



HAL
open science

Identification de la variabilité spatiale des champs de contraintes dans les agrégats polycristallins et application à l'approche locale de la rupture

Xuan Hung Dang

► **To cite this version:**

Xuan Hung Dang. Identification de la variabilité spatiale des champs de contraintes dans les agrégats polycristallins et application à l'approche locale de la rupture. Autre. Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II, 2012. Français. NNT : 2012CLF22278 . tel-00822107

HAL Id: tel-00822107

<https://theses.hal.science/tel-00822107>

Submitted on 14 May 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° d'ordre : D.U. : 2278
EDSPIC : 577

Université BLAISE PASCAL - Clermont II
École Doctorale
Sciences pour l'Ingénieur de Clermont-Ferrand

Thèse

présentée par

Xuan Hung DANG
Master en Mécanique et Génie Civil

le 11 octobre 2012

en vue d'obtenir le grade de

Docteur d'Université
(Spécialité : Génie Mécanique)

Identification de la variabilité spatiale des champs de contraintes dans les agrégats polycristallins et application à l'approche locale de la rupture

soutenue publiquement devant un jury composé de MM.

Pr. Clotilde BERDIN-MERIC	Université Paris Sud, Paris	Présidente du jury
Pr. Samuel FOREST	Mines ParisTech, Paris	Rapporteur
Pr. Didier CLOUTEAU	Ecole Centrale Paris, Paris	Rapporteur
Dr. Jean-Marc BOURINET	IFMA, Clermont-Ferrand	Examineur
Pr. Bruno SUDRET	ETH, Zurich, Suisse	Directeur de thèse
Dr. Marc BERVEILLER	EDF R&D, Moret-sur-Loing	Co-Encadrant
Dr. Thierry YALAMAS	Phimeca Engineering S.A., Paris	Co-Encadrant

Institut Pascal

Université Blaise Pascal - Centre National de la Recherche Scientifique - Institut
Français de Mécanique Avancée

Remerciements

Xuan Hung DANG, 11 octobre 2012

Ce travail de thèse est le fruit d'une collaboration entre Phimeca Engineering SA, le Centre de Recherche d'Electricité De France des Renardières (EDF R&D) et l'Institut Pascal de l'Université Blaise Pascal, Clermont Ferrand, à qui j'exprime mes sincères reconnaissances pour leur accueil chaleureux et pour leur ambiance de travail très dynamique, enthousiaste et conviviale.

Je tiens à remercier chaleureusement le Professeur Samuel Forest (Mines ParisTech) et le Professeur Didier Clouteau (ECP) d'avoir accepté d'être les rapporteurs de mon travail de thèse. Leurs remarques, leurs commentaires ainsi que leurs questions constructives lors de la lecture de mon rapport m'ont permis de le clarifier et de l'améliorer. Je suis également reconnaissant envers le Professeur Clotilde Berdin-Méric (Université Paris-Sud) et le Docteur Jean-Marc Bourinet (Institut Pascal) d'avoir participé au jury de ma thèse, respectivement en tant que présidente du jury et examinateur.

J'exprime mes profonds remerciements à mon directeur de thèse, le Professeur Bruno Sudret (ETH Zurich). Je lui suis très reconnaissant de m'avoir transmis ses précieux conseils sur le plan technique et scientifique. Je le remercie également pour sa responsabilité, sa disponibilité, sa patience et l'enthousiasme dont il a fait preuve durant les trois années de thèse. Sans lui, ce mémoire n'aurait sans doute jamais vu le jour.

J'adresse également mes sincères remerciements à mes encadrants, le Docteur Marc Berveiller, le Docteur Asmahana Zeghadi (EDF R&D) et le Docteur Thierry Yalamas (Phimeca). Ils m'ont beaucoup aidé non seulement dans le domaine scientifique, mais aussi dans la vie quotidienne. Ils ont suivi en détail chaque étape de mon travail tout au long de la thèse. Ils m'ont aidé à m'intégrer à la vie française en général et particulièrement à la vie professionnelle. Je les remercie pour tout ce qu'ils m'ont apporté.

Au sein de Phimeca et d'EDF, je tiens à remercier Vincent Dubourg, Yann Caniou et Valérie Alrivie pour leur aide pendant trois ans à Phimeca, notamment concernant les démarches administratives pendant les premiers jours. Merci à Nicolas Rupin, Jean-Philippe Mathieu, Géraud Blatman pour leur disponibilité à répondre à mes questions lors de mes passages à EDF, notamment sur le Code-Aster. Merci à Karina Maccoco, Marine Marcilhac, Franck Chansard, Mathieu Souchaud, Alexandre Micol,...

Enfin, je dédie cette thèse à ma famille, ma femme Huong, ma fille Giang, mes parents, mes frères et sœurs et à mes amis qui m'ont suivi, encouragé et m'ont réservé les meilleures conditions pour travailler tout au long de mes études.

A mes parents, à Huong et à Giang

Résumé étendu

Contexte

La durée de vie des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) des centrales nucléaires est liée à la tenue de la cuve de réacteur en cas de fonctionnement accidentel. Le refroidissement rapide par injection d'eau froide dans le circuit primaire en cas d'APRP (accident par perte de réfrigérant primaire) conduit à un choc thermique pressurisé sur la paroi interne de la cuve. De plus, le bombardement neutronique dans les conditions de service modifie les propriétés mécaniques du matériau de la cuve (l'acier 16MND5) au sens où son comportement est plus fragile qu'à l'état non irradié. Tout cela favorise la rupture par clivage de la cuve.

De nombreuses recherches expérimentales en laboratoire montrent que la rupture fragile de l'acier 16MND5 se produit à très basse température. Celle-ci est considérée comme improbable dans un régime de fonctionnement normal. Cependant, comme indiqué ci-dessus, dans le cas de fonctionnement accidentel APRP, ce type de rupture peut se produire à une température plus élevée. Dès lors, du point de vue de la sécurité, elle doit être étudiée soigneusement.

La théorie du maillon le plus faible est un moyen efficace pour construire une modélisation multi-échelle mécano-probabiliste de rupture par clivage. A l'échelle macroscopique, la structure est modélisée par un calcul aux éléments finis. A l'échelle mésoscopique, un élément contenant une fissure est ensuite extrait et modélisé par un calcul aux éléments finis, sous conditions aux limites définies par son état de contraintes dans la structure. Enfin, un sous-élément ou un volume élémentaire représentatif (VER) en pointe de fissure est extrait avec son état de contraintes résultant du calcul aux éléments finis à l'échelle mésoscopique. Le problème restant est d'estimer la probabilité de rupture de ce VER.

L'objectif de cette thèse est de construire un modèle mécano-probabiliste de rupture par clivage permettant de prendre en compte la variabilité spatiale de la microstructure du VER dans l'estimation de sa probabilité de rupture. On réalise tout d'abord les modélisations micromécaniques d'un VER du matériau par des calculs aux éléments finis. Le champ aléatoire de contraintes résultant représente la variabilité spatiale de la microstructure du matériau. On étudie ensuite les méthodes de simulation et d'identification des champs aléatoires. Puis, on modélise le champ de contraintes dans le matériau par un champ aléatoire en identifiant ses propriétés probabilistes et en re-

simulant des réalisations synthétiques du champ par les méthodes précédentes, sans nouveau calcul aux éléments finis. Enfin, on construit un modèle d'Approche Locale de la rupture par clivage permettant d'y intégrer les réalisations simulées du champ de contraintes pour estimer la probabilité de rupture du VER.

Dans le cadre de cette méthodologie, chacune de ses étapes est présentée dans chaque chapitre de ce mémoire. Dans ce qui suit, on présente la résumé de chaque chapitre.

Chapitre 1

Ce chapitre présente une étude bibliographique portant sur les deux pré-requis principaux de notre travail : la modélisation de la microstructure du matériau, l'acier 16MND5 et les modèles d'Approche Locale de la rupture. On retient de cette analyse les points principaux suivants :

- L'Approche Globale de la rupture présente des limitations dans l'explication des observations expérimentales de la rupture dans le domaine de transition ductile-fragile et dans le domaine fragile. Une nouvelle approche pouvant prendre en compte des propriétés locales de la microstructure du matériau dans la modélisation est nécessaire.
- La naissance de l'Approche Locale de la rupture, notamment du modèle de [Beremin \(1983\)](#) entraîne des développements nouveaux en mécanique de la rupture pendant environ deux décennies. Ces travaux permettent d'éclairer les limitations de l'Approche Globale, mais présentent également à leur tour des limitations dans l'explication de la dépendance des paramètres du modèle en température. Une modélisation à une échelle plus fine (*i.e.* échelle microscopique) apparaît alors nécessaire.
- Le développement de la modélisation des agrégats polycristallins conduit à la naissance de l'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique. Ce modèle se compose de deux ingrédients principaux : modélisation d'agrégats polycristallins et théorie du maillon le plus faible.
- Au niveau de la modélisation polycristalline, les travaux précédents ont pris en compte de nombreux paramètres microstructuraux dans la modélisation, *e.g.* structure d'agrégats, orientations cristallographiques, effet composite des précipités, *etc.*
- Au niveau de l'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique, de nombreux paramètres microstructuraux intervenant dans le critère de rupture ont été pris en compte dans les travaux précédents. Cependant, la variabilité spatiale de la microstructure cristalline n'est jamais considérée, au prétexte qu'un seul calcul sur un VER suffisamment grand est représentatif, et suffit à expliquer le comportement à la rupture.

Nous proposons donc dans ce mémoire une nouvelle méthodologie qui vise à prendre en compte cette variabilité microstructurale par la modélisation des champs de contraintes comme étant des champs aléatoires. Dans ce mémoire, on s'est limité au cas des champs gaussiens stationnaires ergodiques.

Par ailleurs, on s'est limité dans la modélisation micromécanique à l'échelle des grains, *i.e.* la structure des paquets de lattes dans les grains n'est pas prise en compte. Les orientations cristallographiques sont supposées constantes dans un grain et varient aléatoirement d'un grain à l'autre. L'effet composite des précipités est négligé. Les paramètres des lois de comportement élastique cubique et de comportement plastique sont issus de la littérature.

Chapitre 2

Ce chapitre présente des généralités sur les champs aléatoires et les méthodes de simulation. On s'est limité dans le cadre de la thèse au cas des champs gaussiens stationnaires. On a également présenté les méthodes de simulation des champs non-gaussiens comme perspective pour de futurs développements..

Trois types de représentation de champs aléatoires (*représentation naturelle* de la définition, *développement en séries de Karhunen-Loève*, *représentation spectrale*) ont été présentés. Trois méthodes de simulation des champs gaussiens stationnaires correspondantes aux trois représentations ci-dessus ont ensuite été étudiées. Il s'agit de la *méthode de Karhunen-Loève discrète*, la *méthode "Circulant Embedding"* et la *méthode spectrale*.

Ces méthodes ont été implémentées en langage de programmation Python et ont été comparées. On a tiré les conclusions suivantes :

- La méthode Karhunen-Loève discrète et la méthode "Circulant Embedding" s'appuient sur un même principe de simulation. La différence vient de la technique "Circulant Embedding" qui facilite la résolution du problème aux valeurs propres de la matrice de covariance, grâce aux propriétés particulières des matrices circulantes.
- La méthode "Circulant Embedding" et la méthode spectrale sont beaucoup plus rapides que les autres méthodes, grâce à l'utilisation de l'algorithme de transformée de Fourier rapide (FFT). Cela nous donne un élément important pour le choix de la méthode de simulation.
- Tenant compte du temps de calcul et de la compatibilité avec la méthode d'identification du périodogramme dans le chapitre 3, on a choisi la méthode de simulation spectrale pour la suite.

Chapitre 3

Ce chapitre présente les méthodes d'identification des paramètres pour les champs aléatoires gaussiens stationnaires. Un tel champ aléatoire est complètement défini par sa loi de probabilité marginale (gaussienne) et par sa fonction de covariance. Dès lors, l'identification consiste à trouver le modèle de covariance du champ.

On a étudié trois méthodes principales :

- La *Méthode du variogramme* estime directement le variogramme (ou covariogramme) à partir des réalisations du champ. La fonction de covariance est identifiée en ajustant le variogramme empirique par un modèle théorique.
- La *Méthode du maximum de vraisemblance* estime les paramètres du modèle de covariance théorique en maximisant la densité de probabilité conjointe des variables (supposées gaussiennes) du champ.
- La *Méthode du périodogramme* estime le périodogramme qui est défini dans le cas d'un champ stationnaire par la transformée de Fourier de la fonction de covariance, à partir des réalisations du champ. La fonction de covariance est identifiée en ajustant le périodogramme empirique par un modèle théorique.

Ces méthodes ont ensuite été implémentées en langage de programmation Python. Elles ont été comparées et validées en utilisant les réalisations synthétiques d'un champ gaussien simulées par les méthodes de simulation étudiées dans le chapitre 2. On a montré dans ces études que :

- Les méthodes du variogramme et du maximum de vraisemblance reposent principalement sur la théorie du krigeage. Tandis que la méthode du variogramme est applicable, la méthode du maximum de vraisemblance ne répond pas à notre besoin.
- Les paramètres identifiés par les méthodes du variogramme et du périodogramme sont en bon accord avec les paramètres de référence que l'on cherche à retrouver.
- Le temps de calcul associé à la méthode du périodogramme est beaucoup plus faible que celui de la méthode du variogramme, surtout dans les cas multidimensionnels. Cela nous donne un élément important pour le choix de la méthode d'identification à utiliser par la suite.

Tenant compte du temps de calcul et de la compatibilité avec la méthode de simulation spectrale choisie dans le chapitre 2, on a retenu la méthode du périodogramme pour l'identification des champs de contraintes dans le chapitre 4.

Chapitre 4

Ce chapitre présente tout d’abord la mise en œuvre de la modélisation micromécanique par les calculs aux éléments finis pour obtenir les réalisations des champs de contraintes (*i.e.* champ de contraintes principales maximales σ_I et champ de contraintes de clivage σ_{cliv}). Il présente ensuite l’identification des propriétés de ces champs par les méthodes choisies dans les chapitres précédents.

La mise en œuvre des calculs d’agrégats polycristallins bidimensionnels a été réalisée à l’aide du code aux éléments finis Code Aster, version 10.7.0 (<http://www.code-aster.org>). La modélisation a été réalisée avec un maillage de 100 grains, constitué d’éléments triangulaires quadratiques à 3 points d’intégration et sous conditions aux limites en traction uniaxiale. Les champs de contraintes ont été projetés sur une grille *régulière* de 256×256 points.

On a étudié deux cas :

- *Géométrie fixe* (GF) : une même structure de grains est utilisée pour tous les calculs, l’ensemble des orientations cristallographiques varie aléatoirement d’un calcul à l’autre.
- *Géométrie aléatoire* (GA) : la structure de grains et l’ensemble des orientations cristallographiques varient aléatoirement d’un calcul à l’autre.

Pour chacun d’entre eux, on a réalisé 40 calculs aux éléments finis et on obtient ainsi 40 réalisations des champs de contraintes.

Les 40 réalisations des champs de contraintes (σ_I et σ_{cliv}) des cas GF et GA ont ensuite été utilisées pour identifier les propriétés du champ aléatoire sous-jacent. On a construit une procédure d’identification et on l’a appliqué pour chaque champ de contraintes. En comparant différents champs de contraintes et différents cas de géométrie, on a tiré des conclusions suivantes :

- L’ajustement du périodogramme empirique par le modèle théorique “mixte” (gaussien-exponentiel) est bon. Les paramètres identifiés convergent dès l’utilisation de 25 réalisations. L’utilisation de la grille de 256×256 points est suffisante pour l’identification.
- Les composantes gaussienne et exponentielle du modèle de covariance représentent bien la variabilité spatiale des contraintes entre les grains et aux joints de grains.
- Les valeurs de longueurs de corrélation associées à la composante “joints de grains” sont à mettre en regard de la taille moyenne des grains, tandis que celles associées à la composante dans les grains montrent que l’interaction entre les grains se limite à deux grains voisins.
- La structure de grains aléatoire (GA) influence faiblement la *dispersion* des champs de contraintes (mesuré par la variance du champ) mais augmente leur homogénéité

(longueurs de corrélation plus grande). L'écart maximal des paramètres identifiés dans les deux cas (GF et GA) est de l'ordre de 20%.

- Le champ σ_{cliv} est plus dispersé que le champ σ_I (variance plus élevée d'environ 13%). Mais les deux champs ont une structure de covariance spatiale sensiblement identique. Cela montre que l'utilisation de ces deux champs de contraintes dans l'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique donnera des résultats différents.
- L'évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique correspond bien aux étapes de déformation progressive du matériau. On a également montré que dans le domaine de transition élasticité-plasticité, les résultats d'identification ne sont pas valables pour la contrainte de clivage, dont la valeur est identiquement nulle sur de larges sous-domaines de l'agrégat.

Les résultats d'identification ont ensuite été utilisés pour simuler de nouvelles réalisations synthétiques des champs de contraintes sans nouveau calcul aux éléments finis. Les comparaisons des distributions empiriques des valeurs de contraintes des réalisations simulées et de celles résultant des calculs aux éléments finis montrent un bon accord entre elles.

Chapitre 5

Le chapitre 5 présente le modèle d'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique par simulation de champ de contraintes et l'application de ce modèle pour estimer la probabilité de rupture d'un agrégat polycristallin en fonction du niveau de chargement. Des études paramétriques ont été réalisées pour nous donner une vision complète des caractéristiques de ce modèle.

Le modèle a été construit en se basant sur [Mathieu \(2006\)](#). On tire aléatoirement une distribution spatiale de carbures (nombre et taille) et on en déduit la contrainte de Griffith critique, qui est comparée à la valeur locale du champ de contraintes de clivage simulé. Des modifications de la méthode de tirage de Monte Carlo (*i.e.* tirage du nombre et des tailles de carbures) ont été proposées et montrées correctes. On a également proposé l'*approche discrète* pour utiliser efficacement les réalisations simulées du champ de contraintes dans l'estimation de probabilité de rupture.

Le modèle a ensuite été appliqué pour estimer la probabilité de rupture en fonction du niveau de chargement et pour faire des études paramétriques. On a réalisé dans chaque cas 1000 simulations. On a notamment observé que :

- La courbe de probabilité de rupture représente bien les étapes successives de déformation du matériau et l'intervalle de confiance de l'estimation est petit. Cela montre que l'utilisation de 1000 simulations est suffisante.

- La simulation de champ aléatoire de contraintes augmente la probabilité de rupture (pour chaque niveau de déformation macroscopique) par rapport à l'utilisation d'une seule réalisation résultant d'un calcul aux éléments finis. Une analyse classique s'appuyant sur un seul calcul d'agrégat polycristallin sous-estime donc la probabilité de rupture réelle.
- L'utilisation du champ de contrainte principale maximale et du champ de contraintes de clivage donne des résultats différents. L'évolution des écarts entre eux en fonction du niveau de déformation macroscopique, est liée à l'évolution de la moyenne et de la variance des champs.
- Les simulations du champ de contraintes avec le périodogramme empirique et avec le périodogramme identifié donnent les mêmes probabilités de rupture. Cela montre que le périodogramme identifié représente bien la covariance du champ de contraintes résultant des calculs aux éléments finis.
- La variabilité de la structure de grains influence faiblement la probabilité de rupture, au sens où l'on obtient quasiment les mêmes courbes de probabilité de rupture si l'on ne varie que les orientations cristallographiques dans les calculs.
- Les queues des distributions de taille de carbures ([Lee et al., 2002](#); [Ortner et al., 2005](#)) influencent fortement la probabilité de rupture.
- La finesse de la grille de post-traitement des calculs aux éléments finis n'influence pas les résultats, qui semblent avoir convergé dès que la finesse dépasse 64×64 points.

