure.

Distances et angles aux plus proches voisins dans un cône d'écrantage Le contour de la microstructure granulaire est discrétisée par des polygones ; les sommets de ces polygones constituent la *microstructure granulaire discrète*. Ici, pour des inclusions carrées, la discrétisation est effectuée en polygones à 16 faces régulières, soit 16 sommets (5 points par arête), voir FIGURE 3. Pour chaque point X_0 de la microstructure discrète par lequel passe la fissure simulée numériquement (point marqué d'une flèche rouge sur la FIGURE 3, à gauche), un cône d'écrantage est défini comme un secteur angulaire autour de la direction de propagation en mode I \vec{u} . Dans ce cône d'écrantage, chaque granulat écrante également ceux qui sont en aval de la fissure par rapport au point courant X_0 . Les points de la microstructure discrète situés dans le cône sont les points X candidats à la fissuration (marqués d'une croix blanche sur la FIGURE 3). Pour chaque point candidat X est défini :

- la distance euclidienne $d(X_0, X) = \|\vec{X_0X}\|_2$
- l'angle par rapport à la direction de propagation en mode I : $\theta(X_0, X) = \frac{\arccos(\frac{\langle \vec{X_0X}, \vec{u} \rangle}{\|\vec{X_0X}\| \|\vec{u}\|})}{\|\vec{u}\|}$
- l'appartenance au même granulat : $\varepsilon(X_0, X) = \mathbf{1}_{g_0}(X) = \begin{cases} 1 & \text{si } X \in g_0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

où g_0 est le granulat d'appartenance du point X_0 . Une version normalisée est introduite en fonction des valeurs maximales de distance (d_{max}) et d'angle (θ_{max}) dans le cône d'écrantage : pour la distance euclidienne $d_{norm}(X_0, X) = d(X_0, X)/d_{max}$, pour l'angle par rapport à la direction de traction : $\theta_{norm}(X_0, X) = \theta(X_0, X)/\theta_{max}$.

Les deux premiers descripteurs, distance d et angle θ , visent à modéliser la propagation de la fissure dans la matrice. Le descripteur "appartenance au même granulat" ε favorise l'apprentissage de la notion de "contournement" des granulats.

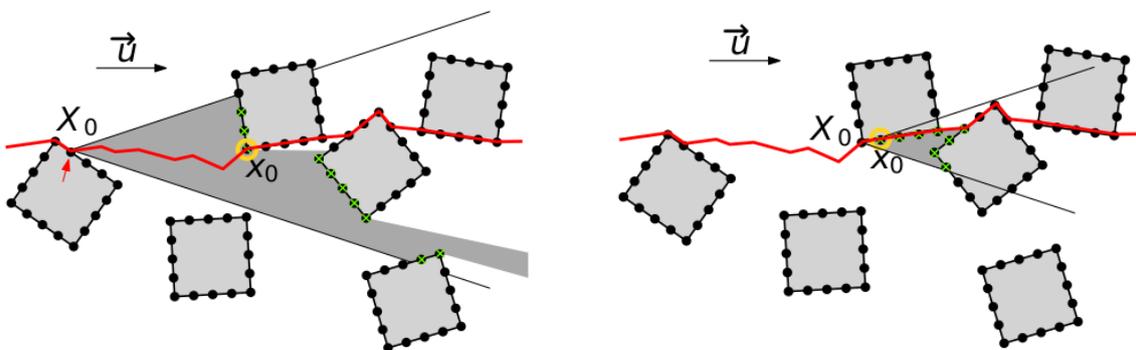


FIGURE 3 – Cône d'écrantage et construction de l'ensemble d'apprentissage. Fissure simulée en rouge, cône d'écrantage en gris foncé, points candidats avec une croix verte, point possédant le label "rejoint par la fissure" avec un rond jaune.

Base d'apprentissage L'ensemble d'apprentissage est constitué des descripteurs collectés sur 17 microstructures d'environ 300 granulats dont la fissuration a été réalisée via le logiciel Xper (eXtended cohesive zone models and PERiodic homogenization) qui permet de simuler la rupture dynamique de matériaux hétérogènes [5]. Les microstructures de la FIGURE 1 sont deux microstructures de cette base d'apprentissage.

Pour chaque point X_0 de la microstructure discrète par lequel passe la fissure, les candidats dans le cône d'écrantage sont labellisés : soit "rejoint par la fissure" si la fissure est passé effectivement par ce point, soit "non rejoint par la fissure" sinon. Cette labellisation est réalisée de proche en proche avec l'avancée de la fissure. Sur la FIGURE 3 à gauche, le point entouré d'un cercle jaune porte le label "rejoint par la fissure", les autres points candidats avec une croix verte portent le label "non rejoint par la fissure". En poursuivant avec le point "rejoint par la fissure", un nouveau cône d'écrantage est défini, une nouvelle collection de candidats et une nouvelle labellisation "rejoint" ou "non rejoint" par la fissure est déterminée (voir FIGURE 3 à droite).