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé étendu	vii
Introduction	1
1 Études bibliographiques	7
1.1 Introduction	9
1.2 Mécanique de la rupture	9
1.2.1 Modes de rupture	10
1.2.2 Théorie de la rupture par clivage	11
1.2.3 Approche Globale et limitations	15
1.3 Approche Locale de la mécanique de la rupture	18
1.3.1 Introduction	18
1.3.2 Principe de l'Approche Locale	19
1.3.3 Théorie du maillon le plus faible	20
1.3.4 Modèle de Beremin	21
1.3.5 Autres modèles	25
1.3.6 Limitations	26
1.4 Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique	27
1.4.1 Introduction	27
1.4.2 Modèle de Mathieu	27
1.4.3 Modèle de Libert	30
1.4.4 Autres modèles	33
1.4.5 Conclusion	34
1.5 Acier 16MND5 - Matériau de la cuve de réacteur	35
1.5.1 Introduction	35
1.5.2 Présentation de l'acier 16MND5	35
1.5.3 Modélisation du comportement de l'acier 16MND5	40
1.5.4 Conclusion	46
1.6 Conclusion	46

2	Champs aléatoires - Discrétisation et simulation	47
2.1	Introduction	49
2.2	Rappels sur la théorie de probabilité	49
2.2.1	Espace de probabilité	49
2.2.2	Variable aléatoire	50
2.2.3	Vecteur aléatoire	52
2.2.4	Champ aléatoire	53
2.3	Représentation des champs aléatoires	57
2.3.1	Développement en série	58
2.3.2	Représentation spectrale	59
2.4	Discrétisation des champs aléatoires	64
2.4.1	Introduction	64
2.4.2	Discrétisation par point	64
2.4.3	Troncature du développement en série	65
2.4.4	Conclusion	66
2.5	Simulation des champs aléatoires gaussiens stationnaires	66
2.5.1	Introduction	66
2.5.2	Méthode de Karhunen-Loève discrète	68
2.5.3	Méthode "Circulant Embedding"	69
2.5.4	Méthode spectrale	79
2.5.5	Comparaison des méthodes	83
2.5.6	Conclusion	85
2.6	Simulation des champs aléatoires non-gaussiens non-stationnaires	85
2.6.1	Introduction	85
2.6.2	Méthode de Karhunen-Loève	86
2.6.3	Chaos polynomial	88
2.6.4	Méthode spectrale	89
2.6.5	Conclusion	90
2.7	Conclusion	90
3	Identification des champs aléatoires	91
3.1	Introduction	92
3.2	Méthode de krigeage	93
3.3	Krigeage simple - Méthode du variogramme	94
3.3.1	Covariogramme, corrélogramme et variogramme	94
3.3.2	Variogramme empirique	98
3.3.3	Identification du variogramme empirique	102
3.3.4	Résultats	103
3.3.5	Conclusion	104
3.4	Krigeage universel - Méthode de maximum de vraisemblance	104
3.4.1	Krigeage universel	104
3.4.2	Fonction de vraisemblance	105
3.4.3	Maximum de vraisemblance	105
3.4.4	Maximum de vraisemblance restreint	107
3.4.5	Résultats	107

3.4.6	Conclusion	109
3.5	Méthode du périodogramme	109
3.5.1	Estimation du périodogramme	109
3.5.2	Périodogramme moyen	112
3.5.3	Fenêtres	113
3.5.4	Procédures d'estimation du périodogramme - Limitations	117
3.5.5	Méthode de moyennage du périodogramme modifié	118
3.5.6	Résultats	119
3.5.7	Conclusion	121
3.6	Validation	122
3.6.1	Comparaison des méthodes d'identification	122
3.6.2	Validation des méthodes de simulation	123
3.6.3	Validation dans le cas bidimensionnel	124
3.7	Conclusion	126
4	Calcul EF - Identification des champs de contraintes	127
4.1	Introduction	129
4.2	Calcul d'agrégats polycristallins	129
4.2.1	Modélisation d'agrégats	129
4.2.2	Choix des paramètres de l'acier 16MND5	132
4.2.3	Volume élémentaire représentatif	133
4.2.4	Maillage et conditions aux limites	134
4.2.5	Mise en œuvre des calculs - Cas d'étude	135
4.2.6	Résultats des calculs	135
4.2.7	Projection des champs de contraintes	143
4.3	Procédure d'identification	145
4.3.1	Introduction	145
4.3.2	Vérification du caractère gaussien	146
4.3.3	Vérification de la stationnarité	146
4.3.4	Ajustement du périodogramme empirique à un niveau de chargement	147
4.3.5	Influence du nombre de réalisations du champ de contraintes	148
4.3.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	149
4.3.7	Ajustement du périodogramme empirique à tous les niveaux de chargement	149
4.3.8	Conclusion	149
4.4	Identification du champ de contraintes principales maximales	150
4.4.1	Introduction	150
4.4.2	Vérification du caractère gaussien	150
4.4.3	Vérification de la stationnarité	151
4.4.4	Identification à un niveau de chargement	153
4.4.5	Influence du nombre de réalisations	160
4.4.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	162
4.4.7	Identification à tous les niveaux de chargement	164
4.4.8	Conclusion	166
4.5	Identification du champ de contraintes de clivage	167

4.5.1	Introduction	167
4.5.2	Vérification du caractère gaussien	167
4.5.3	Vérification de la stationnarité	168
4.5.4	Identification à un niveau de chargement	170
4.5.5	Influence du nombre de réalisation	176
4.5.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	177
4.5.7	Identification à tous les niveaux de chargement	180
4.5.8	Conclusion	182
4.6	Comparaison des résultats d'identification	183
4.6.1	Introduction	183
4.6.2	Comparaison des deux champs	183
4.6.3	Conclusion	184
4.7	Simulation du champ de contraintes	184
4.7.1	Introduction	184
4.7.2	Simulation par le périodogramme empirique et théorique	185
4.7.3	Comparaison des courbes de distribution des contraintes	186
4.7.4	Conclusion	189
4.8	Conclusion	189
4.9	Perspectives	189
5	Probabilité de rupture par clivage	191
5.1	Introduction	193
5.2	Influence des paramètres sur la probabilité de rupture	193
5.2.1	Introduction	193
5.2.2	Effet de la distribution de la taille des carbures	194
5.2.3	Effet de la taille des grains	195
5.2.4	Effet de la température - Énergie de rupture	196
5.2.5	Effet de la triaxialité	198
5.2.6	Étape critique de la rupture par clivage	198
5.2.7	Conclusion	200
5.3	Construction du modèle	200
5.3.1	Introduction	200
5.3.2	Hypothèses de base	200
5.3.3	Tirage des carbures	201
5.3.4	Approche continue - Approche discrète	204
5.3.5	Comparaison des méthodes de tirage de carbures	205
5.3.6	Comparaison des approches continue - discrète	206
5.3.7	Modèle de l'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes	208
5.3.8	Conclusion	209
5.4	Probabilité de rupture	210
5.4.1	Introduction	210
5.4.2	Probabilité de rupture et intervalle de confiance	210
5.4.3	Influence de la simulation de champ de contraintes	212
5.4.4	Influence de l'utilisation des champs de contraintes	213

5.4.5	Influence du périodogramme utilisé pour simuler les champs	215
5.4.6	Influence de la structure de grains	215
5.4.7	Influence du modèle de distribution de la taille des carbures	216
5.4.8	Études paramétriques	218
5.5	Conclusion	221
	Conclusion	223
	Bibliographie	227

Introduction

Contexte industriel

Aujourd'hui, la période d'exploitation initialement prévue pour les centrales nucléaires françaises est de quarante ans. Électricité De France (EDF) envisage un prolongement de leur durée de vie. Dans le cadre de cette politique, la sûreté des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) qui constituent la principale technologie du parc nucléaire français, doit être soigneusement étudiée. Des vastes projets de recherche ont été lancés ces dernières années par EDF R&D, *e.g.* REVE, CENTENAIRE, PERFECT et Ma_MiE. Ils consistent à étudier notamment le comportement micromécanique, le comportement à la rupture de l'acier de la cuve de réacteur, acier 16MND5, ainsi que la probabilité de rupture de la cuve.

Dans une centrale nucléaire, les cuves de réacteur constituent la seconde barrière de confinement après les gaines combustibles. Avec un réseaux de tuyauteries et de pompes, elles constituent le *circuit primaire* située entre le système producteur de chaleur et le circuit secondaire (Fig. 1).

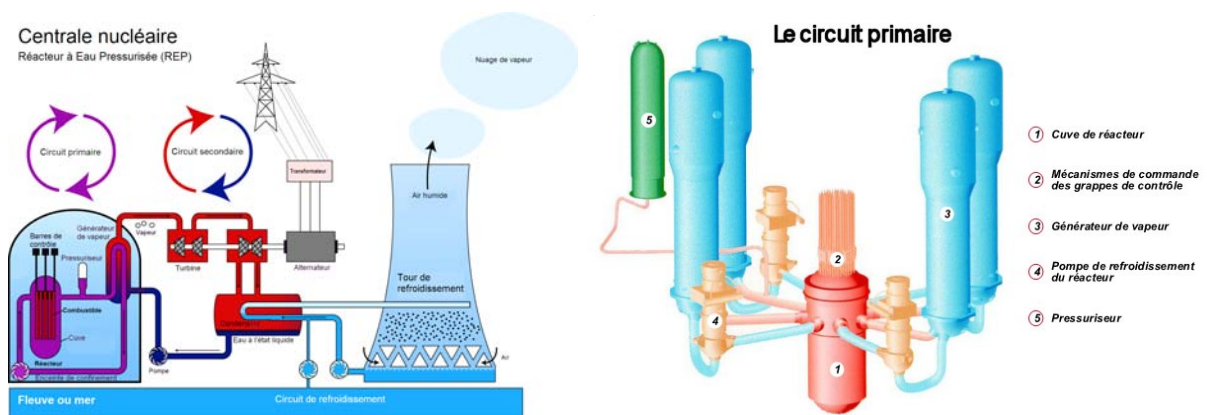


Figure 1 – Schéma d'une centrale nucléaire et d'un circuit primaire dans une centrale nucléaire (Internet)

La cuve de réacteur est constituée de plusieurs éléments (viroles, couvercle, *etc.*) en acier 16MND5 faiblement allié (correspondant à l'acier A 508 C13 dans la nomenclature américaine). La figure 2 présente une image d'une cuve de réacteur et les dimensions détaillées des cuves de réacteur dans les REP de 900MW et de 1300MW. Leurs masses totales sont respectivement de 329,4 et 418 tonnes. Dans un régime de fonctionnement normal, la cuve de réacteur subit à la fois une haute température (300°C), une forte pression (155 bar) et un bombardement neutronique d'irradiation. Sous l'effet de cette irradiation, les propriétés mécaniques de l'acier de cuve sont modifiées, dans le sens où l'acier a un comportement plus fragile qu'à l'état non irradié.

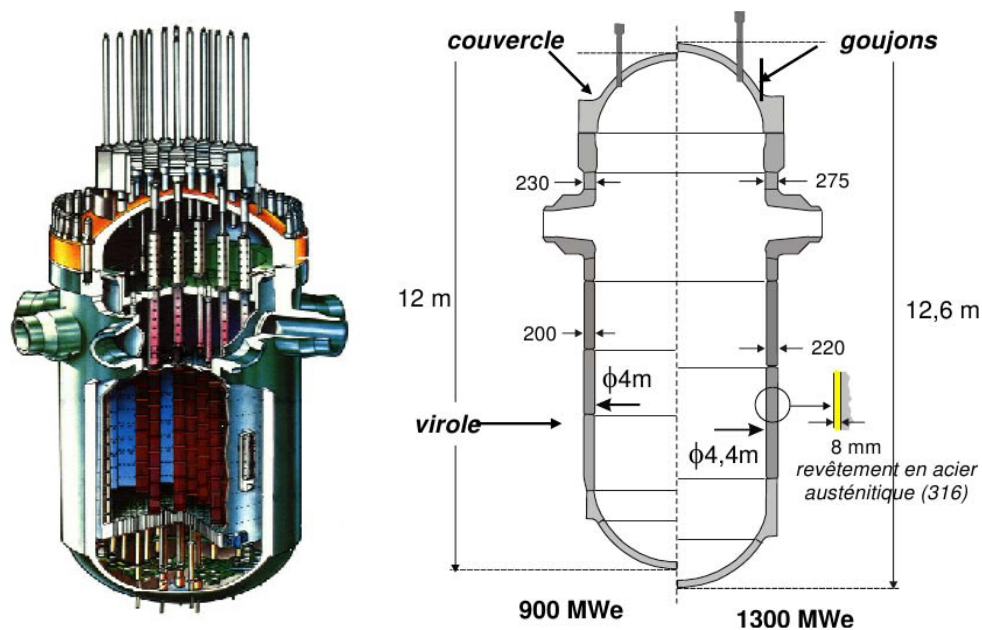


Figure 2 – Vue d'une cuve de Réacteur à Eau Pressurisée (REP) à gauche - Dimensions des cuves de réacteur dans les REP de 900MW et de 1300MW à droite (Ruste, 2012)

Dans le cas de fonctionnement accidentel APRP (Accident par Perte de Réfrigérant Primaire), le refroidissement par injection rapide de l'eau à température ambiante entraîne un choc thermique pressurisé sur la paroi interne de la cuve de réacteur. Ce dernier, avec l'effet de l'irradiation peut entraîner la rupture fragile de l'acier de cuve. De nombreuses recherches (Renevey, 1998; Tanguy, 2001; Hausild, 2002; Pesci, 2004; Mathieu, 2006; Libert, 2007; Osipov, 2007) ont été lancées autour de cette problématique industrielle.

Cette thèse est réalisée dans le cadre du projet PERFORM-SINERGY d'EDF R&D, en collaboration avec Phimeca Engineering SA et le Laboratoire de Mécanique et Ingénieries (LaMI) de L'Institut Français de Mécanique Avancée (IFMA). Elle s'inscrit dans cette démarche d'investigation de nouvelles méthodes en micromécanique probabiliste et vise à prendre en compte la variabilité spatiale de la microstructure dans la modélisation micromécanique et dans la modélisation du comportement à la rupture de l'acier de cuve à l'échelle microscopique. Les résultats de ces modélisations fournissent les données d'entrée pour les études à l'échelle supérieure.

Contexte scientifique

Jusqu'à aujourd'hui, aucune rupture fragile de la cuve de réacteur n'a été observée sur site. De nombreuses recherches expérimentales montrent que la rupture fragile de l'acier 16MND5 se produit à très basse température et que dans un régime de fonctionnement normal, la rupture est ductile plutôt que fragile. Cependant, comme indiqué ci-dessus, dans le cas de fonctionnement accidentel APRP, la rupture fragile peut se produire à une température plus élevée. Dès lors, bien que considéré comme improbable, ce type de rupture est étudié. La *théorie du maillon le plus faible* est un moyen efficace qui nous permet d'estimer la probabilité de rupture de la cuve de réacteur par une modélisation multi-échelle. Le schéma d'une telle modélisation est présenté sur la figure 3.

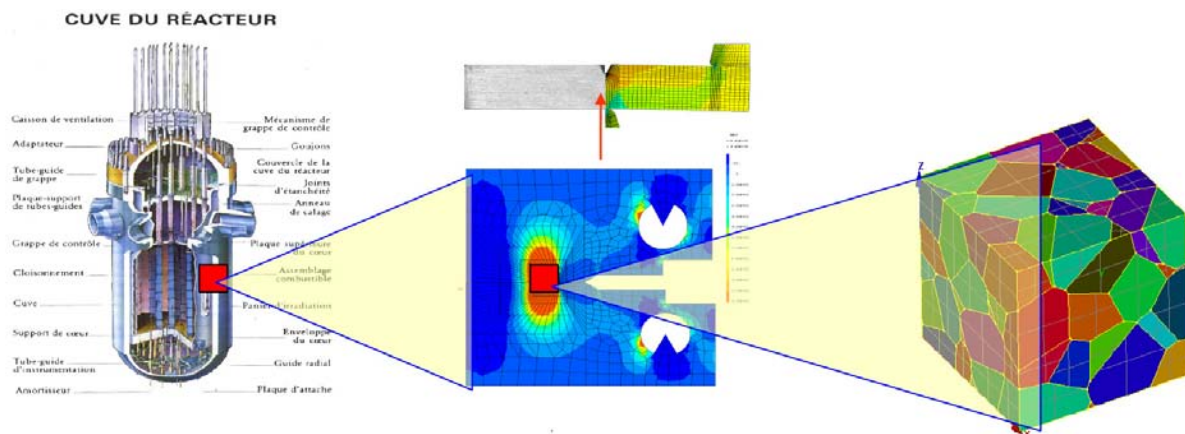


Figure 3 – Schéma de la modélisation multi-échelle

À l'échelle macroscopique, la cuve de réacteur est modélisée par un calcul aux éléments finis. Les éléments sont suffisamment petits pour qu'ils puissent être considérés comme étant indépendants du point de vue probabiliste. Lorsque la probabilité de rupture de chaque élément est connue, la probabilité de rupture de la cuve sera calculée.

À l'échelle mésoscopique, on considère un élément quelconque de la cuve de réacteur contenant une fissure. On applique sur cet élément l'état de contraintes correspondant résultant du calcul aux éléments finis à l'échelle macroscopique. Le problème posé est de calculer la probabilité de rupture de cet élément. Pour ce faire, il existe deux méthodes :

- La première méthode consiste à réaliser des essais expérimentaux sur un certain nombre d'éprouvettes et à en déduire la probabilité de rupture. Cette méthode s'arrête à cette échelle mésoscopique. Elle est associée à *l'Approche Globale* de la rupture et présente un certain nombre de limitations qui seront analysées dans le chapitre 1.
- La deuxième méthode consiste à modéliser cet élément par un calcul aux éléments finis et à son tour, calculer sa probabilité de rupture par la théorie du maillon le plus faible. Il faut désormais calculer la probabilité des sous-éléments.

À l'échelle microscopique, on extrait un sous-élément en pointe de la fissure de l'élément à l'échelle mésoscopique. On applique sur ce sous-élément l'état de contraintes correspondant résultant du calcul aux éléments finis à l'échelle mésoscopique. Pour calculer la probabilité de rupture de ce sous-élément, deux modèles d'*Approche Locale* ont été proposés :

- Le premier modèle dit d'*Approche Locale à l'échelle macroscopique* a été proposé par Beremin (1983). Il s'arrête à la modélisation mésoscopique. La probabilité de rupture du sous-élément est calculée en prenant des hypothèses simplificatrices, sous l'action de l'état de contraintes appliqué. Le champ de contraintes dans ce sous-élément est supposé homogène.
- Le deuxième modèle dit d'*Approche Locale à l'échelle microscopique* a été proposé par Mathieu (2006). Il s'appuie également sur une modélisation du sous-élément par un calcul aux éléments finis. Ensuite, la probabilité de rupture de ce sous-élément est calculée par la théorie du maillon le plus faible en vérifiant le critère de rupture en chaque point dans le sous-élément.

Objectif de la thèse et méthodologie

Cette thèse fait suite au développement du modèle d'*Approche Locale* de la rupture à l'échelle microscopique. On constate qu'aucun travail précédent n'a pris en compte la variabilité spatiale de la microstructure (*i.e. géométrie et orientations cristallographiques*) dans cette méthodologie.

En effet, comme on le verra en détail dans le chapitre 1, et dans la tradition des approches micromécaniques, il est traditionnellement considéré que la simulation d'*un seul* volume élémentaire représentatif (VER) du matériau suffit à décrire le comportement homogène équivalent ainsi que les propriétés à rupture.

L'objectif principal de cette thèse est donc de mettre en œuvre une *nouvelle méthodologie* permettant de prendre en compte cette variabilité dans la modélisation en se basant sur les modèles des travaux précédents *e.g.* Mathieu (2006); Libert (2007) et Osipov (2007). Comme on le verra, il a été nécessaire de prendre des hypothèses simplificatrices dans certaines étapes de cette méthodologie pour se concentrer sur cet objectif principal.

La nouvelle méthodologie proposée se compose de deux parties principales. La première partie consiste en une modélisation micromécanique de la microstructure aléatoire de l'acier 16MND5 et une modélisation probabiliste des champs de contraintes dans l'acier. La deuxième partie consiste à construire un modèle d'*Approche Locale* de la rupture par clivage à l'échelle microscopique permettant de prendre en compte les résultats de la première partie dans l'estimation de la probabilité de rupture. Les étapes détaillées de la méthodologie sont les suivantes.

Étape 1 : On construit un certain nombre de microstructures aléatoires d'*agrégats polycristallins* (*i.e.* la géométrie et les orientations cristallographiques aléatoires) d'un volume élémentaire d'acier 16MND5. Chaque microstructure est introduite dans une

modélisation micromécanique par calcul aux éléments finis. On obtient pour chacune une *réalisation* particulière (au sens probabiliste) du champ aléatoire de contraintes de clivage dans l'acier. Ces réalisations résultent de la variabilité spatiale de la microstructure du matériau.

Étape 2 : Les champs de contraintes sont ensuite modélisés par un *champ aléatoire gaussien stationnaire*. Les réalisations des champs de contraintes obtenus à l'étape 1 sont utilisées pour *identifier* les paramètres de ce modèle probabiliste.

Étape 3 : Les résultats d'identification des champs de contraintes à l'étape 2 sont utilisés pour re-simuler des réalisations synthétiques de ces champs. Ces réalisations reproduisent la variabilité spatiale des champs de contraintes *sans effectuer des nouveaux calculs aux éléments finis*.

Étape 4 : On construit un modèle d'Approche Locale de la rupture par clivage à l'échelle microscopique qui utilise les réalisations des champs de contraintes simulées à l'étape 3 pour estimer la probabilité de rupture du matériau en fonction du niveau de chargement. L'utilisation des réalisations simulées des champs de contraintes nous permet de prendre en compte la variabilité spatiale de la microstructure dans la modélisation.

Le plan de ce mémoire est organisé en se basant sur cette méthodologie. Le chapitre 1 présente une étude bibliographique sur la mécanique de la rupture, sur les différents modèles d'Approche Locale de la rupture, ainsi que sur le matériau de la cuve de réacteur, l'acier 16MND5. Le chapitre 2 présente les représentations de champs aléatoires et les méthodes de simulation associées. Le chapitre 3 présente les méthodes d'identification des propriétés de champs aléatoires gaussiens ergodiques et stationnaires à partir de la donnée d'un ensemble de réalisations. Le chapitre 4 présente la mise en œuvre des calculs d'agrégats polycristallins et l'identification des champs de contraintes (principales maximales et de clivage) résultants. Le chapitre 5 présente enfin la construction du modèle d'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes de clivage à l'échelle microscopique et l'estimation de probabilité de rupture du matériau. Un chapitre présentant les conclusions principales et les perspectives de ce travail clôt le mémoire.

Études bibliographiques

Sommaire

1.1	Introduction	9
1.2	Mécanique de la rupture	9
1.2.1	Modes de rupture	10
1.2.2	Théorie de la rupture par clivage	11
1.2.3	Approche Globale et limitations	15
1.3	Approche Locale de la mécanique de la rupture	18
1.3.1	Introduction	18
1.3.2	Principe de l'Approche Locale	19
1.3.3	Théorie du maillon le plus faible	20
1.3.4	Modèle de Beremin	21
1.3.5	Autres modèles	25
1.3.6	Limitations	26
1.4	Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique	27
1.4.1	Introduction	27
1.4.2	Modèle de Mathieu	27
1.4.3	Modèle de Libert	30
1.4.4	Autres modèles	33
1.4.5	Conclusion	34
1.5	Acier 16MND5 - Matériau de la cuve de réacteur	35
1.5.1	Introduction	35
1.5.2	Présentation de l'acier 16MND5	35
1.5.3	Modélisation du comportement de l'acier 16MND5	40
1.5.4	Conclusion	46
1.6	Conclusion	46

1.1 Introduction

Le fonctionnement en cas d'Accident par Perte de Réfrigérant Primaire (APRP) des réacteurs à eau pressurisée des centrales nucléaires demande l'injection d'eau froide dans le circuit primaire. Cela conduit à un choc thermique pressurisé sur la paroi interne de la cuve. De nombreuses recherches développées par EDF R&D ([Tanguy, 2001](#); [Mathieu, 2006](#); [Libert, 2007](#); [Osipov, 2007](#)) montrent le risque de rupture fragile des cuves de réacteurs. Suite à ces recherches, le premier chapitre de ce travail est consacré à l'étude bibliographique de la mécanique de la rupture fragile et du matériau de la cuve de réacteur.

Dans la section suivante, nous rappelons la mécanique de la rupture générale en insistant sur l'intérêt de ce travail concernant la rupture par clivage. Ensuite la troisième section présente l'Approche Locale de la mécanique de la rupture en mettant en évidence le rôle du modèle de Beremin et ses limitations. Celles-ci ont conduit au développement de l'Approche Locale à l'échelle microscopique présentée dans la quatrième section. Nous présentons également dans cette section l'idée principale de notre travail. La section suivante sera consacrée à la présentation du matériau de la cuve de réacteur, l'acier 16MND5. Dans la dernière section, nous tirons les conclusions.

1.2 Mécanique de la rupture

La rupture du matériau est un phénomène physique progressif jusqu'à sa destruction finale. La mécanique de la rupture est une étude, via les paramètres mécaniques, de cette destruction lorsque le matériau subit un chargement en présence de discontinuités, *e.g.* fissures ou défauts. Elle permet de prévoir la rupture du matériau en fonction de la taille d'une fissure et de l'état de chargement ([Engerand, 1990](#); [Lemaitre, 1996](#)). La mécanique de la rupture est un phénomène complexe dépendant de la nature du matériau, du type de chargement et de la température. En fonction de ces paramètres, nous distinguons différents types de rupture : *rupture ductile*, *rupture fragile*, *rupture par fluage* et *rupture en fatigue*. Comme nous ne nous intéressons ni au fluage, ni à la fatigue dans ce travail, nous limitons la présentation de la mécanique de la rupture aux cas ductile et fragile.

Dès les années soixante, une *Approche Globale* de la rupture a été développée en mécanique élastique linéaire et non-linéaire pour modéliser la rupture ductile. Cependant, cette approche présente certaines limitations mises en évidence par des essais dans le domaine de la rupture fragile ou dans le domaine de transition ductile-fragile ([Pineau, 2007](#)). Ces limitations conduisent à la naissance d'une deuxième approche intitulée "*Approche Locale*". Celle-ci modélise la rupture fragile à l'échelle microscopique en prenant en compte des paramètres micromécaniques du matériau dans sa modélisation, ainsi que dans son critère de résistance. Actuellement, ces deux approches ne sont pas contradictoires, mais de plus en plus complémentaires ([Besson et al., 2004](#)).

1.2.1 Modes de rupture

1.2.1.1 Rupture ductile

La rupture ductile se produit dans les métaux ou dans les polymères lorsque ces matériaux travaillent à suffisamment haute température et après un certain seuil de déformation plastique. Elle se compose de trois étapes : nucléation, extension et coalescence des cavités. La nucléation des cavités vient souvent de la rupture des inclusions de seconde phase ou de la séparation des interfaces inclusion-matrice dépendant de la résistance du joint entre elles. L'hétérogénéité de la déformation entre l'inclusion et la matrice est à l'origine de la séparation du joint entre les deux. La nucléation des cavités est contrôlée par deux critères. Le premier, de type énergétique, nécessite une énergie suffisamment grande pour qu'une nouvelle surface se produise. Le deuxième, de type contraintes, nécessite une contrainte de chargement dépassant un seuil de résistance. L'extension des cavités est un processus continu dépendant de la déformation plastique. L'extension du rayon des cavités est une fonction de la déformation plastique et de la contrainte moyenne. La coalescence des cavités joue un rôle décisif dans la rupture ductile. Le critère de rupture est lié à un seuil de la fraction volumique. Les approches classiques pour modéliser la rupture ductile linéaire et non-linéaire sont détaillées dans [Chell et al. \(1981\)](#); [Besson et al. \(2004\)](#).

1.2.1.2 Rupture fragile

Contrairement à la rupture ductile, la rupture fragile se produit brusquement à basse température, sans nécessiter une grande déformation plastique. Elle peut causer des catastrophes sans signe précurseur. Elle peut être se produire sous deux formes : *inter-granulaire* ou *intra-granulaire* ([Besson et al., 2004](#)).

La rupture inter-granulaire est souvent observée dans les matériaux céramiques. Dans les matériaux ferritiques, la rupture fragile est normalement intra-granulaire. Mais dans certains cas, la présence des précipités faiblement résistants aux joints de grains peut causer la séparation des joints sous l'action d'une contrainte plus faible. On parle alors de rupture inter-granulaire dans les matériaux ferritiques. Dès lors, ce type de rupture peut se produire à plus haute température, dans le domaine de transition ou celui de la rupture ductile. Ce type de rupture fragile ne fait pas l'objet de ce travail.

La rupture intra-granulaire est dite *rupture par clivage*. Elle est observée souvent dans les matériaux métalliques et céramiques. Les matériaux de structure cristalline hexagonale (HCP) ou cubique centrée (BCC) sont ruinés par le clivage dans les plans cristallographiques à basse température sous l'action d'une contrainte de traction. Ce qui n'est pas le cas pour les matériaux de structure cristalline cubique à face centrée (CFC) ([Chell et al., 1981](#)). En poursuivant le modèle développé à EDF R&D pour calculer la ténacité de la cuve de réacteur, ce travail s'intéresse plus particulièrement à la rupture fragile.

1.2.2 Théorie de la rupture par clivage

1.2.2.1 Introduction

Dans les matériaux cristallins, la rupture par clivage est définie comme la décohésion complète du cristal sur l'un de ses plans cristallographiques. Cette décohésion se produit lorsque la contrainte de chargement projetée sur un plan cristallographique quelconque est supérieure à la résistance théorique du matériau (François et al., 1993) :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{E\gamma_s}{d_{hkl}}} \quad (1.1)$$

où E est le module d'Young, γ_s est l'énergie de cohésion surfacique des atomes et d_{hkl} est la distance inter-réticulaire des familles de plans d'indice (hkl) (Sec. 1.5.2.2). Le plan dont le rapport $\frac{\gamma_s}{d_{hkl}}$ est le plus faible, est le plan de clivage. Les plans de clivage sont les plans de la famille (100) pour les matériaux de la structure BCC et les plans de la famille (0001) pour les matériaux de la structure HCP (Besson et al., 2004).

Pour les aciers à matrice ferritique, la contrainte de clivage est de l'ordre de 27000 MPa ($\approx E/10$). Cette valeur est très grande et n'est vérifiée que dans les matériaux extrêmement purs comme le trichite. En réalité, la structure est souvent cassée pour une contrainte de chargement bien inférieure à cette valeur théorique. La microstructure et la plasticité sont relevées comme facteurs amplificateurs de la contrainte locale qui causera la rupture fragile du matériau. La rupture par clivage se compose en général de deux étapes :

- *Germination* du clivage lorsque la contrainte au point de clivage atteint la valeur de la contrainte théorique de clivage (Eq. (1.1)).
- *Propagation* du clivage amorcé sous l'action de la contrainte dans le cristal.

Une rupture par clivage débute par la germination. Puis le clivage amorcé est propagé sous l'action de la contrainte associé au chargement. En se propageant, il doit franchir les obstacles microstructuraux pour arriver à la rupture finale. Dans la modélisation de la rupture par clivage, il est important de connaître l'étape critique qui contrôle les deux étapes de la rupture. Plusieurs modèles ont été proposés prenant en compte l'effet de la microstructure et de la plasticité pour modéliser la rupture par clivage.

1.2.2.2 Critère de Griffith

Griffith (1921) a proposé un critère définissant la contrainte d'ouverture d'un défaut de taille $2r_c$. Par une approche énergétique, il montre que sous l'action de la contrainte de chargement, un clivage amorcé (un défaut) se propage lorsque le travail exercé par la contrainte locale est supérieure à celui de la résistance du matériau. La contrainte critique est calculée par :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{E' \gamma_p}{\alpha r_c}} \quad (1.2)$$

où

γ_p est l'énergie de propagation.

$E' = E$ en contraintes planes.

$E' = \frac{E}{1 - \nu^2}$ en déformations planes.

α est un coefficient dépendant de la forme de la fissure. Pour une fissure circulaire $\alpha = \frac{2}{\pi}$.

Au cours de la propagation, la taille du défaut évolue. La contrainte critique décroît. Si la contrainte associée au chargement est constante, la propagation de la fissure est instable. Le travail exercé par le chargement se transforme alors en énergie cinétique.

1.2.2.3 Clivage contrôlé par germination

Zener (1948) et Stroh (1954) envisagent l'empilement de dislocations sur un obstacle (particules de seconde phase, joints de grains) comme amplificateur de contrainte. Sous l'action de cet empilement, l'état de contraintes en un point $P(r, \theta)$ en tête de l'empilement s'écrit sous la forme :

$$\sigma_{12} = (\tau - \tau_i) \sqrt{\frac{d}{r}} \left(\cos \frac{3\theta}{2} + \frac{1}{2} \sin \theta \sin \frac{\theta}{2} \right) \quad (1.3)$$

$$\sigma_{22} = (\tau - \tau_i) \sqrt{\frac{d}{r}} \left(\frac{3}{2} \sin \theta \cos \frac{\theta}{2} \right) \quad (1.4)$$

où τ est la cission résolue, τ_i est la friction du réseau cristallin, d est la longueur d'empilement, r et θ représentant les coordonnées polaires de l'extrémité de l'empilement par rapport à l'origine (Fig. 1.1).

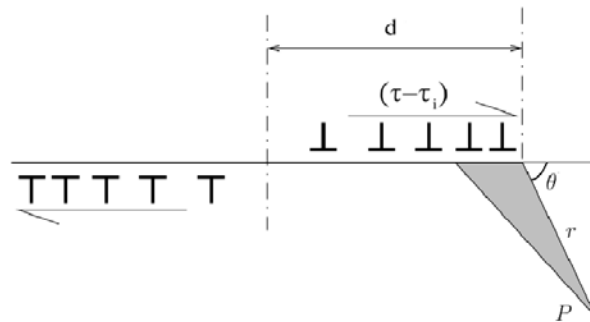


Figure 1.1 – Modèle de Zener-Stroh de germination du clivage (Mathieu, 2006)

Dans ce modèle, Stroh considère que seule la contrainte normale σ_{22} intervient à la rupture du matériau selon le critère de Griffith. En prenant l'égalité des équations (1.2) et (1.4),

il montre qu'une fissure de taille r se produit sous l'effet d'une énergie décroissante.

$$\tau = \tau_i + \frac{2}{3 \sin \theta \cos \frac{\theta}{2}} \sqrt{\frac{E' \gamma_p}{\alpha d}} \quad (1.5)$$

Comme le terme r est absent dans cette formule, cette condition est toujours satisfaite pour toutes les fissures. Cela signifie que la germination du clivage est l'étape critique de la rupture si l'énergie de surface effective est invariante.

Il est clair que la germination du clivage est la plus favorable lorsque τ atteint sa valeur minimale. En dérivant l'équation (1.5) par rapport à θ , la condition de germination du clivage est atteinte pour $\theta_0 = 70,5^\circ$. La contrainte critique s'écrit alors :

$$\tau_c = \tau_i + \frac{2}{3 \sin \theta_0 \cos \frac{\theta_0}{2}} \sqrt{\frac{E' \gamma_p}{\alpha d}} \quad (1.6)$$

Chell et al. (1981) notent que ce modèle néglige l'effet de la contrainte de cisaillement sur la germination du clivage et que l'initiation du clivage dans un champ de contraintes uniforme est équivalente au cas non-uniforme. De plus, ils présentent la possibilité pour un clivage amorcé d'être émoussé plutôt que de se propager sous l'effet de la contrainte de cisaillement en tête de la fissure.

1.2.2.4 Clivage contrôlé par propagation

Cottrell (1958) considère l'amorçage du clivage comme la naissance d'une superdislocation dans le plan $\{100\}$ à partir de deux dislocations glissiles $\langle 111 \rangle \{110\}$ dans le réseau cristallin cubique centré (Fig. 1.2).

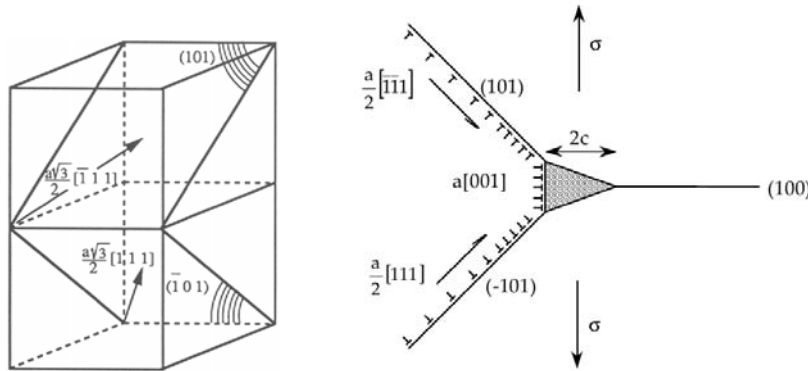


Figure 1.2 – Modèle de Cottrell de germination du clivage (Libert, 2007; Lambert-Perlade, 2001)

Le critère de germination du clivage de ce modèle est présenté sous la forme de la contrainte de clivage σ_c :

$$\sigma_c = \frac{2\mu\Gamma_s}{d} \quad (1.7)$$

où d est la taille de grains, μ est le module élastique de cisaillement et Γ_s est l'énergie de surface effective en cours de propagation. Cette énergie s'exprime comme suit :

$$\Gamma_s = \gamma_s + \gamma_p + \gamma_b \quad (1.8)$$

où γ_s est l'énergie de cohésion surfacique, γ_p est l'énergie de propagation en pointe de fissure et γ_b est l'énergie de franchissement des obstacles microstructuraux.

1.2.2.5 Modèle de Smith - Clivage de seconde phase

Le modèle de [Smith \(1966\)](#) est un cas particulier du modèle de Zener-Stroh. Il envisage l'empilement de dislocations sur un carbure au joint de grains (Fig. 1.3).

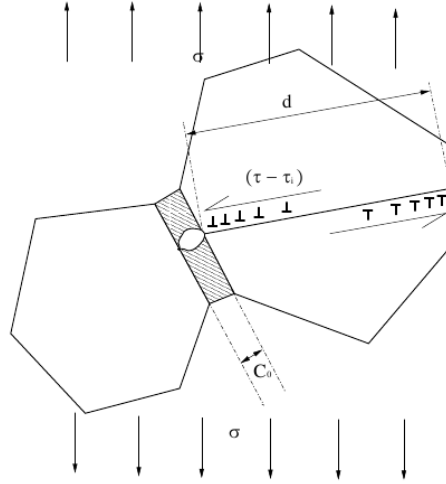


Figure 1.3 – Modèle de Smith de germination du clivage ([Mathieu, 2006](#))

La contrainte en tête de l'empilement de dislocation déclenche le clivage du carbure. Ce clivage est ensuite propagé dans la matrice ferritique sous l'effet du chargement en prenant en compte l'effet amplificateur local de dislocation. Ce modèle prend en compte ainsi l'influence de la taille de carbure sur le clivage. Le critère s'écrit :

$$\frac{C_0}{d} \sigma_c^2 + (\tau - \tau_i)^2 \left[1 + \frac{4}{\pi} \left(\frac{C_0}{d} \right)^2 \frac{\tau_i}{\tau - \tau_i} \right]^2 = \frac{4E\gamma_f}{\pi(1-\nu^2)d} \quad (1.9)$$

où C_0 est la taille de carbure, d est la taille de grains, τ est la cission résolue, τ_i est la friction du réseau cristallin, γ_f est l'énergie de surface effective de la matrice ferritique et E , ν sont les coefficients du matériau. La formule (1.9) montre que plus la taille de carbure est grande, plus la contrainte de clivage σ_c est petite. Autrement dit, le carbure le plus grand déclenche le clivage.

1.2.2.6 Étape critique de la rupture par clivage

En réalité, en fonction de la température, chaque étape de la rupture par clivage a une influence différente sur la rupture finale du matériau. La connaissance de l'étape critique joue un rôle décisif dans la recherche. Une revue synthétique de la rupture par clivage dans [Besson et al. \(2004\)](#) montre qu'à basse température, la rupture par clivage est contrôlée par la germination du clivage, tandis qu'à haute température, la propagation de la fissure est l'étape critique. Le choix de l'étape critique doit se baser sur la microstructure du matériau, les conditions de chargement de la structure et une étude quantitative du critère relatif à chaque étape. Dans certains cas, lorsque l'étude est réalisée sur une plage de température, il est nécessaire de prendre en compte différentes étapes critiques aux différentes températures ([Pineau, 2007](#)). Le modèle de multi-barrières qui tient compte de cet aspect a été appliqué dans plusieurs travaux, *e.g.* ([Lambert-Perlade, 2001](#)).

1.2.3 Approche Globale et limitations

L'Approche Globale a été proposée dès le début de la mécanique de la rupture. Son développement s'associe à la mécanique élastique linéaire et non-linéaire de la rupture. Dans le premier cas, la rupture est modélisée par les paramètres K_I, K_{II}, K_{III} dit facteurs d'intensité de la contrainte (en $\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) correspondant respectivement aux modes I, II, III du chargement comme l'indique la figure 1.4.

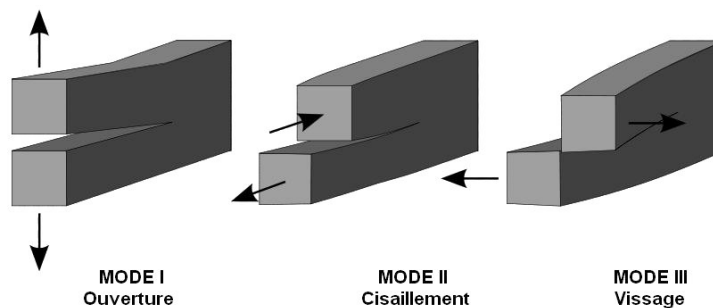


Figure 1.4 – Les trois modes de chargement s'appliquant sur une fissure ([Anderson, 2005](#))

La théorie de l'élasticité indique que les états de contraintes en un point $P(r, \theta)$ quelconque correspondantes aux trois modes de chargement s'écrivent :

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij}^I &= \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}^I(\theta) \\
 \sigma_{ij}^{II} &= \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}^{II}(\theta) \\
 \sigma_{ij}^{III} &= \frac{K_{III}}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}^{III}(\theta)
 \end{aligned} \tag{1.10}$$

où (r, θ) sont les coordonnées polaires du point P par rapport à la pointe de fissure. Ces paramètres dépendent du chargement et de la géométrie de la structure. La rupture du matériau est contrôlée par le critère de Griffith. Le critère pour le mode I de chargement s'écrit (en déformations planes) :

$$K_I \geq K_{IC} = \sqrt{\frac{2\gamma E}{1-\nu^2}} \quad (1.11)$$

où K_{IC} est la ténacité du matériau, γ est l'énergie de surface, E est le module d'Young et ν est le coefficient de Poisson.

Dans le domaine de la mécanique non-linéaire, le paramètre baptisé Intégrale J est introduit comme la vitesse de dissipation de l'énergie du matériau hyperélastique. Celle-ci est définie par l'intégrale de la dissipation de l'énergie sur un contour entourant la pointe de fissure (Fig. 1.5) :

$$J = \int_G \left(w dy - \mathbf{t} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} ds \right) \quad (1.12)$$

où G est le contour qui entoure la pointe de fissure, w est la densité d'énergie de déformation, \mathbf{t} est le vecteur de contraintes sur le contour, \mathbf{u} est le vecteur de déplacement et ds est un élément de contour.

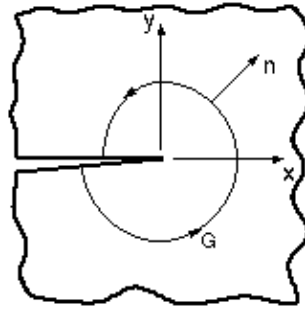


Figure 1.5 – Contour entourant la pointe de fissure

L'intégrale J ne dépend pas du choix de contour et est considéré comme un paramètre intrinsèque du comportement à la rupture du matériau. Dans le cas du matériau élastique (pas forcément linéaire) soumis à un chargement de mode I , la relation entre K_I et J s'écrit :

$$J_I = \frac{K_I^2(1-\nu^2)}{E} \quad (1.13)$$

Le critère de rupture sur J est alors :

$$J_I \geq J_{IC} = \frac{K_{IC}^2(1-\nu^2)}{E} = 2\gamma \quad (1.14)$$

Les facteurs T -contrainte et Q ont été ajoutés récemment pour élargir le domaine d'application de l'approche. On tient ainsi compte du deuxième terme du développement

de Taylor dans la modélisation et de la différence du champ de contraintes résultant d'un calcul d'éléments finis par rapport à celui utilisé dans le modèle.

Bugat présente dans sa contribution à Besson et al. (2004) une application de l'Approche Globale pour étudier les propriétés d'une soudure. Il réalise trois cas expérimentaux. Il étudie tout d'abord deux ensembles d'éprouvettes CT (Fig. 1.6) de matériau de soudure. Pour confirmer les résultats obtenus à partir des éprouvettes CT, il réalise ensuite des essais de flexion en quatre points sur des tuyaux soudés (Fig. 1.6). Les détails des essais sont les suivants.

- Cas 1 : 6 essais sur éprouvettes CT pré-chargées en fatigue (CT fatigue).
- Cas 2 : 6 essais sur éprouvettes CT conventionnelles (CT normale).
- Cas 3 : 2 essais de flexion en quatre points d'un tuyau soudé comme l'indique la figure 1.6, l'un aux conditions du brut de soudage (Tuyau 1) et l'autre est stabilisé avant l'essai de rupture (Tuyau 2). Une fissure semi-elliptique a été créée au centre de la soudure de chaque tuyau.