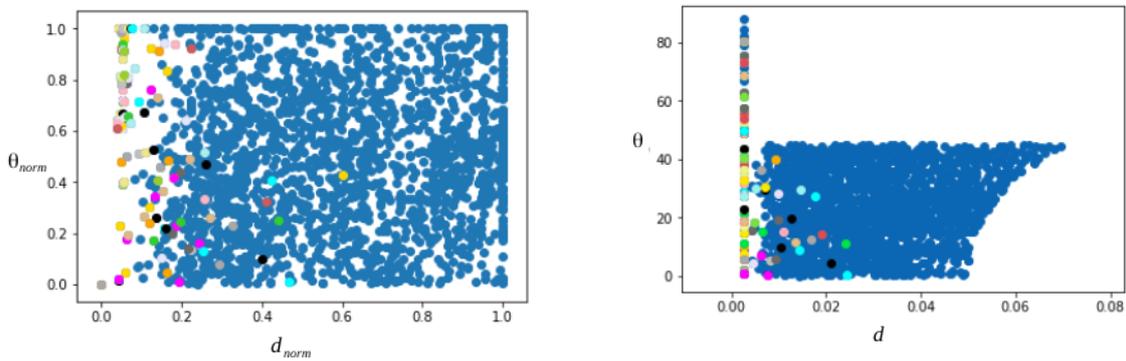


FIGURE 4 – Labels "rejoint par la fissure" (en couleur) ou "non rejoint par la fissure" (en bleu) en fonction des deux descripteurs (distance, angle). A gauche, version normalisée ; à droite, version non normalisée.

Chaque triplet de descripteurs (d, θ, ε) — distance, angle, appartenance au granulat — obtenu pour l'ensemble des microstructures porte donc un label "rejoint" (chemin effectif de fissure) ou "non rejoint" (éventualités de chemin de fissure). En comparant les labels, la FIGURE 4 indique que le trajet de fissure s'effectue préférentiellement en direction des points les plus proches de sa pointe : la fissure tend à parcourir le moins de matrice possible, pour atteindre le granulat le plus proche dont l'interface est plus faible que la matrice. La fissure est amenée à choisir des points dont l'angle par rapport au sens de l'effort est élevé (jusqu'à 90 degrés parfois voir FIGURE 4), ce phénomène est dû au fait que la fissure privilégie l'interface, impliquant de contourner des granulats. Deux limitations essentielles pour cet ensemble d'apprentissage sont identifiées : 1/ le descripteur d'angle θ est sensible à l'angle choisi a priori pour le cône d'apprentissage, 2/ les résultats obtenus ne valent que pour des microstructures où l'interface granulats/matrice est plus faible que celle de la matrice, elle-même plus faible que celle des granulats.

Néanmoins, l'hypothèse est formulée que cet ensemble de descripteurs traduit correctement le comportement de la fissure, incorporant par exemple de manière indirecte les informations liées aux perturbations locales des champs mécaniques. Cet ensemble d'apprentissage est :

- soit considéré d'un seul bloc, sans utilisation spécifique de la notion d'"appartenance au même granulat" : l'ensemble des descripteurs est conservé sans distinction $(d_i, \theta_i, \varepsilon_i)_{i \in I_{granulat} \cup I_{matrice}}$
- soit considéré en deux blocs, en séparant les descripteurs relatifs à "appartenance au même granulat" $(d_i, \theta_i)_{i \in I_{granulat}}$ de ceux dans la matrice $(d_i, \theta_i)_{i \in I_{matrice}}$.

4 Modèle d'apprentissage pour la prédiction de trajet de fissuration

On cherche à déterminer la loi associée à la suite des points portant le label "rejoint" pour pouvoir prédire la propagation de la fissure dans une nouvelle configuration microstructurale. L'exactitude des chemins de fissure prédits sert de critère de validation pour la pertinence de ces descripteurs.

Deux modèles probabilistes Chaque fissure est modélisée par la suite (finie) de points (x_0, \dots, x_n) par laquelle elle passe : l'ensemble des points associés au label "rejoint" pour une microstructure donnée. Chaque point x_i de la fissure est associé au couple (d_i, θ_i) et correspond au i ème couple du vecteur aléatoire $X_i = (D_i, A_i)$ où D_i et A_i sont les deux vecteurs aléatoires associés respectivement à la distance et à l'angle. On suppose ici que les deux variables aléatoires D_i et A_i sont indépendantes et suivent chacune une loi exponentielle.