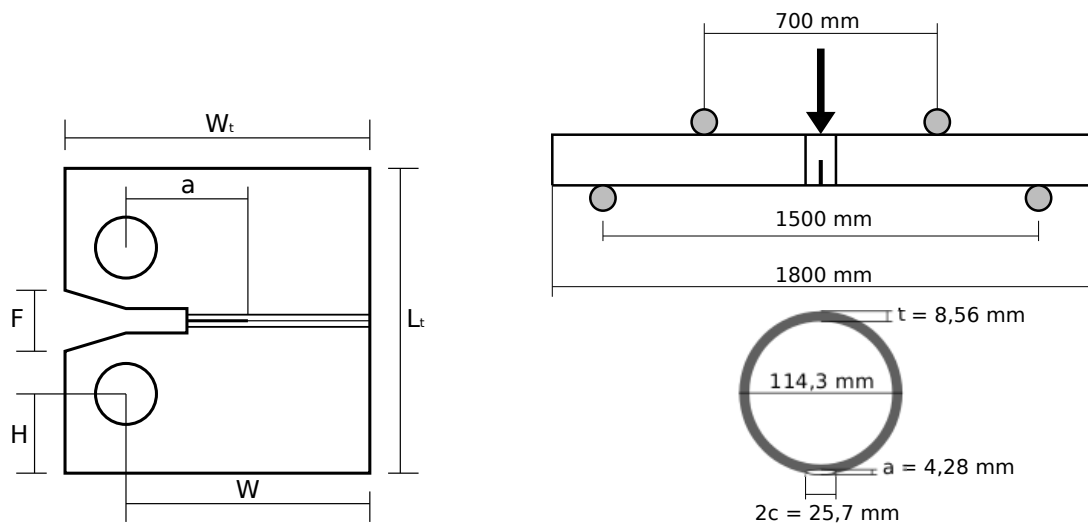


Figure 1.6 – Éprouvette CT ($B = 12,5$ mm (épaisseur de l'éprouvette) ; $W_t = 31,25$ mm ; $L_t = 30$ mm ; $W = 25$ mm ; $H = F = 8$ mm ; $a = 13,25$ mm) à gauche et l'essai de flexion en quatre points à droite (Besson et al., 2004)

Les résultats sont présentés dans le tableau 1.1.

- Dans le premier cas, on observe quatre fois de la rupture ductile et deux fois de la rupture fragile. On conclut que la rupture se produit dans le domaine de transition. De plus, les valeurs du paramètre J obtenus sont dispersées de 213 kJm^{-2} à 880 kJm^{-2} même si les éprouvettes sont ruinées par le même type de rupture ductile. Cela montre la dispersion du résultat de l'Approche Globale dans le domaine de transition.

- Dans le deuxième cas, seule la rupture ductile est observée. Les valeurs du paramètre J sont proches et sont environ de 731 kJm^{-2} . On en conclut que le pré-chargement en fatigue (cas 1) peut entraîner différents types de rupture.
- Dans le troisième cas, les deux tuyaux sont cassés selon un mode de rupture ductile. Les valeurs du paramètre J obtenues pour le tuyau 1 et 2 sont respectivement de 1100 kJm^{-2} et 1300 kJm^{-2} . La comparaison des résultats des essais sur les éprouvettes et sur les tuyaux montre une différence importante. On en conclut que les essais sur éprouvette sous-estiment la prédiction de la rupture du tuyau. Autrement dit, l'Approche Globale nécessite de prendre en compte un effet de la géométrie lorsque l'on veut utiliser les résultats des essais en laboratoire dans les calculs de structures en service.

Cas	Éprouvette	$J(\text{kJm}^{-2})$	Mode de rupture
1	CT fatigue	213	ductile
		711	ductile
		794	ductile
		880	ductile
		56	fragile
		117	fragile
2	CT normale	731	ductile
3	Tuyau 1	1100	ductile
	Tuyau 2	1300	ductile

Tableau 1.1 – Valeurs de l'intégrale J calculées à partir des essais (Besson et al., 2004)

Cette application montre les limitations de l'Approche Globale dans le domaine de transition ou de rupture fragile. L'observation de la dispersion des résultats et de l'effet de la géométrie demande une nouvelle approche qui tient compte des différents paramètres correctement. L'Approche Locale va permettre de traiter ces questions.

1.3 Approche Locale de la mécanique de la rupture

1.3.1 Introduction

La dispersion des résultats de l'estimation de la ténacité du matériau par des essais expérimentaux nécessite la prise en compte de l'aspect statistique dans les études. L'apparition du modèle RKR (Richie et al., 1973) marque le premier pas dans ce domaine. Richie et al. (1973) considèrent que la rupture se produit lorsque le champ de contraintes en pointe de fissure atteint la valeur critique σ_c sur une distance suffisamment grande λ . Cette distance λ est considérée comme un paramètre qui représente la dépendance des propriétés à rupture du matériau en fonction de la température. Ce modèle est ensuite utilisé dans Curry et Knott (1979). Contrairement à la conclusion de Richie et al. (1973), les auteurs montrent que cette distance λ vient du traitement statistique.

Beremin (1983) montre dans ses travaux que le modèle RKR est trop simple et ne peut pas bien modéliser la rupture par clivage. Il propose un modèle à l'échelle macroscopique construit en se basant sur la connaissance de la distribution de défauts et sur la théorie du maillon le plus faible. Il introduit deux paramètres caractéristiques du matériau. En se basant sur ce modèle, la mécanique de la rupture par clivage a un développement important depuis deux décennies (Rossoll et al., 1996; Renevey et al., 1996; Lambert-Perlade, 2001; Hausild, 2002). À cette époque, plusieurs autres modèles sont aussi proposés, *e.g.* le modèle WST (Wallin et al., 1984), le modèle de Margolin (Margolin et Shvetsova, 1996). Une revue synthétique de ces modèles est présentée dans Mathieu (2006).

Dans cette section, nous reprenons en détail les modèles de rupture par clivage associés au modèle de Beremin. Nous rappellerons également d'autres modèles pour avoir une vision générale de l'Approche Locale à l'échelle macroscopique.

1.3.2 Principe de l'Approche Locale

Le principe de cette approche est de modéliser la rupture de manière locale, *i.e.* que le champ de contraintes, le champ de déformations, la rupture et toutes les variables d'états sont calculés localement dans la partie endommagée de la structure (en pointe de fissure). Un critère de rupture locale est aussi utilisé pour la modélisation. Cette approche demande deux conditions principales : un modèle micro-mécanique et une bonne connaissance du champ de contraintes et de déformations locales en pointe de fissure. Avec le développement de la méthode des éléments finis et des moyens informatiques, ces deux conditions sont mieux satisfaites. La figure 1.7 représente schématiquement le principe de l'approche. Ces étapes sont détaillées dans Besson et al. (2004).

- Expérimentation : dans cette étape, les essais mécaniques sont réalisés pour observer le matériau avant et après la rupture, ainsi que le comportement à la rupture. La qualification de la rupture doit être réalisée soigneusement.
- Modèle : le modèle doit être construit pour représenter les résultats de l'expérimentation en prenant en compte la base physique du phénomène.
- Identification : les paramètres du matériau intervenant dans le modèle construit doivent être identifiés en comparant les essais et la simulation.
- Simulation : le modèle identifié sera utilisé dans la simulation du cas test dans un premier temps et puis dans celui de la structure industrielle.

En principe, les paramètres des modèles dans l'Approche Locale ne dépendent que du matériau et pas de la géométrie. Ainsi, cette approche assure une meilleure transférabilité de l'éprouvette à la structure (Besson et al., 2004).

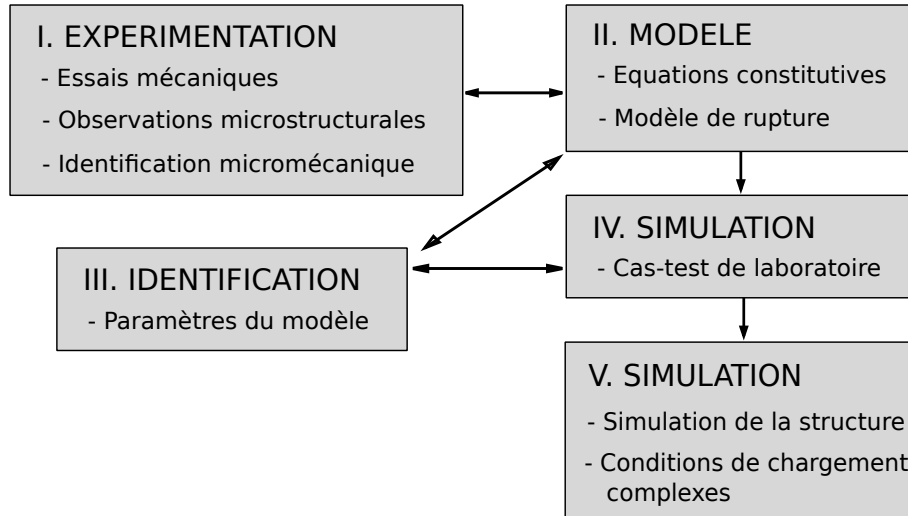


Figure 1.7 – Approche Locale de la rupture (Pineau, 2007)

1.3.3 Théorie du maillon le plus faible

Beremin (1983) présente dans ses travaux une observation de l'effet de la géométrie sur la probabilité de défaillance des éprouvettes. Il montre que la probabilité de trouver une fissure de taille critique est une fonction du volume du matériau. Cela demande de prendre en compte l'aspect statistique dans l'Approche Locale. La théorie du maillon le plus faible est proposée pour répondre à ce besoin.

Cette théorie se base sur une hypothèse simple : la rupture d'un volume élémentaire d'une structure entraînera la rupture de toute la structure. Cette hypothèse nous permet de faire la séparation d'échelle du problème. Au lieu d'estimer directement la ténacité de la structure à l'échelle macroscopique, celle-ci est estimée dans chaque volume élémentaire. La ténacité de la structure est obtenue à partir de celles des volumes élémentaires.

Dans le cadre de la théorie, on divise la structure V en N volumes élémentaire V_0 . Ces volumes élémentaires sont supposés assez petits pour qu'ils soient parfaitement indépendants du point de vue probabiliste et suffisamment grands pour qu'ils soient représentatifs. On associe à chaque volume V_0 une probabilité de survie de $1 - \mathbb{P}_0(\sigma_i)$ sous une contrainte σ_i . La probabilité de rupture de la structure V s'écrit alors :

$$\mathbb{P}_R(\sigma) = 1 - \prod_1^n [1 - \mathbb{P}_0(\sigma_i)] \quad (1.15)$$

où σ_i , $i = 1, \dots, n$ désigne la contrainte dans l'élément i correspondant à un niveau de contrainte σ sur la structure. L'équation (1.15) peut être généralisée par :

$$\mathbb{P}_R(\sigma) = 1 - \exp \left[- \int_V \ln \left(\frac{1}{1 - \mathbb{P}_0(\sigma_i)} \right) \frac{dV}{V_0} \right] \quad (1.16)$$

Le reste du problème est de calculer la probabilité de défaillance $\mathbb{P}_0(\sigma_i)$ de chaque volume élémentaire V_0 à l'échelle microscopique. Pour un volume de structure V donnée, le volume élémentaire V_0 doit être choisi en respectant le principe de séparation des échelles. Par exemple, lorsque V est une éprouvette servant aux essais expérimentaux, V_0 devient un volume du matériau contenant un certain nombre de grains, *e.g.* $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}^3$. Mais lorsque V est un volume élémentaire de taille $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}^3$ dans les simulations, V_0 devient un point dans V , *e.g.* le point d'intégration dans un calcul d'éléments finis. Alors nous distinguons désormais trois échelles principales. L'échelle macroscopique est au niveau de la structure V . Les volumes élémentaires V_0 sont à l'échelle mésoscopique. L'échelle microscopique est associée au niveau de chaque point de calcul (aux éléments finis) dans V_0 .

1.3.4 Modèle de Beremin

1.3.4.1 Modèle original

En montrant les limitations du modèle RKR, [Beremin \(1983\)](#) propose un modèle avec deux paramètres caractéristiques du matériau. Il réalise ensuite des essais sur l'acier A508 Cl.3. Enfin, les deux paramètres caractéristiques du matériau dans le modèle sont identifiés en utilisant les résultats expérimentaux. Ce modèle s'appuie sur plusieurs hypothèses rappelées dans [Mathieu \(2006\)](#) :

- La germination des micro-défauts se produit dès que le matériau se plastifie. Une distribution de micro-défauts est créée et le nombre de micro-défauts est toujours constant.
- L'étape critique de la rupture par clivage est la propagation suivant le critère de Griffith.
- Seule la contrainte principale maximale σ_I intervient dans la propagation du défaut. Les défauts sont supposés perpendiculaires à la direction principale.
- Le volume total V soumis à un champ de contrainte hétérogène sera divisé en N volumes élémentaires V_0 soumis à un champ de contrainte homogène. Les volumes V_0 sont considérés assez petits et indépendants du point de vue probabiliste. Par contre, le choix de V_0 doit assurer que la probabilité d'y trouver un défaut de taille suffisant ne soit pas faible.
- La théorie du maillon le plus faible est appliquée.
- La densité de probabilité de la taille r de défauts dans un volume élémentaire est supposée de forme :

$$f_R(r) = \frac{\alpha}{r^\beta} \quad (1.17)$$

où α et β sont des coefficients que l'on peut calculer une fois V_0 choisi.

Considérons un volume élémentaire V_0^i quelconque soumis à un champ de contrainte principale σ_I^i homogène. Selon le critère de Griffith, la probabilité de rupture $\mathbb{P}_R(\sigma_I^i)$ de ce volume est calculée par :

$$\mathbb{P}_R(\sigma_I^i) = \mathbb{P}(r \geq r_i) = \int_{r_i}^{\infty} f_R(r) dr = \frac{\alpha}{(\beta - 1)r_i^{\beta-1}} \quad (1.18)$$

où r_i est calculé à partir du critère de Griffith (Eq. (1.2)).

$$r_i = \frac{\pi E \gamma^e}{2(1 - \nu^2)(\sigma_I^i)^2} \quad (1.19)$$

En introduisant l'équation (1.19) dans l'équation (1.18), $\mathbb{P}_R(\sigma_I^i)$ s'écrit :

$$\mathbb{P}_R(\sigma_I^i) = \frac{\alpha}{\beta - 1} \left(\frac{\sigma_I^i}{\sqrt{\frac{\pi E \gamma^e}{2(1 - \nu^2)}}} \right)^{2\beta-2} \quad (1.20)$$

Posons :

$$m = 2\beta - 2 \quad (1.21)$$

et

$$\sigma_u = \left(\frac{m}{2\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \sqrt{\frac{\pi E \gamma^e}{2(1 - \nu^2)}} \quad (1.22)$$

L'équation (1.20) devient :

$$\mathbb{P}_R(\sigma_I^i) = \left(\frac{\sigma_I^i}{\sigma_u} \right)^m \quad (1.23)$$

Comme $\mathbb{P}_R(\sigma_I^i)$ est petite, la probabilité de non-rupture du volume total V est calculée par :

$$\ln(\mathbb{P}_{nR}(\sigma_I)) = \ln \prod_{i=1}^N (1 - \mathbb{P}_R(\sigma_I^i)) = \sum_{i=1}^N \ln(1 - \mathbb{P}_R(\sigma_I^i)) \approx \sum_{i=1}^N -\mathbb{P}_R(\sigma_I^i) \quad (1.24)$$

Supposons que le volume V est soumis à un champ de contrainte σ_I homogène. L'équation (1.24) devient alors :

$$\ln(\mathbb{P}_{nR}(\sigma_I)) = -\frac{V}{V_0} \mathbb{P}_R(\sigma_I) \quad (1.25)$$

Si le volume total est soumis à un champ de contrainte hétérogène, seules les parties plastiques V_p contribuent à la rupture du volume total V . La probabilité de non-rupture de V sera alors :

$$\mathbb{P}_{nR}(\sigma_I) = \exp \left[\sum_{V_p} - \left(\frac{\sigma_I^i}{\sigma_u} \right)^m \frac{V_i}{V_0} \right] \quad (1.26)$$

On introduit ici la notion de *contrainte de Weibull* σ_w .

$$\sigma_w = \left[\sum_{V_p} \left(\frac{\sigma_I^i}{\sigma_u} \right)^m \frac{V_i}{V_0} \right]^{\frac{1}{m}} \quad (1.27)$$

La probabilité de rupture du volume total V a alors la forme finalement d'une distribution de Weibull :

$$\mathbb{P}_R(V) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\sigma_w}{\sigma_u} \right)^m \right] \quad (1.28)$$

Notons que ce modèle sépare la dépendance au matériau et à la géométrie. Alors que les paramètres m et σ_u ne dépendent que du matériau, la contrainte de Weibull σ_w présente une dépendance en la géométrie de l'éprouvette. Cela explique bien l'effet de la géométrie de l'éprouvette sur les résultats expérimentaux.

L'auteur conclut que le paramètre $m = 22$ semble constant, tandis que le paramètre σ_u dépend de la taille de grains du matériau. Celle-ci prend les valeurs 2560, 2800, 1970 MPa respectivement pour les types A, B, C de l'acier A508 Cl.3. De plus, ces paramètres sont indépendants de la température.

1.3.4.2 Modification du modèle

Dans la présentation initiale (Beremin, 1983), le groupe de travail Beremin relève déjà la nécessité de corriger le modèle pour bien prendre en compte l'influence des différents facteurs. Il remarque une influence d'une pré-déformation plastique à température ambiante, ou d'une modification de la géométrie de l'éprouvette. Il montre que la contrainte critique à rupture résultant des essais expérimentaux croît avec la déformation. Plusieurs raisons peuvent expliquer ce résultat, parmi lesquelles la réduction de la taille de grains apparente avec les fortes déformations joue un rôle important. Une correction de la contrainte de Weibull est alors proposée prenant en compte la déformation plastique selon la direction principale ε_I^p .

$$\sigma_w = \left[\sum_{V_p} (\sigma_I^i)^m \frac{V_i}{V_0} \exp \left(- \frac{m \varepsilon_I^p}{k} \right) \right]^{\frac{1}{m}} \quad (1.29)$$

où k est un coefficient de correction présentant la variation de la contrainte de Weibull en fonction de la déformation équivalente à la rupture. En prenant en compte cette modification, il obtient $\sigma_u = 2530$ MPa pour le type A et $\sigma_u = 2725$ MPa pour le type B de l'acier A508 Cl.3. Il conclut qu'il est clair que la déformation plastique influence la rupture par clivage. Cette modification est ensuite appliquée au problème en pointe d'une fissure soumise à un chargement symétrique en mode I. Le choix du volume élémentaire V_0 respectant l'hypothèse du champ de contrainte homogène est difficile dans cette zone de fort gradient de contrainte. Le modèle est modifié en considérant que le champ de contrainte n'est homogène qu'à une distance valant 1 ou 2 fois la taille de grains. Le volume élémentaire est alors de taille $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}^3$. Le champ de contrainte en pointe de fissure, connu selon le modèle HRR (Rice et Tracey, 1973), s'écrit :

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = g_{ij}(\theta) f \left(\frac{r}{(K/\sigma_0)^2} \right) \quad (1.30)$$

où σ_0 est la limite d'élasticité, r et θ sont les coordonnées polaires en pointe de fissure, g_{ij} et f sont des fonctions dépendantes de l'écroutissement du matériau, K est le facteur

d'intensité de contraintes. La probabilité de défaillance du matériau s'exprime alors sous forme :

$$\mathbb{P}_R = 1 - \exp\left(-\frac{K_{IC}^4 B C_m}{V_0 \sigma_0^4} \left(\frac{\sigma_0}{\sigma_u}\right)^m\right) \quad (1.31)$$

où B est l'épaisseur de l'éprouvette, C_m est une constante numérique. Le détail de cette extension est explicité dans [Beremin \(1983\)](#). Cette extension du modèle de Beremin présente un lien entre la ténacité K_{IC} et les paramètres du modèle de Beremin.

[Renevey et al. \(1996\)](#) étudie la rupture de l'acier ferritique dans le domaine de transition. Les auteurs développent un modèle identique à celui de Beremin en considérant que ce sont les inclusions de sulfure de manganèse qui sont responsables de l'initiation de la rupture. La probabilité de rupture d'un volume élémentaire V_0 est définie par la probabilité de trouver une fraction volumique d'inclusions supérieure à une valeur critique. La probabilité de rupture totale est ensuite calculée avec la théorie du maillon le plus faible. Ce modèle est appliqué pour la rupture ductile ainsi que pour la rupture fragile. Ensuite un couplage de rupture ductile et fragile est utilisé pour modéliser la rupture dans le domaine de transition. Les auteurs concluent que le modèle de Beremin est bien validé à basse température ($-150^\circ C$). Ils montrent également que le modèle de Beremin corrigé pour le problème en pointe de fissure peut expliquer correctement la variation de la ténacité à la rupture K_{IC} avec la température.

De la même manière, [Le Corre \(2006\)](#) construit un modèle du volume seuil. Il introduit une contrainte seuil dans le modèle de Beremin et utilise celle-ci comme le critère de rupture du volume élémentaire. Le volume élémentaire est dit cassé lorsque la contrainte principale maximale dans celui-ci est supérieure à la contrainte critique. La théorie du maillon le plus faible est ensuite utilisée pour calculer la probabilité de rupture du volume total.

Plusieurs travaux se sont intéressés à la dépendance des paramètres du modèle de Beremin en la température, la géométrie de l'éprouvette et la triaxialité du chargement. [Rossoll et al. \(1996\)](#) réalisent les essais sur l'acier A508 Cl.3 en identifiant les paramètres σ_u et m du modèle de Beremin. Ils concluent que les paramètres identifiés varient légèrement ($< 10\%$) pour différentes géométries de l'éprouvette, différentes températures et différentes vitesses de déformation.

[Wiesner et Goldthorpe \(1996\)](#) étudient l'effet de la température et de la géométrie de l'éprouvette sur les paramètres du modèle de Beremin. Ils utilisent deux types d'éprouvettes, une d'essai de traction et l'autre d'essai de Charpy. Les essais sont réalisés à différentes températures. Ils montrent que les résultats obtenus avec différents géométries ne sont pas les mêmes. De plus, l'effet de la température sur les paramètres est différent selon la géométrie utilisée. Enfin, les auteurs concluent que m croît avec la température, tandis que σ_u décroît. ([Milella et Bonora, 2000](#)) montrent également l'effet important de la géométrie et de la triaxialité, ainsi qu'une faible influence de la température sur m .

[Tanguy \(2001\)](#) identifie les paramètres σ_u et m de l'acier 16MND5 en utilisant le modèle de Beremin initial et celui corrigé avec la déformation plastique. Il réalise les essais Charpy sur différentes géométries d'éprouvette et pour différentes températures. Les paramètres identifiés avec le modèle initial apparaissent dispersés avec la température

et la géométrie. Il constate qu'à différentes températures, les niveaux de déformation plastique à la rupture dans les essais sont différents. Ceux-ci influencent potentiellement les paramètres identifiés.

Dès lors, il prend en compte la correction de la déformation dans le modèle de Beremin en proposant d'utiliser la déformation plastique équivalente ε_{eq}^p au lieu de ε_I^p . Il montre que la dispersion des paramètres semble être réduite et que l'influence de la température sur m est plus faible que sur σ_u . Par ailleurs, même si le modèle de Beremin sépare la dépendance du matériau et celle de la géométrie, Tanguy montre qu'il existe toujours une influence de la géométrie de l'éprouvette sur les paramètres du matériau identifiés. Il explique que la géométrie de l'éprouvette influence non seulement la contrainte de Weibull mais aussi la triaxialité des contraintes. À son tour, celle-ci influence l'identification des paramètres. Il conclut que l'influence de la température, de la géométrie de l'éprouvette et de la triaxialité du chargement sur les paramètres du modèle de Beremin n'est pas évidente. Il accepte les paramètres identifiés avec le modèle de Beremin corrigé ($m = 17,8$ et $\sigma_u = 2925$ MPa avec $k = 4$) en considérant que ces paramètres ne dépendent que du matériau.

Au contraire, Hausild montre dans ses travaux (Hausild, 2002; Hausild et al., 2005) une dépendance importante en la température des paramètres m et σ_u de l'acier 16MND5. Il propose une modification du modèle de Beremin en introduisant une contrainte seuil σ_c . La probabilité de rupture devient :

$$\mathbb{P}_R(\sigma_I, T) = 1 - \exp \left[\sum_{V_p} - \left(\frac{\langle \sigma_I^i - \sigma_c \rangle}{\sigma_u(T)} \right)^{m(T)} \frac{V_i}{V_0} \right] \quad (1.32)$$

avec

$$\sigma_u(T) = 165\,750 \exp(0,0464 T) \text{ MPa}$$

$$m(T) = 0,33 \exp \left(\frac{4\,442,3}{T + 273,13} \right)$$

$$\sigma_c = 1400 \text{ MPa}$$

1.3.5 Autres modèles

De nombreux autres modèles sont également proposés pour la modélisation de la rupture par clivage à l'échelle macroscopique. Wallin et al. (1984) considèrent également que la propagation d'une fissure selon le critère de Griffith est l'étape contrôlant la rupture par clivage. Mais ils n'utilisent pas la théorie du maillon le plus faible. Ils proposent un autre modèle pour la probabilité de rupture totale liée directement à la taille de l'éprouvette.

Le modèle de Margolin et al. (1998) utilise la théorie du maillon le plus faible comme Beremin. La probabilité de rupture totale a aussi la forme de la distribution de Weibull. Mais dans ce modèle, on considère que la rupture se produit lorsque les conditions de germination du clivage et de propagation de fissure sont satisfaites.

Kroon et Faleskog (2002) proposent un modèle utilisant la théorie du maillon le plus faible. La densité de probabilité de la taille de défauts $f_R(r)$ est supposée de forme exponentielle.

Le nombre de défauts dans un volume élémentaire est considéré proportionnel à une fonction dépendant de l'état de déformation $h_1(\boldsymbol{\varepsilon})$. Dès lors la probabilité de germination du clivage est définie par le produit $f_R(r \geq r_0)h_1(\boldsymbol{\varepsilon})$. La propagation d'un clivage germiné est supposée contrôlée par une fonction de l'état de contraintes $h_2(\boldsymbol{\sigma})$. La probabilité de rupture d'un volume élémentaire est alors définie par le produit $f_R(r \geq r_0)h_1(\boldsymbol{\varepsilon})h_2(\boldsymbol{\sigma})$. Les détails des fonctions $h_1(\boldsymbol{\varepsilon})$ et $h_2(\boldsymbol{\sigma})$ sont disponibles dans [Kroon et Faleskog \(2002\)](#).

Le modèle EOH ([Ortner et Hipsley, 1996](#)) considère que les carbures sont responsables de la germination du clivage. Celui-ci est dit amorcé lorsqu'un carbure quelconque dépasse son seuil de déformation plastique. Le clivage amorcé est propagé selon le critère de Griffith. La probabilité de rupture élémentaire est calculée par le produit de la probabilité de germination et celle de propagation. Enfin, la probabilité de rupture cumulée est calculée sur la distance au front de la fissure.

[Bordet et al. \(2005\)](#) proposent un nouveau modèle en analysant le modèle de Beremin et en montrant ses faiblesses. Selon lui, m n'est pas seulement un paramètre intrinsèque du matériau mais dépend également de la géométrie de l'éprouvette. Son estimation de m par une procédure itérative peut être divergente. Par ailleurs, l'hypothèse de la population invariante de carbures amorcés dès le début de déformation plastique apparaît trop simple. Ils rappellent qu'il existe un lien entre le nombre de carbures amorcés et la déformation plastique. Dès lors, ils proposent un modèle de type multi-barrières où la rupture finale est définie comme la compétition des deux événements, germination et propagation. La probabilité de rupture finale est alors calculée par le produit de celles des deux événements.

1.3.6 Limitations

La création du modèle de Beremin a permis d'expliquer et de dépasser certaines limitations de l'Approche Globale. Dans ce modèle, l'effet de la géométrie de l'éprouvette et l'effet intrinsèque du matériau sont bien représentés séparément par les paramètres σ_w et (σ_u, m) respectivement. La validation du modèle est ensuite réalisée dans plusieurs travaux, surtout à basse température ([Renevey et al., 1996](#); [Rossoll et al., 1996](#)). De nombreuses modifications du modèles ont été proposées pour élargir son domaine d'application.

Cependant, le modèle présente également des limitations dans le domaine de transition ductile-fragile de rupture. De nombreux travaux ont essayé d'appréhender la dépendance des paramètres du modèle à la température, aux conditions de chargement, ainsi qu'aux paramètres microstructuraux dans le volume élémentaire ([Wiesner et Goldthorpe, 1996](#); [Milella et Bonora, 2000](#); [Tanguy, 2001](#); [Hausild, 2002](#)). Mais les conclusions ne sont pas évidentes et sont parfois contradictoires. Dans les dernières années, le développement de la modélisation micro-mécanique au niveau cristallin montre que même dans un volume élémentaire le champ de contraintes varie localement avec l'hétérogénéité de la microstructure. Les limites du modèle de Beremin peuvent être expliquées par cette variabilité. Dès lors, une modélisation de l'Approche Locale par clivage à l'échelle microscopique devient indispensable.

1.4 Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique

1.4.1 Introduction

Le modèle de Beremin joue un rôle important dans le développement de l'Approche Locale de la rupture. Cependant, après une longue période d'environ deux décennies de développement constant et d'amélioration, les limitations restent nombreuses. Ces limitations ainsi que le développement de la modélisation micro-mécanique et de la capacité informatique conduisent certains auteurs, *e.g.* (Mathieu, 2006; Libert, 2007) à proposer de modéliser l'Approche Locale de la rupture par clivage à l'échelle microscopique. L'idée principale est de modéliser un volume élémentaire en pointe de fissure au niveau cristallin par un calcul aux éléments finis. Les conditions aux limites sont choisies de façons à représenter l'état de contraintes en ce point. Les champs mécaniques sont représentés localement en chaque point du volume. Les critères de rupture sont vérifiés en chaque point du matériau. La théorie du maillon le plus faible est ensuite appliquée pour calculer la probabilité de rupture finale.

Nous distinguons ici deux aspects du problème. Le premier est celui de la modélisation micromécanique. Il s'agit de la modélisation d'un volume élémentaire en pointe de fissure par un calcul aux éléments finis. Celle-ci nous donne les champs mécaniques en chaque point dans le volume, *e.g.* de contraintes ou de déformations. Le deuxième est celui de la résistance du matériau. Celle-ci est représentée par un critère local de rupture par clivage qui prend en compte l'influence des facteurs microstructuraux, *e.g.* la taille de grains ou l'énergie de surface. L'objectif de l'Approche Locale est de prendre en compte tous les facteurs microstructuraux observables à travers ces deux aspects. Cependant, une telle modélisation n'est pas encore achevée. Dans cette section, nous présenterons les travaux récents sur cette approche qui prend en compte de plus en plus de paramètres microstructuraux dans la modélisation. Nous insisterons dans chacun sur la modélisation microstructurale d'une part, sur le critère de rupture par clivage d'autre part.

1.4.2 Modèle de Mathieu

Mathieu (Mathieu, 2006; Mathieu et al., 2010) étudie le comportement micro-mécanique et à la rupture de l'acier de la cuve de réacteur 16MND5, un acier de microstructure bainitique. Pour la modélisation de la microstructure, il utilise un modèle d'agrégats polycristallins. La structure de paquet de lattes dans chaque grain n'est pas prise en compte dans la simulation. Des orientations cristallographiques aléatoires sont associées à chaque grain.

Au niveau de la modélisation du comportement micro-mécanique du monocristal, il propose un couplage d'un calcul polycristallin et d'un calcul d'homogénéisation prenant en compte l'effet de renforcement des inclusions de carbures. En utilisant une procédure itérative, il identifie les paramètres du modèle de comportement choisi. Le critère de convergence de la procédure est l'accord entre la réponse du calcul polycristallin et celle du calcul d'homogénéisation.

Dans leur modèle d'Approche Locale de la rupture, il considère que la microstructure du volume élémentaire est représentative de tout le matériau. Cela permet d'utiliser un seul champ de contraintes calculé aux points d'intégration d'un seul calcul aux éléments finis. Pour la résistance du matériau, il prend en compte l'hétérogénéité du matériau en jouant sur les paramètres locaux du critère de rupture. Ce modèle se base sur plusieurs hypothèses (Mathieu, 2006) :

- H1 : Les carbures et autres particules de seconde phase sont à l'origine de l'amorçage des défauts, selon un mécanisme similaire au modèle de Smith (Sec. 1.2.2.5). L'effet des particules de plus grande taille n'est pas pris en compte à cette échelle.
- H2 : L'amorçage du clivage se produit sur des particules de seconde phase sous l'action de la plasticité. Le clivage est la rupture de la particule de seconde phase ou la création d'un défaut selon le modèle de Smith. Cela conduit à un seuil de déformation plastique ε_p^{min} équivalente pour provoquer l'amorçage.
- H3 : La population de carbures est à l'origine de la rupture par clivage. Ainsi, une distribution de taille de *carbures* standard est utilisée pour décrire la population de taille de *défauts*. Les plus petits carbures n'interviennent pas dans la rupture.
- H4 : La propagation d'un défaut amorcé suit le critère de Griffith. Le clivage de la ferrite se produit principalement sur les plans de clivage qui sont les plans de la famille $\{100\}$ (Sec. 1.2.2.1). Le champ de contraintes de chargement utilisé dans l'Approche Locale est le champ de contraintes de clivage σ_{cliv}^{max} . Celui-ci est calculé comme le maximum de la projection du champ de contrainte sur les plans de clivage (Sec. 1.5.3.3).
- H5 : Les plus gros défauts ($r \geq r_c^{max}$) sont amorcés dès le début de la plasticité et sont émoussés plutôt que propagés. Cela introduit un seuil de la taille de défauts, au-delà duquel le clivage n'est pas amorcé.
- H6 : Pendant l'étape de propagation, la propagation d'un défaut amorcé dans la matrice ferritique est plus critique que le franchissement des obstacles microstructuraux (joint de grains).

Selon les hypothèses décrites ci-dessus, le critère de rupture finale s'écrit, pour chaque point de calcul :

$$\begin{cases} \varepsilon_p^{eq} \geq \varepsilon_p^{min} \\ \sigma_{cliv}^{max} \geq \sigma_c \end{cases} \quad (1.33)$$

La distribution de la taille de carbures suit le modèle d'Ortner (Ortner et al., 2005).

$$F_R(r_c) = \mathbb{P}(R < r_c) = \exp \left[- \left(\frac{2r_c}{0,072} \right)^{-2,7} \right] \quad (1.34)$$

Nous présentons maintenant plus en détail des différentes étapes de la démarche.

- Étape 1 : Calculer le champ de contrainte de clivage maximale σ_{cliv}^{max} , et le champ de déformation plastique équivalente ε_p^{eq} aux points de Gauss dans le volume V par un calcul aux éléments finis pour tous les niveaux de déformation du trajet de chargement considéré.
- Étape 2 : Projeter une distribution de défauts aux points de Gauss (nombre de défauts par point et leurs tailles associées) et calculer le champ de contraintes de Griffith σ_c correspondantes.
- Étape 3 : Vérifier le critère de rupture (Eq. (1.33)) pour chaque niveau de chargement et déterminer par interpolation le niveau de chargement (repéré par un pseudo-instant de rupture t^r) correspondant au moment où le critère est saturé.
- Étape 4 : Répéter N fois les points 2 et 3 avec N tirages différents de défauts. Pour chaque tirage, un instant de rupture t_i^r , $i = 1, \dots, N$ est obtenu.
- Étape 5 : Les instants sont classés par ordre croissant et on leur attribue un rang correspondant $i = 1, \dots, N$. La probabilité de défaillance cumulée pour le niveau de chargement associé à t_i^r est calculée par la formule :

$$\mathbb{P}_R(V) = \frac{i - 0,5}{N} \quad (1.35)$$

- Étape 6 : Calculer les valeurs ponctuelles des variables locales ($\varepsilon_p, \sigma_{cliv}^{max}$) et moyennées sur V_0 par l'interpolation des valeurs à deux instants t_1 et t_2 où $t^r \in [t_1, t_2]$.

$$v_r = v_1 + (v_2 - v_1) \frac{t^r - t_1}{t_2 - t_1} \quad (1.36)$$

- Étape 7 : Appliquer la théorie du maillon le plus faible pour calculer la probabilité de défaillance de la structure V .

Avec cette méthode de simulation de la rupture par clivage, Mathieu réalise des études paramétriques afin de montrer la dépendance des paramètres σ_u et m du modèle de Beremin à la température et aux conditions de chargement. Les tendances des paramètres sont récapitulées sur la figure 1.8. Il conclut que l'application de ce modèle permet d'étudier différents facteurs locaux caractérisant la probabilité de rupture du volume élémentaire. Ce modèle reproduit bien les tendances d'évolution des paramètres en fonction de la température observée dans les travaux expérimentaux précédents.

Dans ses travaux, Mathieu a pris en compte la variabilité de la microstructure du matériau à l'échelle cristalline (orientations cristallographiques des grains) et également le rôle de renforcement des inclusions de carbures. D'autre part, au niveau de la rupture par clivage, il a étudié l'influence de chaque paramètre sur la contrainte de résistance du matériau et parvient à expliquer les inconvénients du modèle de Beremin.

Cependant, au niveau de la modélisation de la microstructure, il s'est limité à l'échelle de la microstructure austénitique. La structure bainitique n'a pas été prise en compte.

Par ailleurs, il a considéré la microstructure du volume élémentaire comme représentative pour tout le matériau. Cela signifie que l'influence de la variabilité de la microstructure du matériau n'a pas été prise en compte dans la modélisation micromécanique. Cette variabilité, comme le montre la thèse de Libert (Libert, 2007), a une influence importante sur la probabilité de rupture finale. D'autre part, au niveau du critère de rupture, la prise en compte des paramètres microstructuraux, comme le montre de ce travail dans le chapitre 5, n'est pas bien fait.

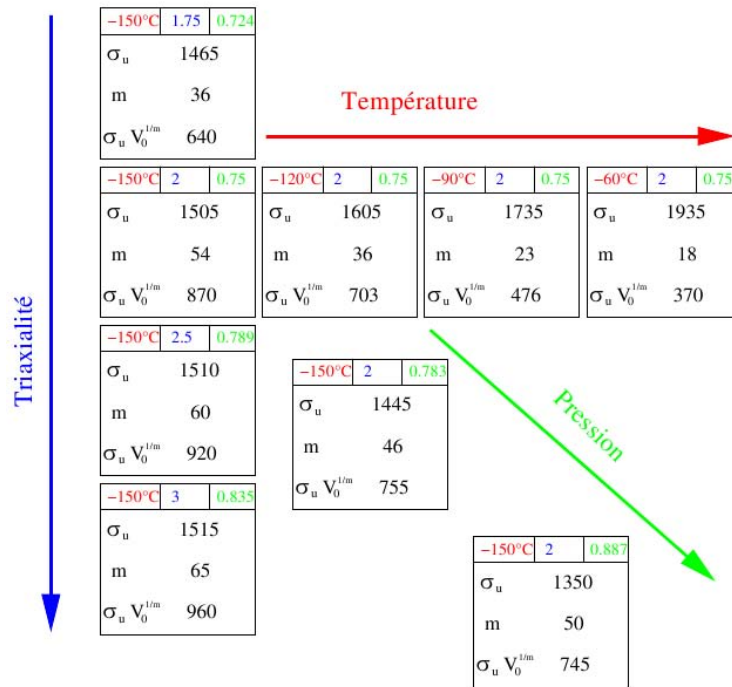


Figure 1.8 – Tendances des paramètres σ_u et m du modèle de Beremin en fonction de la température T , de la triaxialité χ et de la pression relative ζ (Mathieu, 2006)

1.4.3 Modèle de Libert

Libert (Libert, 2007; Libert et al., 2011) étudie également le comportement à la rupture de l'acier 16MND5 en prenant en compte l'effet des mécanismes de plasticité. La microstructure de l'acier est construite en utilisant directement le résultat des observations EBSD (Electron Back Scattered Diffraction) de la microstructure bainitique du matériau. Chaque microstructure d'agrégats de taille $210 \times 210 \times 1 \mu\text{m}^3$ est constituée de 3 couches identiques reproduisant la cartographie EBSD de taille $210 \times 210 \mu\text{m}^2$. Il propose un modèle de plasticité cristalline afin de décrire le comportement de l'acier dans le domaine de transition ductile-fragile. L'identification des paramètres du modèle est réalisée par une procédure itérative afin d'obtenir un bon accord avec l'expérience.

La modélisation est réalisée sur deux agrégats différents, à différentes températures T et avec différents niveaux de triaxialité χ . Mais dans ce modèle, au lieu d'utiliser directement

le champ de contraintes résultant de la modélisation comme dans Mathieu (2006), Libert considère celui-ci comme les réalisations d'une variable aléatoire. Ensuite, il identifie la distribution de cette variable pour prendre en compte l'effet de la variabilité de la microstructure sur le champ de contraintes. Il s'intéresse au champ de contraintes principales maximales σ_I et au champ de contraintes de clivage σ_{cliv} . En faisant des études paramétriques et en comparant les histogrammes des deux champs de contraintes, il conclut que :

- Plus la contrainte principale moyenne $\langle \sigma_I \rangle$ est élevée, plus le champ de contraintes principales σ_I est hétérogène.¹
- Pour un même niveau de triaxialité χ , la distribution du champ de contraintes σ_I est décalée vers les contraintes élevées quand T diminue.
- À une température fixée et pour un même niveau de $\langle \sigma_I \rangle$, l'hétérogénéité de σ_I diminue lorsque la triaxialité χ augmente.
- La comparaison de la distribution de σ_I dans les deux agrégats montre un faible effet de l'agrégat sur σ_I .
- La comparaison des distributions de σ_I et de σ_{cliv} montre un décalage important entre les deux. De plus, le champ σ_{cliv} est beaucoup plus hétérogène que le champ σ_I (Fig. 1.9).

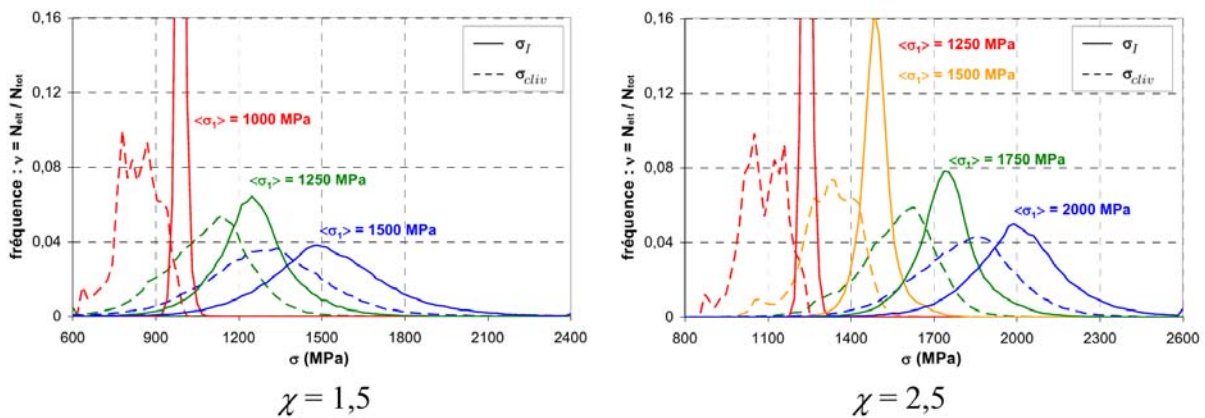


Figure 1.9 – Comparaison des distribution de σ_I et σ_{cliv} ($T = -150^\circ$) (Libert, 2007)

Avec cette étude, Libert montre bien l'influence des différents facteurs sur le champ de contraintes principales maximales. De plus, l'utilisation du champ σ_{cliv} au lieu du champ σ_I dans l'Approche Locale donne des résultats différents en termes de probabilité de défaillance de l'agrégat. Cependant, malgré ces conclusions, en montrant que l'hétérogénéité du champ σ_{cliv} est très importante et que l'agrégat utilisé dans la

1. Compte tenu de la procédure de calcul choisie, il faudrait plutôt parler de *dispersion* des valeurs, plutôt que d'hétérogénéité.

modélisation n'est pas suffisamment représentatif au niveau du champ de contraintes de clivage, il a décidé d'utiliser le champ σ_I dans l'Approche Locale de la rupture. Le champ de contrainte σ_I est identifié avec la distribution de type "valeurs extrêmes" selon la loi de Gumbel. Elle s'écrit :

$$\mathbb{P}(\sigma_I < \sigma) = \exp \left[- \exp \left(- \frac{\sigma - \langle \sigma_I \rangle}{\alpha \langle \sigma_{Mises} \rangle + \beta(T)} + \Gamma'(1) \right) \right] \quad (1.37)$$

où

$$\Gamma'(1) = 0,577$$

$\langle \sigma_{mises} \rangle$ est la contrainte de Von-Mises moyenne dans l'agrégat.

α est une constante.