Modèle 1 : ce modèle intègre trois descripteurs et l'ensemble d'apprentissage d'un seul bloc. La densité de probabilité s'écrit :

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

Le vecteur Λ des paramètres à identifier a trois composantes $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$.

Modèle 2 : ce modèle intègre les deux premiers descripteurs morphologiques et l'identification de ces paramètres se base sur l'ensemble d'apprentissage en deux blocs. La densité prend la forme :

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

Le vecteur Λ des paramètres à identifier a quatre composantes : (λ_1, λ_2) pour le comportement sur les granulats et (λ_3, λ_4) pour le comportement dans la matrice.

Une estimation par maximum de vraisemblance [3] permet d'identifier Λ .

Une régression par SVM La méthode SVM (Support Vector Regression) est employée comme technique de régression. La fonction de régression est modélisée par un hyperplan linéaire :

$$y = w_1 d + w_2 \theta + w_3 \varepsilon + b \quad (1)$$

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

Prédiction Pour toute nouvelle microstructure considérée, une représentation discrète est réalisée. L'un de ces points est choisi comme point d'amorçage de la fissure (à l'une des extrémités de la microstructure). Dans un cône d'écrantage associé à cette pointe de fissure, le triplet de descripteurs (d, θ, ε) est évalué pour chaque point candidat à la propagation de fissure. Le prochain point de pointe de fissure est défini comme celui dont les valeurs des descripteurs morphologiques maximisent la fonction du modèle choisi. L'opération est répétée itérativement avec comme nouvelle pointe de fissure le dernier point retenu. Un trajet de fissuration probable est ainsi prédit.

5 Résultats numériques

Pour évaluer les performances des modèles proposés, la tortuosité des chemins prédits est choisie comme critère de validation. Il s'agit de la longueur du chemin parcouru ramenée à celle en ligne droite reliant le premier point de la fissure au dernier point.

Les paramètres Λ sont déterminés pour chaque modèle (statistique mono-bloc, statistique à deux blocs, SVM) sur l'ensemble d'apprentissage correspondant à tous les points de toutes les microstructures pris indépendamment. Dit autrement, la base d'apprentissage est purement locale et ne prend en compte qu'un point et son suivant sur la fissure sans tenir compte de l'*historique* du trajet de fissure.

Il n'y a donc pas de biais à utiliser chaque modèle pour tenter de prédire un trajet de fissure complet pour une microstructure donnée et la tortuosité associée. Cette prédiction est faite pour chacune des 17 microstructures. Les tortuosités obtenues sont comparées aux tortuosités calculées par le calcul à champs complets (FIGURE 5).

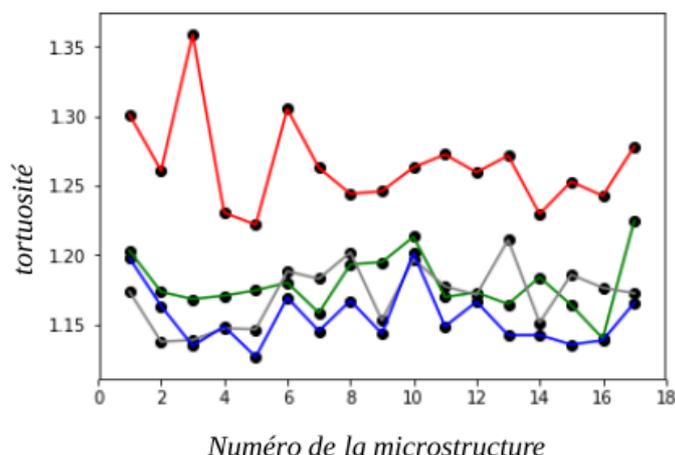


FIGURE 5 – Tortuosité des fissures prédites par un modèle d'apprentissage géométrique (en rouge : méthode statistique mono-bloc, en bleu : méthode statistique à deux blocs, en gris : SVM) comparées à celles estimées par un calcul à champs complets aux éléments finis cohésifs-volumiques (en vert).

Le modèle statistique mono-bloc n'intègre pas assez d'informations microstructurales pour être pertinent. En revanche, le modèle statistique à deux blocs séparant fissure aux interfaces et fissure dans la matrice et le modèle SVM semblent être des pistes intéressantes pour prédire (à hauteur des incertitudes microstructurales) la tortuosité apparente des chemins de fissure dans ces milieux inclusionnaires à interface faible.