β est un paramètre dépendant de la température T

Dans ce modèle, les entités responsables de l'amorçage du clivage sont les carbures. La rupture finale est supposée être contrôlée par la propagation d'un défaut amorcé selon le critère de Griffith. La distribution de la taille de carbures suit le modèle de [Lee et al. \(2002\)](#).

$$F_R(r_c) = \mathbb{P}(R < r_c) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{2r_c - 0,00917}{0,10158} \right)^{1,192} \right] \quad \text{si } 2r_c \geq a = 0,00917 \quad (1.38)$$

La probabilité de rupture au niveau d'un défaut est définie comme la compétition de deux événements : le défaut pris au hasard est de taille r_c et la contrainte locale σ_I excède σ_c . Celle-ci s'écrit :

$$\mathbb{P}_R(V_0 | R = r_c) = \mathbb{P}(\sigma_I > \sigma_c(r_c)) = \mathbb{P}(\sigma_I > \sigma_c) f_R(r_c) \quad (1.39)$$

où $f_R(r_c) = \frac{dF_R(r_c)}{dr_c}$ est la densité de probabilité de la taille de carbure. La théorie du maillon le plus faible est ensuite appliquée pour calculer la probabilité de rupture finale du volume V . Celle-ci s'exprime :

$$\mathbb{P}_R(V) = \int_{a/2}^{\infty} \mathbb{P}(\sigma_I > \sigma_c) f_R(r_c) dr_c \quad (1.40)$$

où $a = 0,00917 \mu\text{m}$ est le diamètre minimal des carbures du modèle de [Lee et al. \(2002\)](#).

Au vu de ses études paramétriques, Libert conclut que ce modèle est en bon accord avec la prédiction du modèle de Beremin. Par ailleurs, l'application de ce modèle permet de mettre en évidence l'effet de plusieurs paramètres sur l'évolution de la probabilité de rupture \mathbb{P}_R .

Jusqu'ici en effet, le critère de rupture utilisé est simplement une comparaison entre le chargement dans la structure et la résistance du matériau. L'aspect statistique de la résistance du matériau a bien été prise en compte dans les modèles précédents.

La prise en compte de la variabilité du champ de contraintes dans ce modèle est un apport important de la méthodologie. Cela revient à considérer les différentes valeurs du champ de contraintes comme statistiquement indépendantes, ce qui est une importante approximation. Cependant la modélisation de celui-ci par une variable aléatoire suivant une loi de Gumbel apparaît arbitraire. Surtout, celle-ci ne représente pas la *variabilité spatiale* de la microstructure du matériau.

1.4.4 Autres modèles

Osipov (Osipov, 2007; Osipov et al., 2009) étudie également l'acier 16MND5 dans le problème de la rupture par clivage. Pour la modélisation microstructurale, il modélise deux types de microstructure de l'acier 16MND5 : structure austénitique et bainitique. La première modélisation est identique à celle de Mathieu (2006). La deuxième prend en compte la structure bainitique, ce qui n'avait pas été fait auparavant. L'identification des paramètres du modèle de comportement est réalisée par une procédure itérative, multi-échelle identique à celle de Mathieu (2006). Le champ de contraintes de clivage est récupéré pour chaque grain ou chaque paquet de lattes.

Au niveau de la rupture par clivage, au lieu de travailler avec tout le volume, Osipov propose d'appliquer le modèle de Libert pour chaque grain (pour la structure austénitique) ou pour chaque paquet de lattes (pour la structure bainitique), noté V_0 . La distribution de contrainte de clivage σ_{cliv} est définie par l'ensemble des contraintes aux points d'intégration de chaque grain ou paquet de lattes. Les carbures sont considérés comme étant à l'origine du clivage. Le modèle d'Ortner de distribution de taille de carbure est utilisé. La probabilité de rupture de chaque grain ou chaque paquet de lattes est calculée par :

$$\mathbb{P}(V_0) = \int_{a/2}^{\infty} \mathbb{P}(\sigma_I > \sigma_c) f_R(r_c) dr_c \quad (1.41)$$

La probabilité de rupture finale est calculée par la théorie du maillon le plus faible en considérant que les grains ou les paquets de lattes sont indépendants du point de vue probabiliste. Une comparaison entre les deux cas montrera l'effet de la structure bainitique sur la probabilité de rupture finale. Osipov montre également une possibilité de développer un modèle multi-barrières en se basant sur son approche. Toutefois, malgré la prise en compte de la structure bainitique dans la modélisation, ce modèle ne prend pas en compte la variabilité spatiale de la microstructure.

Dans ses travaux sur l'acier 16MND5, Nguyen (2010) insiste sur l'effet de l'irradiation sur la ténacité du matériau. Il utilise une modélisation de la microstructure simplifiée en se limitant au niveau de grains comme dans Mathieu (2006). Il propose une modification du modèle de comportement classique pour prendre en compte l'effet de l'irradiation. Les paramètres sont ensuite identifiés en accord avec l'expérience. Pour la rupture par clivage, il reprend le modèle proposé par Osipov dans son travail. Il considère les grains austénitiques comme étant les volumes élémentaires, indépendants du point de vue probabiliste. La probabilité de rupture finale est calculée par la théorie du maillon le plus faible. Pour calculer la probabilité de rupture des grains, la rupture de chacun est

définie par une chaîne d'événements de rupture des paquets de lattes. La probabilité de rupture d'un grain n'est pas calculée par la théorie du maillon le plus faible mais par un modèle de micro-ruptures multiples.

Rezaee (2011) étudie la rupture par clivage de l'acier de type C35R en insistant sur le rôle des inclusions de carbures. La microstructure du matériau est simplifiée par l'utilisation de grains hexagonaux au lieu de cellules de Voronoï. Les inclusions de carbures sont prises en compte comme celles de second phase réparties dans la structure cristalline. Rezaee réalise tout d'abord des modélisations de la microstructure par des calculs aux éléments finis à différentes températures. Ensuite, la distribution des contraintes moyennes dont chacune est calculée dans chaque carbure, est identifiée par le modèle de Weibull.

Rezaee propose de tester deux cas de rupture par clivage, celle contrôlée par l'étape de germination et celle contrôlée par la propagation. Dans le premier cas, la probabilité de rupture d'un volume élémentaire est représentée par celle d'y trouver au moins un carbure dont la contrainte moyenne est supérieure à un seuil donné. Cette probabilité est ensuite calculée en se basant sur la distribution de contraintes moyennes des carbures. En comparant la prédiction du modèle avec les résultats expérimentaux, il conclut que le modèle de la rupture contrôlée par la germination n'est valable qu'à basse température.

Dans le deuxième cas, il utilise le critère de Griffith pour la propagation. Chaque volume élémentaire est supposé soumis à un champ de contraintes principales homogène. Lorsque la contrainte principale d'un volume quelconque est supérieure à celle de Griffith, le volume est considéré activé et sa probabilité de rupture par la germination calculée ci-dessus contribuera à celle de la rupture finale. Avec cette modification, il obtient un bon accord entre la prédiction et les essais.

1.4.5 Conclusion

Le développement de l'Approche Locale de la rupture par clivage à l'échelle microscopique nous permet de prendre en compte de plus en plus de paramètres influant aussi bien sur l'effet du chargement (champ de contraintes local) que sur la résistance. Mathieu (2006) a bien expliqué l'évolution des paramètres du modèle de Beremin avec la température et la triaxialité en prenant en compte l'influence de la structure cristalline dans la modélisation. Libert (2007) développe la méthodologie en y ajoutant la variabilité de la structure cristalline. De la même manière, Osipov (2007) modélise l'effet de la structure bainitique à l'échelle plus fine que les travaux précédents. Il suggère également une possibilité de développer la méthodologie par un modèle multi-barrières. De l'autre côté, Rezaee (2011) insiste sur le rôle des carbures. Ces développements ouvrent des pistes dans différentes directions.

Notre travail suit l'idée de Mathieu (2006); Libert (2007) pour prendre en compte de plus en plus finement la variabilité de la microstructure dans la modélisation. En remarquant que la variabilité spatiale de la microstructure n'était pas prise en compte dans les travaux précédents, nous nous intéressons à cet aspect dans notre travail. Un modèle de champ aléatoire gaussien est proposé pour modéliser le champ de contraintes dans un volume

élémentaire. La modélisation de la microstructure est de type d'agrégats polycristallins comme dans [Mathieu \(2006\)](#) sans prendre en compte l'effet de renforcement des inclusions de carbures. Dans la section suivante, nous présenterons la microstructure de l'acier 16MND5, ainsi que le modèle de comportement de l'acier utilisé dans [Mathieu \(2006\)](#).

1.5 Acier 16MND5 - Matériau de la cuve de réacteur

1.5.1 Introduction

La modélisation micromécanique est une des étapes principales dans la résolution de notre problème. Il s'agit de la modélisation de la microstructure, du comportement micromécanique du matériau et de la mise en place des calculs aux éléments finis. ON reprend dans ce travail la modélisation de type agrégats polycristallins utilisée dans [Mathieu \(2006\)](#) sans prendre en compte l'influence de renforcement des carbures. Cette section est consacrée à la présentation de la microstructure et du modèle de comportement du matériau. On présente en détail la microstructure de l'acier 16MND5, matériau de la cuve de réacteur. On décrit ensuite la modélisation de la microstructure par un modèle d'agrégats polycristallins. Enfin, on présente le modèle de comportement élasto-plastique du matériau. La mise en place des calculs aux éléments finis sera présentée dans le chapitre 4.

1.5.2 Présentation de l'acier 16MND5

1.5.2.1 Composition chimique de l'acier 16MND5

L'acier 16MND5 est un acier faiblement allié et souvent utilisé pour forger les viroles qui forment la cuve des centrales nucléaires européennes. La composition chimique de l'acier 16MND5 est présentée dans le tableau 1.2.

C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	MO
0,159	0,008	0,005	1,37	0,24	0,7	0,17	0,50
V	Cu	Co	Al	N	O	Sn	As
< 0,01	0,06	< 0,01	0,023	0,007	35 ppm	50 ppm	160 ppm

Tableau 1.2 – Composition chimique de l'acier 16MND5 (pourcentages massiques) ([Renevey, 1998](#))

1.5.2.2 Structure cristalline à l'échelle atomique

À l'échelle atomique, l'acier 16MND5 a une structure cristalline constituée de la répétition d'une maille élémentaire. Cette maille est de forme cubique centrée ou *Body Centered Cubic* en anglais (BCC) (Fig. 1.10).

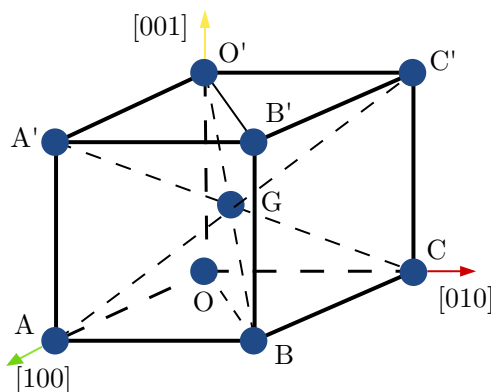


Figure 1.10 – Maille élémentaire de structure cubique centrée (BCC)

La notation des vecteurs ou des plans dans le réseau cristallin est établie selon l'indice de Miller. Notons les trois vecteurs unitaires \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} .

- Un vecteur quelconque est noté par ses coordonnées dans le réseau. Par exemple vecteur $\mathbf{OO}' = 0\mathbf{x} + 0\mathbf{y} + 1\mathbf{z}$ est noté $[001]$. Les coordonnées négatives sont notées par une barre. Par exemple, la coordonnée -1 est notée par $\bar{1}$.
- Un vecteur directionnel est noté par $[ijk]$ où i, j, k sont les plus petits entiers naturels proportionnels à ces coordonnées. Par exemple, le vecteur directionnel correspondant au vecteur $\mathbf{OG} = \frac{1}{2}\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{y} + \frac{1}{2}\mathbf{z}$ est noté $[111]$.
- Un plan est repéré par son vecteur normal. Par exemple, le plan $AA'CC'$ dont le vecteur normal est $\mathbf{OB} = 1\mathbf{x} + 1\mathbf{y} + 0\mathbf{z}$ est noté (110)

1.5.2.3 Structure d'agrégats polycristallins à l'échelle microscopique

À l'échelle microscopique, l'acier 16MND5 possède une microstructure de bainite revenue. Celle-ci s'obtient par deux cycles de traitement thermique : austénisation - trempe à l'eau. À l'étape d'austénisation entre 865°C et 895°C , l'acier est à l'état de grains austénitiques (grain mère). Dès le début du trempé à l'eau, la ferrite commence à croître sous forme de lattes en partant des joints de grains austénitiques (Fig. 1.11). Chaque grain contient un certain paquet de lattes. Les orientations cristallographiques sont constantes dans un paquet de lattes, mais différentes d'un paquet à l'autre. Ces orientations sont dépendantes de celles des joints de grains. Grâce à cette différence, malgré la constitution monocristal des paquets de lattes, le comportement global de l'acier est de type polycristallin. La figure 1.12 montre une représentation de la microstructure de l'acier 16MND5.

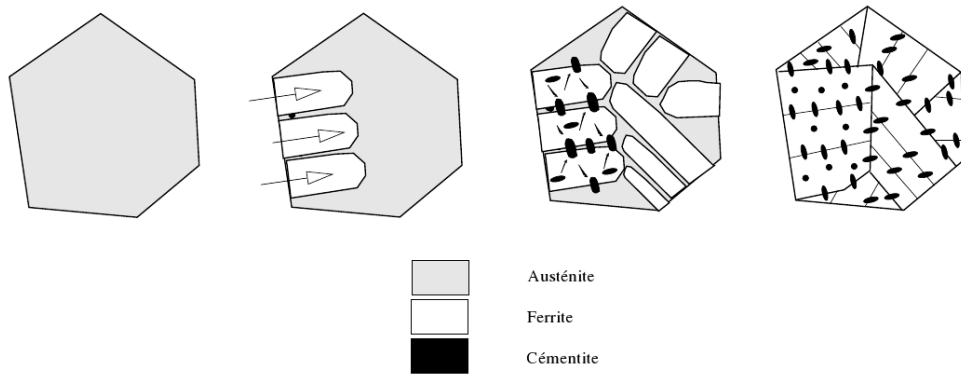


Figure 1.11 – Les étapes de la transformation bainitique (Mathieu, 2006)

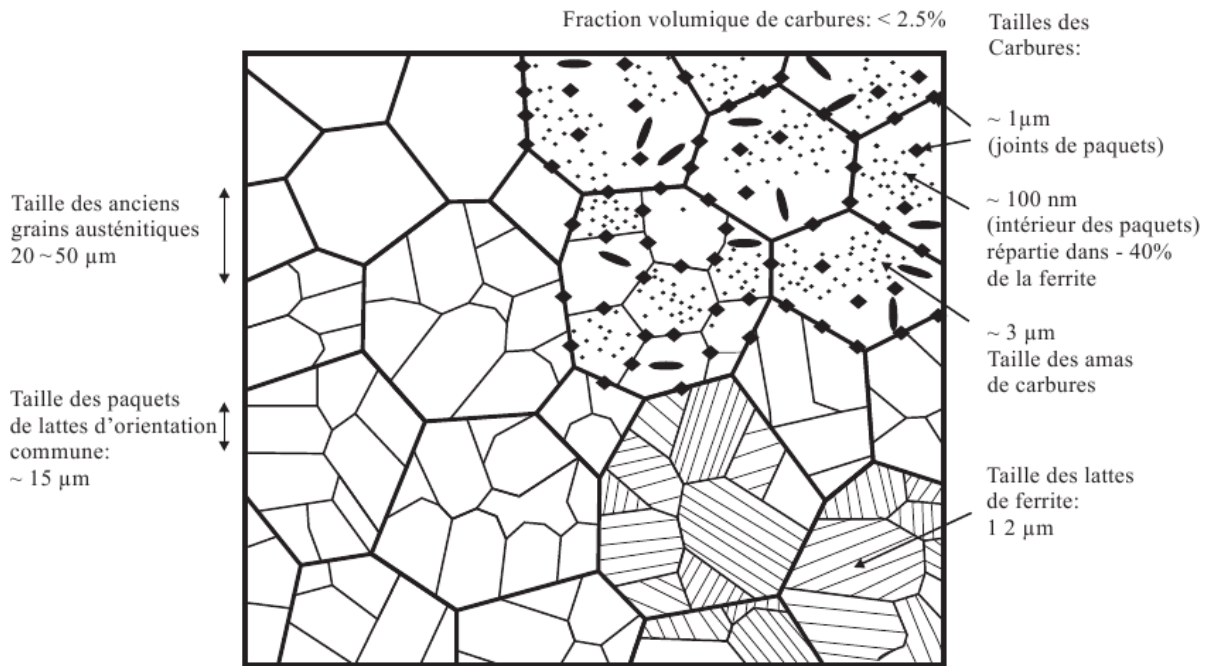


Figure 1.12 – Représentation de la microstructure de l'acier 16MND5 (Mathieu, 2006)

Cette microstructure est observée expérimentalement dans plusieurs travaux (Gourgues et al., 2000; Mathieu, 2006; Libert, 2007). La figure 1.13 présente la microstructure de grains austénitiques et de paquets de lattes observée par les méthodes EBSD (*Electron Back Scattering Diffraction*) et par microscope optique (Gourgues et al., 2000).

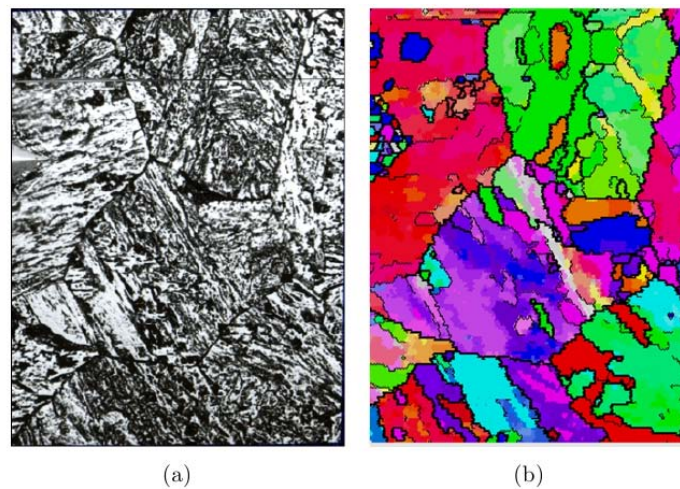


Figure 1.13 – Observation de la microstructure de l’acier 16MND5 par (a) microscope optique et (b) EBSD (Gourgues et al., 2000)

1.5.2.4 Précipités

La cémentite et le sulfure de manganèse sont également répartis dans l’acier. La cémentite existe sous forme d’amas de carbure Fe_xC avec x compris entre 2, 3 et 3. Elle est répartie dans les paquets de lattes et aux joints de grains austénitiques. Le sulfure de manganèse existe sous forme d’inclusion ellipsoïdale ou très allongée de taille de 5 à 50 μm . La figure 1.14 montre la présence de carbures aux joints de grains et dans les paquets de lattes. La présence des inclusions de sulfure de manganèse est présentée sur la figure 1.15. Cependant, à l’échelle de la modélisation de ce travail, la probabilité de trouver une inclusion de sulfure de manganèse dans le volume élémentaire est presque nulle. Dès lors, ce type de précipité n’est pas pris en compte dans ce travail de thèse.

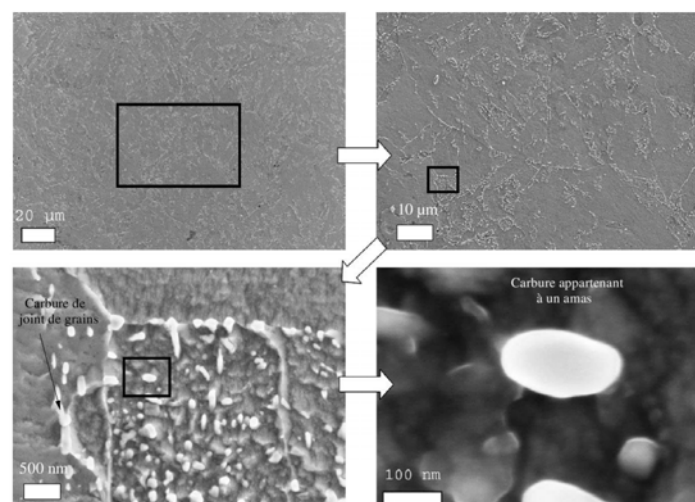


Figure 1.14 – Observation de la répartition de carbures dans l’acier 16MND5 (Mathieu, 2006)

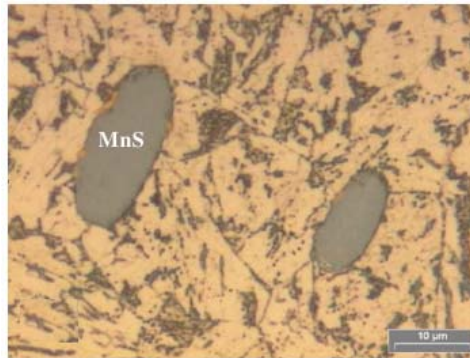


Figure 1.15 – Observation des inclusions de sulfure de manganèse dans l’acier 16MND5 (Mathieu, 2006)

1.5.2.5 Essai de traction quasi-statique

Renevey (1998) présente dans sa thèse des courbes de traction idéalisées de l’acier 16MND5 pour différentes températures, comme l’indique la figure 1.16. Sur ces courbes, une partie de la perturbation correspondant au palier de Lüders a été éliminée. D’après la figure, plus la température est basse, plus la limite d’élasticité est élevée. Quant à l’écrouissage, il semble ne pas dépendre de la température.

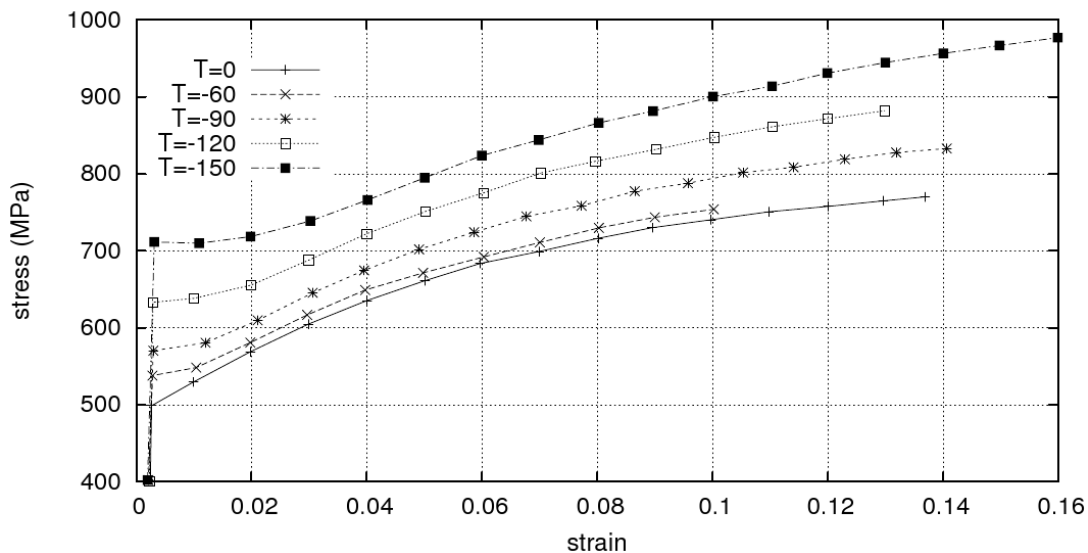


Figure 1.16 – Essai de traction uni-axiale réalisé sur l’acier 16MND5 à différentes températures (Renevey, 1998)

1.5.3 Modélisation du comportement de l'acier 16MND5

1.5.3.1 Niveau de la modélisation

Dans ce travail, on se propose de réaliser une modélisation identique à celle de [Mathieu \(2006\)](#). Nous nous limiterons à l'échelle des grains dans la modélisation, *i.e.* la structure de paquets de lattes dans chaque grain ne sera pas prise en compte. Chaque grain est un monocristal. Les orientations cristallographiques sont considérées constantes dans un grain et varient aléatoirement d'un grain à l'autre. Une telle modélisation de la microstructure nous permet d'étudier l'effet de la variabilité spatiale de la microstructure de l'acier en changeant la structure d'agrégats et les orientations cristallographiques dans les grains. La modélisation de la microstructure aléatoire sera précisée dans le chapitre (Chap. 4).

Dans cette section, nous présentons la modélisation du comportement du monocristal. Certains modèles de comportement du monocristal sont disponibles dans la littérature. Ils se basent principalement sur deux approches. La première considère la densité de dislocation comme variable interne, tandis que la deuxième est de type phénoménologique et considère les glissements sur les systèmes de glissement comme variables internes. On peut trouver une revue synthétique des deux approches et des différents modèles dans [Fivel et Forest \(2004\)](#); [Mathieu \(2006\)](#); [Libert \(2007\)](#). Compte tenu des choix de modélisation retenus dans ce mémoire, nous ne présenterons que le modèle phénoménologique utilisé dans [Mathieu \(2006\)](#).

1.5.3.2 Comportement élastique

Dans toutes les modélisations micromécaniques, la déformation totale est décomposée en une déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ et une déformation plastique $\boldsymbol{\varepsilon}^p$. En termes de taux de déformation, cela s'écrit :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p \quad (1.42)$$

La loi de comportement élastique s'écrit :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^e \quad (1.43)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur de contraintes d'ordre 2, \mathbf{C} est le tenseur d'élasticité d'ordre 4. Les tenseurs d'ordre 2, *e.g.* $\mathbf{A} = \{\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon}\}$, avec la notation de Voigt s'écrivent sous la forme d'un vecteur :

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{22} \\ a_{33} \\ \sqrt{2}a_{23} \\ \sqrt{2}a_{31} \\ \sqrt{2}a_{12} \end{bmatrix} \quad (1.44)$$

Il s'ensuit que le tenseur d'élasticité d'ordre 4 se met sous la forme d'une matrice symétrique. Comme on l'a vu dans la section 1.5.2, la ferrite a une structure cristalline

cubique centrée. L'élasticité cubique se caractérise par trois coefficients indépendants, C_{11} , C_{12} et C_{44} . Le tenseur d'élasticité sous la notation de Voigt s'écrit :

$$[\mathbf{C}_{ij}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} \end{bmatrix} \quad (1.45)$$

De la même façon, le tenseur de complaisance élastique s'écrit :

$$[\mathbf{S}_{ij}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} \end{bmatrix} \quad (1.46)$$

où le module d'Young E , le coefficient de Poisson ν et le module de cisaillement G sont définis par :

$$\begin{cases} E = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \\ \nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \\ G = C_{44} \end{cases} \quad (1.47)$$

Les valeurs numériques des coefficients C_{11} , C_{12} , C_{44} sont prises dans Pesci (2004).

$$\begin{cases} C_{11} = 237400 \text{ MPa} \\ C_{12} = 134700 \text{ MPa} \\ C_{44} = 116400 \text{ MPa} \end{cases} \quad (1.48)$$

1.5.3.3 Comportement plastique

a. Systèmes de glissement

La déformation plastique du matériau cristallin est causée par le déplacement des dislocations dans les plans et suivant les directions atomiques les plus denses. Un couple plan-direction constitue un *système de glissement*. Il est représenté par le vecteur normal au plan \mathbf{n} et celui colinéaire à la direction de glissement \mathbf{k} , et noté par $(\mathbf{n})[\mathbf{k}]$. Comme la structure cristalline est symétrique, il existe plusieurs systèmes de glissement équivalents. De tels systèmes de glissement forment une *famille de glissement* notée par $\{\mathbf{n}\}\langle\mathbf{k}\rangle$. La figure 1.17 présente trois systèmes de glissement du matériau de structure cristalline cubique centrée (BCC).

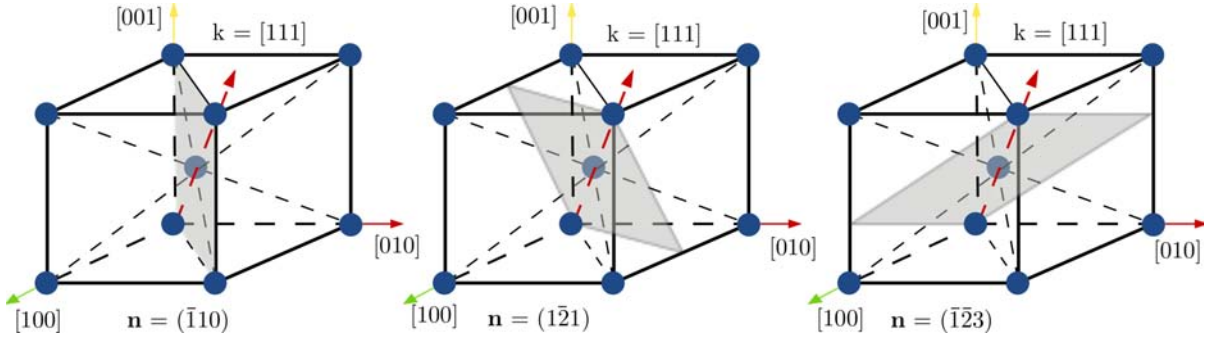


Figure 1.17 – Trois systèmes de glissement du matériau cristallin BCC. De gauche à droite : $(\bar{1}10)[111]$, $(\bar{1}21)[111]$, $(\bar{1}23)[111]$

Ces trois systèmes de glissement sont les représentants des trois familles de glissement du matériau de structure cristalline cubique centrée.

- Famille $\{110\}\langle 111 \rangle$: 12 systèmes qui sont actifs à basse comme à haute température.
- Famille $\{112\}\langle 111 \rangle$: 12 systèmes qui sont actifs principalement à haute température.
- Famille $\{123\}\langle 111 \rangle$: 24 systèmes qui sont actifs principalement à très haute température (à partir de $T_{fusion}/2$).

Dans ce travail, nous supposons que les 24 derniers systèmes sont inactifs dans le domaine de la rupture par clivage étudié. Dès lors, ils ne sont pas pris en compte dans la modélisation.

b. Activation des systèmes de glissement

Pendant la déformation plastique du matériau, l'activation d'un système de glissement est contrôlée par un seuil portant sur la *contrainte de cisaillement* sur ce système. Celle-ci est définie par la projection de l'état de contraintes sur le système. Considérons un essai de traction simple comme l'indique la figure 1.18. Pour un système de glissement $(\mathbf{n})[\mathbf{k}]$ quelconque, notons χ l'angle que \mathbf{n} fait avec la direction de chargement. La force \mathbf{F} est décomposée en deux composantes suivant deux directions \mathbf{n} et \mathbf{k} . Seule la composante tangentielle $F \cos \theta$ appliquée sur la section $S_0 / \cos \chi$ génère la contrainte de cisaillement τ sur ce système. Celle-ci s'écrit :

$$\tau = \frac{F}{S} \cos \theta \cos \chi = \sigma \cos \theta \cos \chi \quad (1.49)$$

Cette contrainte de cisaillement est dite *cission résolue*. Le terme $\cos \theta \cos \chi$ est appelé le *facteur de Schmid* \mathbf{R} . En fonction des vecteurs \mathbf{n} et \mathbf{k} , le facteur de Schmid s'écrit :

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{k} + \mathbf{k} \otimes \mathbf{n}) \quad (1.50)$$

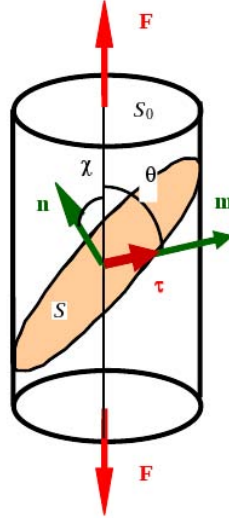


Figure 1.18 – Activation du système de glissement - Loi de Schmid (Pommier, 2011)

où \otimes désigne l'opérateur de produit tensoriel. La cission résolue devient (la convention de sommation sur les indices répétés est utilisée) :

$$\tau = \mathbf{R} : \boldsymbol{\sigma} = R_{ij} \sigma_{ij} \quad (1.51)$$

Définissons le seuil τ_c comme la cission critique correspondante à la première activation d'un système de glissement. La cission résolue atteint sa valeur maximale τ_{max} lorsque $\theta = 45^\circ$, $\chi = 90^\circ - \theta$ et $\tau_{max} = \frac{\sigma}{2}$. La loi de Schmid s'écrit :

$$\begin{cases} \sigma < 2\tau_c & \text{élasticité} \\ \sigma \geq 2\tau_c & \text{plasticité} \end{cases} \quad (1.52)$$

Notons que le facteur de Schmid \mathbf{R} joue le rôle du facteur de projection de la direction du chargement à un système de glissement.

c. Approche phénoménologique du glissement

Cette approche considère les glissements sur les systèmes de glissement comme les variables internes. La déformation plastique totale est définie par la somme des projections sur la direction de déformation de glissement pour les 24 systèmes. Elle s'écrit :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \sum_{g=1}^{24} \dot{\gamma}^g R_{ij}^g \quad (1.53)$$

où $\dot{\gamma}^g$ et R_{ij}^g sont respectivement le glissement et la facteur de Schmid du système de glissement g . De la même façon, la cission résolue sur le système g est calculée par la projection de l'état de contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ par le facteur \mathbf{R}^g et s'écrit :

$$\tau^g = \mathbf{R}^g : \boldsymbol{\sigma} \quad (1.54)$$

Les équations (1.53) et (1.54) permettent de passer du comportement à l'échelle cristalline au comportement continu à l'échelle microscopique. Le problème est maintenant de décrire l'évolution des variables internes en fonction de la cission résolue et de l'histoire du glissement sur chaque système de glissement correspondant.

d. Loi d'écoulement

La loi d'écoulement représente l'évolution de chaque variable interne γ^g en fonction de la cission résolue sur ce système g . Elle s'exprime sous forme élastoviscoplastique de type Norton :

$$\dot{\gamma}^g = \left(\frac{|\tau_{eff}^g| - \tau_c^g}{K} \right)^n \text{sign}(\tau^g) \quad (1.55)$$

où τ_{eff}^g est la cission résolue effective du système de glissement g , τ_c^g est la cission résolue critique, K et n sont les coefficients intrinsèques du matériau. Notons que le terme visqueux n'a aucune signification physique. Il est ajouté pour permettre la sélection automatique des systèmes de glissement actifs. Dès le début de la déformation plastique, tous les systèmes de glissement sont considérés actifs. Mais, grâce à la forme puissance, le taux de glissement ne sera significatif que pour les systèmes dont la cission résolue effective est bien supérieure à la valeur critique. Les termes τ_{eff}^g et τ_c^g , à leur tour, évoluent en fonction de l'histoire de la déformation. Cette évolution sera détaillée ci-dessous.

e. Écrouissage isotrope

Le modèle d'écrouissage isotrope a pour but de décrire l'évolution de la cission résolue critique τ_c d'un système en fonction de l'histoire de déformation, *i.e.* le glissement cumulé sur chacun des systèmes. Il est représenté par une loi de type exponentiel, proposée par [Cailletaud \(1988\)](#); [Méric et Cailletaud \(1991\)](#). Elle s'exprime comme suit :

$$\tau_c^g = \tau_{c_0}^g + Q^g \sum_{s=1}^{24} h^{gs} (1 - e^{-b^g \gamma_{cum}^s}) \quad (1.56)$$

où

$$\gamma_{cum}^s = \int_{t_0}^t |\dot{\gamma}^s| dt \quad (1.57)$$

Le coefficient b^g caractérise la sensibilité du matériau à la saturation de l'écrouissage pour le système g . Le terme $Q^g h^{gs}$ est l'augmentation maximale de la cission résolue critique du système g due à l'effet de durcissement de la déformation du système s . La matrice \mathbf{h} représente les effets de durcissement des systèmes sur eux mêmes (auto-écrouissage représenté par les termes diagonaux de \mathbf{h}), et sur les autres systèmes. Cette matrice est de taille 24×24 comme l'indique la figure 1.19.

	1 2 3	4 5 6	7 8 9	1 1 1 0 1 2	1 1 1 3 4 5	1 1 1 6 7 8	1 2 2 9 0 1	2 2 2 2 3 4
1	2 2 2	2 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
2	2 2 2	1 1 1	2 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
3	2 2 2	1 1 1	1 1 1	2 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1
4	2 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
5	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 2	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
6	1 1 1	2 2 2	1 2 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1
7	1 2 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
8	1 1 1	1 1 2	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
9	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 2 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1
10	1 1 2	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
11	1 1 1	1 1 1	1 1 2	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
12	1 1 1	1 2 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2
13	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
14	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
15	2 2 2	1 1 1	1 1 1	1 1 1	4 4 4	3 3 3	3 3 3	3 3 3
16	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
17	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
18	1 1 1	2 2 2	1 1 1	1 1 1	3 3 3	4 4 4	3 3 3	3 3 3
19	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
20	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
21	1 1 1	1 1 1	2 2 2	1 1 1	3 3 3	3 3 3	4 4 4	3 3 3
22	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4
23	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4
24	1 1 1	1 1 1	1 1 1	2 2 2	3 3 3	3 3 3	3 3 3	4 4 4

Figure 1.19 – Forme de la matrice d'écroissage. Les chiffres 1,2,3,4 représentent respectivement les coefficients h_1, h_2, h_3, h_4 (Mathieu, 2006)

f. Écroissage cinématique

Le modèle d'écroissage cinématique décrit l'évolution de la cission résolue effective pendant la déformation plastique du matériau. Cette évolution représente les interactions à longue distance entre les dislocations. Ce modèle est proposé par Cailletaud (1988); Méric et Cailletaud (1991).

$$\begin{cases} \tau_{eff}^g = \tau^g - x^g \\ x^g = c \alpha^g \\ \dot{\alpha}^g = \dot{\gamma}^g - \frac{d}{c} |\dot{\gamma}^g| \end{cases} \quad (1.58)$$

où d et c sont les paramètres permettant d'ajuster l'effet de la formulation.

1.5.4 Conclusion

Une courte bibliographie sur l'acier 16MND5 est présentée dans cette section. Nous ne nous concentrons que sur les éléments nécessaires à la modélisation micro-mécanique du matériau. Nous présentons la microstructure d'agrégats polycristallins de l'acier 16MND5 en insistant sur la limite à l'échelle des grains dans la modélisation. Au niveau du comportement du monocristal, nous ne reprenons que le modèle phénoménologique utilisé dans [Mathieu \(2006\)](#). Les détails de la modélisation numérique seront présentés ultérieurement dans le chapitre 4.

1.6 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons réalisé une étude bibliographique sur l'Approche Locale de la rupture par clivage et sur le matériau constitutif des cuves de réacteur. Au niveau de l'Approche Locale de la rupture, nous présentons le développement de l'approche depuis sa naissance jusqu'aux travaux les plus récents. Nous montrons la nécessité d'utiliser une modélisation micro-mécanique à l'échelle cristalline dans l'étude de la rupture par clivage des matériaux cristallins. Nous montrons également les limitations des travaux précédents qui ne prennent pas en compte l'effet de la variabilité spatiale de la microstructure dans la modélisation. Notre travail a pour but notamment ajouter cet aspect à la modélisation.

Au niveau du matériau, notre modélisation d'agrégats polycristallins est identique à celle de [Mathieu \(2006\)](#). Une telle modélisation limitée à l'échelle des grains facilite la génération de la microstructure aléatoire en changeant la structure d'agrégats et les orientations cristallographiques. Cela nous permet de prendre en compte la variabilité spatiale de la microstructure dans la modélisation de la rupture par clivage.

Champs aléatoires - Discrétisation et simulation

Sommaire

2.1	Introduction	49
2.2	Rappels sur la théorie de probabilité	49
2.2.1	Espace de probabilité	49
2.2.2	Variable aléatoire	50
2.2.3	Vecteur aléatoire	52
2.2.4	Champ aléatoire	53
2.3	Représentation des champs aléatoires	57
2.3.1	Développement en série	58
2.3.2	Représentation spectrale	59
2.4	Discrétisation des champs aléatoires	64
2.4.1	Introduction	64
2.4.2	Discrétisation par point	64
2.4.3	Troncature du développement en série	65
2.4.4	Conclusion	66
2.5	Simulation des champs aléatoires gaussiens stationnaires	66
2.5.1	Introduction	66
2.5.2	Méthode de Karhunen-Loève discrète	68
2.5.3	Méthode "Circulant Embedding"	69
2.5.4	Méthode spectrale	79
2.5.5	Comparaison des méthodes	83
2.5.6	Conclusion	85
2.6	Simulation des champs aléatoires non-gaussiens non-stationnaires	85
2.6.1	Introduction	85
2.6.2	Méthode de Karhunen-Loève	86
2.6.3	Chaos polynomial	88
2.6.4	Méthode spectrale	89
2.6.5	Conclusion	90
2.7	Conclusion	90

2.1 Introduction

Suivant la nouvelle méthodologie proposée, nous étudions dans ce chapitre les méthodes de représentation et de simulation des champs aléatoires. Ces méthodes serviront à la modélisation de la variabilité spatiale du champ de contraintes dans ce travail. Dès lors, nous étudions en détail ces méthodes et leur efficacité sur plusieurs applications. Nous nous limitons dans le cadre de la thèse à l'utilisation de champs aléatoires *gaussiens*, *ergodiques* et *stationnaires*. Nous présentons cependant une étude bibliographique sur les méthodes de simulation des champs aléatoires non-gaussiens non-stationnaires comme étant les perspectives de notre travail.

Ce chapitre se compose de sept sections. Après l'introduction, nous rappelons dans la deuxième section, des généralités sur les champs aléatoires et les hypothèses simplificatrices, *i.e.* hypothèse de stationnarité et d'ergodicité. Ensuite, dans la troisième section, nous présentons différentes représentations d'un champ aléatoire. À l'aide de ces représentations, les méthodes de discrétisation présentées dans la section suivante servent à construire un modèle numérique de champ aléatoire. La cinquième section est réservée à la présentation des méthodes de simulation d'un champ aléatoire gaussien stationnaire. Les méthodes de simulation de champs non-gaussiens non-stationnaires sont présentées dans la sixième section. Enfin, nous tirons des conclusions et choisissons les méthodes les plus adaptées pour la suite de ce travail.

2.2 Rappels sur la théorie de probabilité

2.2.1 Espace de probabilité

Nous rappelons ici des notions de bases sur la théorie des probabilités. Celles-ci sont présentées plus en détail dans différents ouvrages, *e.g.* [Saporta \(2006\)](#); [Kobayashi et al. \(2012\)](#).