En revanche, lorsque l'on s'intéresse aux résultats visuels des trajets de fissure des prédictions, le modèle statistique à deux blocs conduit à une meilleure prédiction des trajets de fissure (voir FIGURE 6). La trajectoire estimée par la méthode SVM semble moins correct. En effet, dès que la fissure quitte un granulat, sa trajectoire s'oriente préférentiellement dans le sens du mode I (FIGURE 7) et ignore les granulats les plus proches. Malgré les résultats prometteurs en terme de tortuosité, le modèle SVM ne reproduit pas correctement le comportement de la fissure.

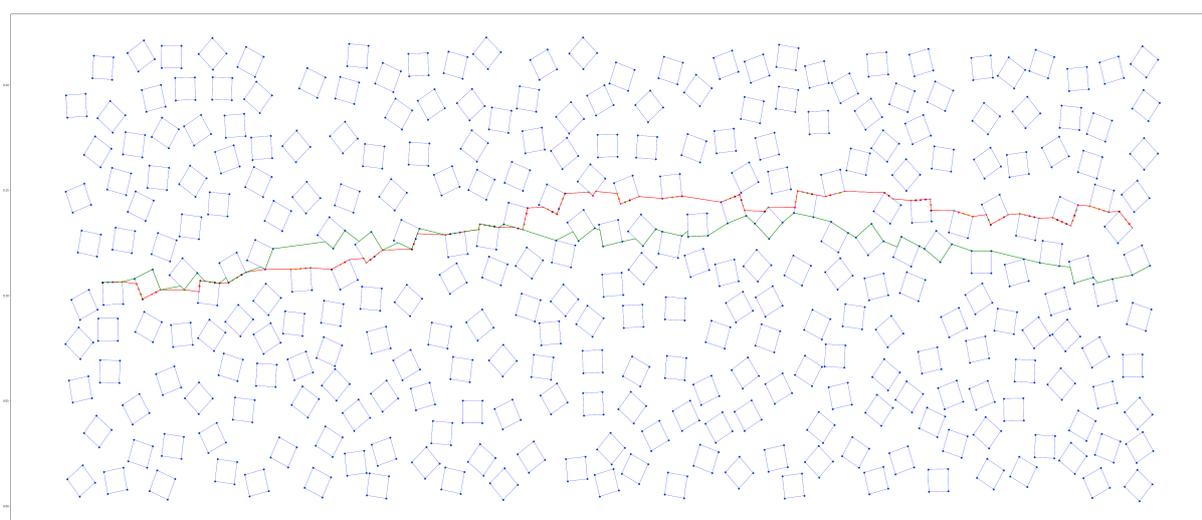


FIGURE 6 – Prédiction d'un chemin de fissuration par modèle statistique à deux blocs (en rouge) et comparaison au chemin calculé par éléments finis (en vert).

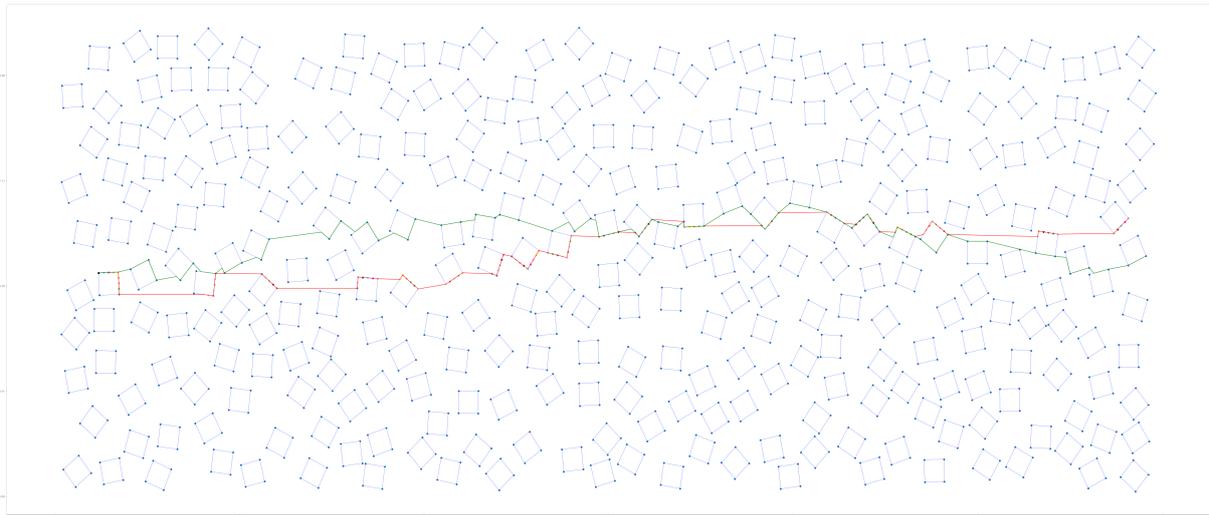


FIGURE 7 – Prédiction d'un chemin de fissuration par modèle SVM (en rouge) et comparaison au chemin calculé par éléments finis (en vert).

L'intérêt du modèle statistique à deux blocs se confirme également après une validation croisée. Le principe est le suivant : l'estimation des paramètres est maintenant réalisée à partir des descripteurs récupérés uniquement sur 16 microstructures et la prédiction est réalisée sur une 17ème qui n'a pas servi à la base d'apprentissage. Ce procédé est répété pour chacune des 17 combinaisons possibles. L'erreur prédiction/chemin de référence est présentée sous forme de boxplots (FIGURE 8). Une boxplot est un petit diagramme représentant divers caractères de dispersion d'une série statistique. Ce diagramme est constitué d'une "boîte" qui est un rectangle dont la longueur s'étend du premier quartile au troisième quartile, et qui est coupé par un trait vertical à hauteur de la médiane. Dans le graphique ci dessous, la tortuosité prédite par ce modèle semble précise à 5% près.

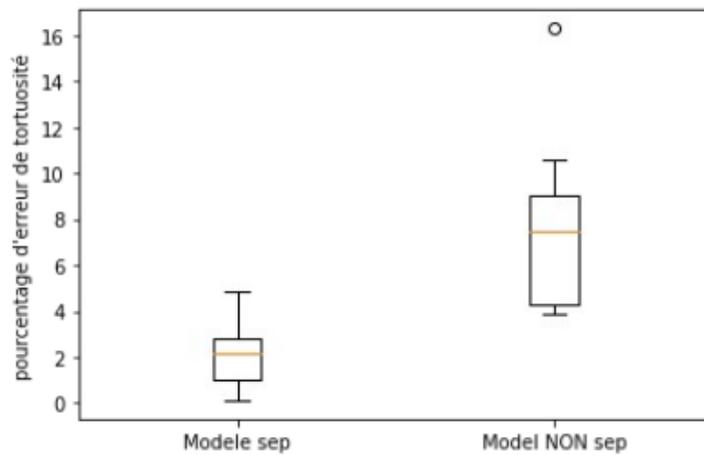


FIGURE 8 – Résultat de la validation croisée effectuée sur les 17 microstructures pour le modèle à deux blocs (modèle sep) et mono-bloc (modèle NON sep) : valeur du pourcentage d'erreur.

6 Conclusion

Dans ce travail, les contributions ont porté sur le développement de nouveaux descripteurs morphologiques prenant en compte la configuration locale de la fissure pour un milieu à matrice inclusionnaire carrée et interfaces faibles. Ces indicateurs ont été utilisés pour la construction d'outils statistiques de prédiction des trajets de fissure. Les premiers résultats ont montré qu'une modélisation distinguant le comportement de la fissure aux interfaces inclusions/matrice de son comportement dans la matrice était pertinente.

Les perspectives de ce travail concernent l'enrichissement des modèles de prédiction via l'utilisation de chaînes de Markov et l'intégration de paramètres mécaniques supplémentaires (prise en compte des contraintes mécaniques locales de manière ponctuelle). Il s'agira également de tester la robustesse des algorithmes de prédiction sur des microstructures plus complexes avec des granulats de tailles et de formes différentes. Enfin, les outils statistiques mis en œuvre étant très génériques, il est envisagé de les appliquer sur un béton 3D et d'étudier leur extension au cas de la multi-fissuration.

Références

- [1] E. Delaume *Méthode de raffinement local adaptatif multi-niveaux pour la fissuration des matériaux hétérogènes*, Université de Montpellier, 2017.
- [2] R. Affes *Relations microstructure-fissuration-perméabilité dans les milieux granulaires cimentés*, Université de Montpellier, 2012.
- [3] T. Hasti, R. Tibshirani, J. Friedman *The Elements of Statistical Learning Data Mining, Inference, and Prediction*, Springer Series in Statistics, 2013.
- [4] D. Jeulin *Caractérisation morphologique et modèles de structures aléatoires.*, Hermes Science, 2015.
- [5] F. Perales, F. Dubois, Y. Monerie, B. Piar, L. Stainier *A NonSmooth Contact Dynamics-based multi-domain solver. Code coupling (Xper) and application to fracture*, Eur. J. Comp. Mech, 2010