2.2.1.1 Définition

Considérons une observation d'un phénomène aléatoire appelé *épreuve*. Tous les résultats possibles ω de l'épreuve forment un ensemble noté Ω . Un *événement* est un ensemble d'événements élémentaires $\omega \in \Omega$. La théorie des probabilités consiste en l'association de nombres aux événements *i.e.* leur *probabilité d'occurrence* notée \mathbb{P} . L'ensemble de tous les événements possibles ayant une probabilité ainsi définie est appelée une σ -algèbre associée à Ω et est notée \mathcal{F} . *L'espace de probabilité* est construit grâce à ces notions et est noté $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

2.2.1.2 Propriétés

Une mesure de probabilité possède les propriétés suivantes (axiomatique de Kolmogorov).

$$\mathbb{P}(\emptyset) = 0 \quad (2.1)$$

$$\mathbb{P}(A) \geq 0 \quad \forall A \in \mathcal{F} \quad (2.2)$$

$$\mathbb{P}(\Omega) = 1 \quad (2.3)$$

$$\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) \quad \forall A, B \in \mathcal{F}, A \cap B = \emptyset \quad (2.4)$$

où \emptyset désigne l'événement nul (ensemble vide), $A \cap B$ et $A \cup B$ désignent respectivement l'intersection et l'union de deux événements A et B . La relation des probabilités s'écrit :

$$\mathbb{P}(A \cup B) = \mathbb{P}(A) + \mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B) \quad \forall A, B \in \mathcal{F} \quad (2.5)$$

et nous en déduisons :

$$\mathbb{P}(A) \leq \mathbb{P}(B) \quad \text{si } A \subset B \quad (2.6)$$

Un *système complet d'événements* $\{A_1, \dots, A_n\}$ est défini par :

$$A_i \neq \emptyset \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (2.7)$$

$$A_i \cap A_j = \emptyset \quad 1 \leq i < j \leq n \quad (2.8)$$

$$\bigcup_{i=1}^n A_i = \Omega \quad (2.9)$$

Soit A un événement particulier, l'équation (2.5) montre que $\sum_{i=1}^n \mathbb{P}(A_i) = 1$. Le *complémentaire* de A est notée \bar{A} avec $A \cap \bar{A} = \emptyset$ et $A \cup \bar{A} = \Omega$. Nous avons :

$$\mathbb{P}(\bar{A}) = 1 - \mathbb{P}(A) \quad (2.10)$$

2.2.2 Variable aléatoire

2.2.2.1 Définition

Une *variable aléatoire* réelle est une application $X : (\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}) \rightarrow \mathcal{D}_X \subset \mathbb{R}$. Si \mathcal{D}_X est un ensemble fini et dénombrable, la variable X est dite *discrète*. Si \mathcal{D}_X est un intervalle continu de \mathbb{R} , X est une variable *continue*. Chaque variable aléatoire X est complètement définie par sa *fonction de répartition* notée $F_X(x)$ et définie par :

$$F_X(x) = \mathbb{P}(X \leq x) \quad (2.11)$$

Si X est discrète, $F_X(x)$ est une fonction continue par morceau. Si X est continue, $F_X(x)$ est une fonction continue, dérivable. La *densité de probabilité* d'une variable aléatoire continue est alors définie par :

$$f_X(x) = \frac{dF_X(x)}{dx} \quad (2.12)$$

Dans la théorie des probabilités, les variables aléatoires gaussiennes jouent un rôle très important. La densité de probabilité et la fonction de répartition d'une variable normale $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$ sont respectivement présentées par :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (2.13)$$

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx \quad (2.14)$$

Pour une variable gaussienne $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ de moyenne μ et de l'écart-type σ , la densité de probabilité et la fonction de répartition valent respectivement :

$$f_X(x) = \frac{1}{\sigma} \varphi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \quad (2.15)$$

$$F_X(x) = \Phi\left(\frac{x - \mu}{\sigma}\right) \quad (2.16)$$

2.2.2.2 Moments d'une variable aléatoire continue

Le moment d'ordre n de la variable aléatoire X est défini par :

$$m_n = \mathbb{E}[X^n] = \int_{\mathcal{D}_X} x^n f_X(x) dx \quad (2.17)$$

Le moment d'ordre 1 de la variable aléatoire X est sa valeur *moyenne* notée μ_X .

$$\mu_X = \mathbb{E}[X] = \int_{\mathcal{D}_X} x f_X(x) dx \quad (2.18)$$

Le moment centré d'ordre n de la variable X est définie par :

$$m_n^c = \mathbb{E}[(X - \mu_X)^n] = \int_{\mathcal{D}_X} (x - \mu_X)^n f_X(x) dx \quad (2.19)$$

Le moment centré d'ordre 2 de X est sa *variance* :

$$v_X = \mathbb{V}[X] = \mathbb{E}[(X - \mu_X)^2] = \int_{\mathcal{D}_X} (x - \mu_X)^2 f_X(x) dx \quad (2.20)$$

L'*écart-type* et le *coefficient de variation* de X sont respectivement définis par :

$$\sigma_X = \sqrt{v_X} \quad (2.21)$$

$$CV_X = \frac{\sigma_X}{\mu_X} \quad (2.22)$$

Les moments d'ordre 3 et 4 définissent respectivement le *coefficient d'asymétrie* δ_X et le *coefficient d'aplatissement* κ_X .

$$\delta_X = \frac{1}{\sigma_X^3} \mathbb{E}[(X - \mu_X)^3] \quad (2.23)$$

$$\kappa_X = \frac{1}{\sigma_X^4} \mathbb{E}[(X - \mu_X)^4] \quad (2.24)$$

2.2.3 Vecteur aléatoire

Un *vecteur aléatoire* \mathbf{X} est une application $\mathbf{X} : \Omega \rightarrow \mathcal{D}_{\mathbf{X}} \subset \mathbb{R}^n$, où n est la dimension du vecteur \mathbf{X} . Les composantes du vecteur \mathbf{X} sont des variables aléatoires. Si celles-ci sont continues, chaque variable possède une loi de probabilité et le vecteur est caractérisé par la *densité de probabilité conjointe*, notée par $f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ vérifiant :

$$\int_{\mathcal{D}_{\mathbf{X}}} f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad (2.25)$$

où $d\mathbf{x} = dx_1 dx_2 \dots dx_n$.

La *loi marginale* d'une variable X_i est définie par l'intégrale de la densité de probabilité conjointe du vecteur \mathbf{X} sur tout le domaine $\mathcal{D}_{\mathbf{X}}$, excepté la dimension i :

$$f_{X_i}(x_i) = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{X}}^{\sim i}} f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim i} \quad (2.26)$$

où $d\mathbf{x}_{\sim i} = dx_1 \dots dx_{i-1} dx_{i+1} \dots dx_n$ et $\mathcal{D}_{\mathbf{X}}^{\sim i} = \{\mathcal{D}_{\mathbf{X}}, x_i \text{ fixé}\}$. De la même façon, la fonction de répartition conjointe des deux variables X_i, X_j est définie par :

$$f_{X_i, X_j}(x_i, x_j) = \int_{\mathcal{D}_{\mathbf{X}}^{\sim ij}} f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}_{\sim ij} \quad (2.27)$$

Lorsque les composantes de \mathbf{X} sont indépendantes, la loi jointe est le produit des lois marginales :

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^n f_{X_i}(x_i) \quad (2.28)$$

La *densité de probabilité conditionnelle* des deux variables X_i et X_j de densité de probabilité conjointe $f_{X_i, X_j}(x_i, x_j)$ est définie par :

$$f_{X_i|X_j}(x_i|X_j = x_0) = \frac{f_{X_i, X_j}(x_i, x_0)}{\int_{\mathcal{D}_{X_i}} f_{X_i, X_j}(x_i, x_0) dx_i} \quad (2.29)$$

où $\int_{\mathcal{D}_{X_i}} f_{X_i, X_j}(x_i, x_0) dx_i \neq 0$ est la densité de probabilité marginale de la variable X_j .

L'espérance du vecteur \mathbf{X} est un vecteur contenant l'espérance de chaque composante de \mathbf{X} .

$$\mu_{\mathbf{X}} = [\mu_{X_1}, \dots, \mu_{X_n}]^T \quad (2.30)$$

La covariance des deux variables X_i et X_j est définie comme suit, avec $f_{X_i, X_j}(x_i, x_j)$ la densité de probabilité conjointe de X_i et X_j :

$$\text{Cov}[X_i, X_j] = \text{E}[(X_i - \mu_{X_i})(X_j - \mu_{X_j})] = \int_{\mathcal{D}_{X_i, X_j}} (x_i - \mu_{X_i})(x_j - \mu_{X_j}) f_{X_i, X_j}(x_i, x_j) dx_i dx_j \quad (2.31)$$

Dans le cas particulier où X_i et X_j sont indépendantes, la covariance des deux variables est nulle.

$$\mathbb{E}[(X_i - \mu_{X_i})(X_j - \mu_{X_j})] = \mathbb{E}[(X_i - \mu_{X_i})] \mathbb{E}[(X_j - \mu_{X_j})] = 0 \quad (2.32)$$

Le *coefficient de corrélation* est défini par :

$$\rho_{X_i, X_j} = \frac{\text{Cov}[X_i, X_j]}{\sigma_{X_i} \sigma_{X_j}} \quad (2.33)$$

Deux variables indépendantes ont alors un coefficient de corrélation nul. La *matrice de covariance* du vecteur \mathbf{X} est définie par :

$$\mathbf{C}_{i,j} = \text{Cov}[X_i, X_j] \quad (2.34)$$

Un vecteur noté $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{X}}, \mathbf{C})$ est dit gaussien si toute combinaison linéaire de ses composants est une variable aléatoire gaussienne. Il est complètement défini par son vecteur moyen, sa matrice de covariance et la densité de probabilité conjointe suivante :

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \varphi_n(\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{X}}; \mathbf{C}) = (2\pi)^{-n/2} (\det \mathbf{C})^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{X}})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{X}}) \right] \quad (2.35)$$

Dans le cas particulier où toutes les composantes de \mathbf{X} sont centrées réduites, *i.e.* $\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(0, I)$, où I est la matrice identité, sa densité de probabilité conjointe est :

$$f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-n/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n x_i^2 \right] \quad (2.36)$$

2.2.4 Champ aléatoire

2.2.4.1 Définition

Considérons un domaine quelconque $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^d$. Un *champ aléatoire* $H(\mathbf{x}, \omega)$ est un ensemble de variables aléatoires indexées par un paramètre continu $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ et à valeur dans \mathbb{R}^n , où \mathcal{D} décrit la géométrie du domaine considéré. Autrement dit, un champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ est un ensemble de variables aléatoires dépendant d'un paramètre d'indexation $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$. Pour un point \mathbf{x}_0 fixé, $H(\mathbf{x}_0, \omega)$ est une variable aléatoire. Pour un aléa fixé ω_0 , $H(\mathbf{x}, \omega_0)$ est une *réalisation* du champ aléatoire, également appelée *trajectoire*. Le champ est *unidimensionnel* si $d = 1$ ou *multidimensionnel* sinon. Le champ unidimensionnel est aussi appelé un *processus stochastique*. Si $n = 1$ le champ est *scalaire*, sinon il est *vectériel*.

Un champ aléatoire est complètement défini lorsque sa loi de probabilité conjointe de tout ordre est connue, précisément lorsque :

$$\forall k, \forall \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\} \in \mathcal{D}^k, f_{H(\mathbf{x}_1), \dots, H(\mathbf{x}_k)}(h_1, \dots, h_k) \text{ donnée.}$$

Un champ aléatoire est dit *gaussien* si pour tout entier k et tout ensemble $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\} \in \mathcal{D}^k$, le vecteur $\{H(\mathbf{x}_1), \dots, H(\mathbf{x}_k)\}^T$ est un vecteur gaussien. Le champ

aléatoire étant un ensemble de variables aléatoires dépendant du paramètre $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$, sa *moyenne* et sa *variance* dépendent également de \mathbf{x} .

$$\mu(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[H(\mathbf{x}, \omega)] \quad (2.37)$$

$$v(\mathbf{x}) = \sigma^2(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[(H(\mathbf{x}, \omega) - \mu(\mathbf{x}))^2] \quad (2.38)$$

On montre qu'un champ aléatoire gaussien est complètement défini par sa moyenne $\mu(\mathbf{x})$, sa variance $v(\mathbf{x})$ et le modèle de covariance entre ses variables. La *fonction d'auto-covariance* et la *fonction de coefficient d'auto-corrélation* sont définies respectivement par :

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \text{Cov}[H(\mathbf{x}), H(\mathbf{x}')] \quad (2.39)$$

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{\sigma(\mathbf{x})\sigma(\mathbf{x}')} \quad (2.40)$$

Une présentation générale des champs aléatoires est donnée dans [Vanmarcke \(1988\)](#).

2.2.4.2 Hypothèse de stationnarité et d'ergodicité

Considérons un champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$. Pour un aléa ω_0 , nous avons une réalisation $h(\mathbf{x}, \omega_0)$ du champ. Pour chaque point \mathbf{x}_0 , nous avons une variable aléatoire $H(\mathbf{x}_0, \omega)$ associée à une densité de probabilité $f_{H(\mathbf{x}_0)}(h)$. Introduisons respectivement le *moment spatial* d'ordre n ($m_n^{\mathcal{D}}$) et le *moment d'ensemble statistique* d'ordre n ($m_n^{\mathbf{x}_0}$) :

$$m_n^{\mathcal{D}} = \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} h^n(\mathbf{x}, \omega_0) d\mathbf{x} \quad (2.41)$$

$$m_n^{\mathbf{x}_0} = \mathbb{E}[H^n(\mathbf{x}_0, \omega)] = \int_{\mathbb{R}} h^n(\mathbf{x}_0, \omega) f_{H(\mathbf{x}_0)}(h) dh \quad (2.42)$$

Un champ aléatoire est dit *stationnaire* si les moments d'ensemble $m_n^{\mathbf{x}_0}$ et la densité de probabilité $f_{H(\mathbf{x}_0)}(h)$ ne dépendent pas de \mathbf{x}_0 . De plus, si les moyennes spatiales sont égales aux moments d'ensemble statistiques de même ordre, il est dit *ergodique*. Pour un champ aléatoire ergodique, ses caractéristiques statistiques et son modèle de covariance peuvent être estimés à partir d'une seule réalisation du champ, du fait de l'égalité entre la moyenne spatiale et le moment d'ensemble.

Si la moyenne spatiale et la variance spatiale sont respectivement égales à celles d'ensemble statistiques, nous avons un champ aléatoire stationnaire et ergodique d'ordre 2. Pour un tel champ aléatoire, la moyenne μ_H et la variance v_H sont constantes sur tout le domaine considéré \mathcal{D} et sa fonction d'auto-corrélation $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ne dépend que de $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ ([Vanmarcke, 1988](#)).

$$\mu(\mathbf{x}) = \mu = \text{const}$$

$$v(\mathbf{x}) = v = \text{const} \quad (2.43)$$

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \rho(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Dans le cas particulier où la fonction d'auto-corrélation $\rho(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ ne dépend que de la distance $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$, le champ aléatoire est dit *isotrope*.

2.2.4.3 Modèles de covariance des champs aléatoires stationnaires

Le modèle de covariance joue un rôle important dans la description des champs aléatoires. Il représente la covariance des variables associées à deux points distincts du domaine \mathcal{D} . La forme globale d'un modèle de covariance unidimensionnel est présenté dans [Schlather \(2009\)](#).

$$C(x, x') = C_0 + v\rho \left(\frac{|x - x'|}{l} \right) \quad (2.44)$$

où C_0 est la variance des erreurs causés par la localisation et est appelé *l'effet de pépité*; v est la variance (constante) du champ aléatoire et l est la longueur de corrélation.

Dans le tableau 2.1 et sur les figures 2.1 - 2.5, nous présentons les modèles courants de covariance standardisée dans le cas 1D d'un champ aléatoire stationnaire, isotrope, unidimensionnel, *i.e.* $C_0 = 0$, $v = 1$, $l = 1$ et $|x - x'|$ est la distance entre les deux points. Ces modèles sont disponibles dans [Schlather \(1999\)](#) et dans [Schlather \(2009\)](#). Dans le cas multidimensionnel, la covariance est définie comme le produit des covariances unidimensionnelles sur chaque axe.

Nous observons sur les figures qu'en prenant les mêmes valeurs des paramètres, les réalisations associées aux modèles de covariance gaussienne sont plus régulières que celles associées aux autres modèles. De plus, les formes de ces réalisations simulées sont également différentes les unes par rapport aux autres. Cela montre une influence importante du modèle de covariance sur les réalisations résultant de la simulation.

Modèle	Covariance
Gaussien	$C(x, x') = e^{- x-x' ^2}$
Exponentiel	$C(x, x') = e^{- x-x' }$
Sinus cardinal	$C(x, x') = \frac{\sin(x - x')}{ x - x' }$
Sphérique	$C(x, x') = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2} x - x' + \frac{1}{2} x - x' ^3 & \text{si } 0 \leq x - x' \leq 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$
Triangulaire	$C(x, x') = \begin{cases} 1 - x - x' & \text{si } 0 \leq x - x' \leq 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

Tableau 2.1 – Modèles de la covariance standardisée pour les champs aléatoires gaussiens stationnaires (cas 1D)

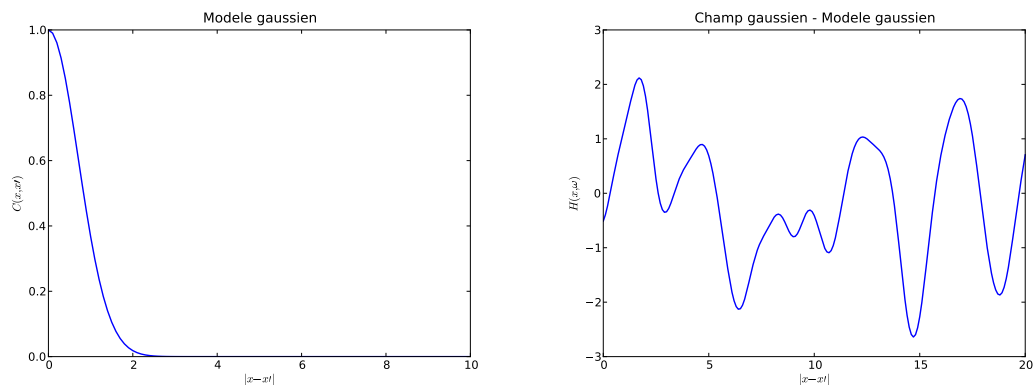


Figure 2.1 – Modèle gaussien - Exemple d'une réalisation d'un champ gaussien :
 $\mu = 0$, $v = 1$, $l = 1$

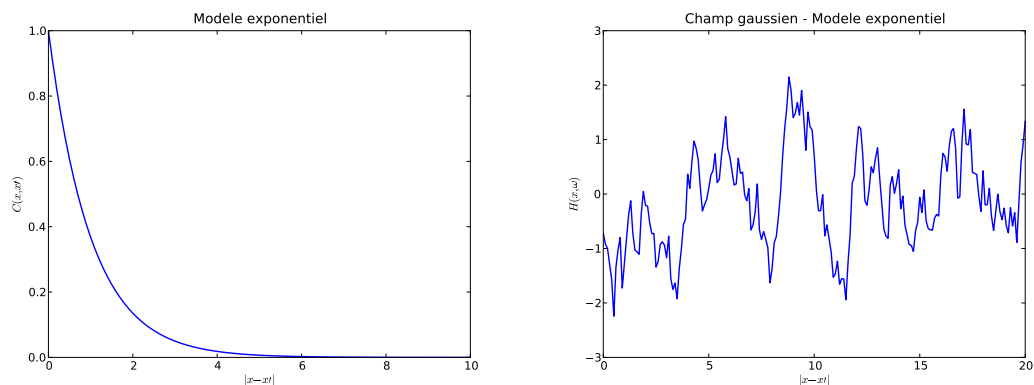


Figure 2.2 – Modèle exponentiel - Exemple d'une réalisation d'un champ gaussien :
 $\mu = 0$, $v = 1$, $l = 1$

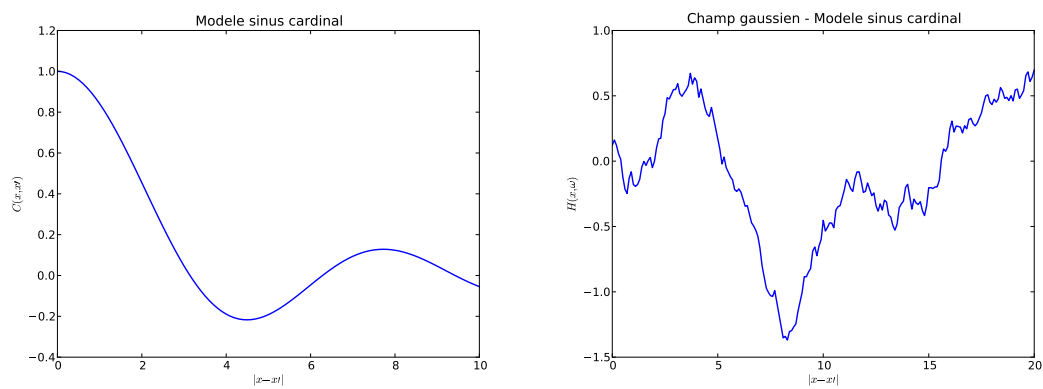


Figure 2.3 – Modèle sinus cardinal - Exemple d'une réalisation d'un champ gaussien :
 $\mu = 0$, $v = 1$, $l = 1$

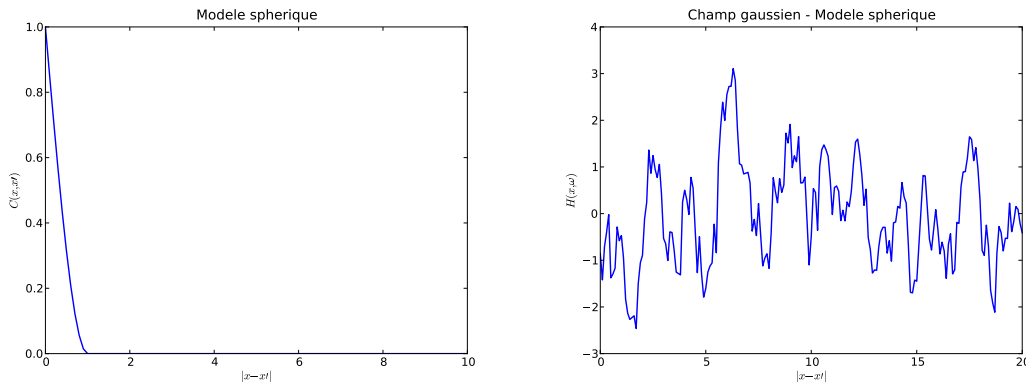


Figure 2.4 – Modèle sphérique - Exemple d'une réalisation d'un champ gaussien :
 $\mu = 0$, $v = 1$, $l = 1$

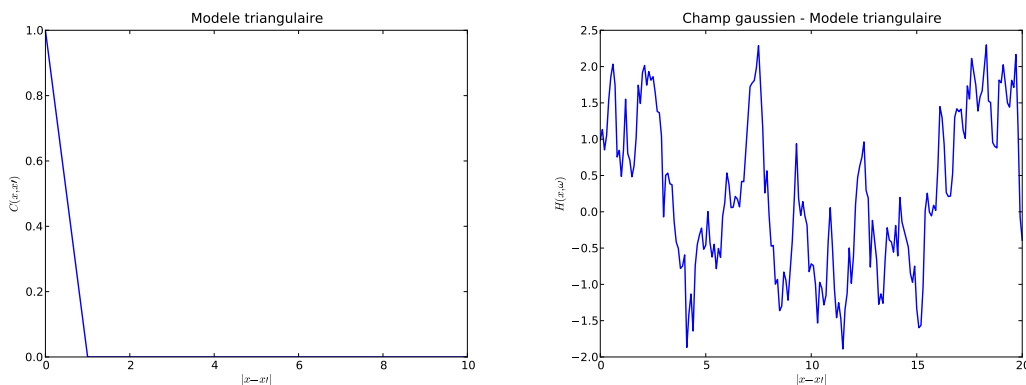


Figure 2.5 – Modèle triangulaire - Exemple d'une réalisation d'un champ gaussien associé :
 $\mu = 0$, $v = 1$, $l = 1$

2.3 Représentation des champs aléatoires

Plusieurs approches sont proposées pour la représentation d'un champ aléatoire gaussien ou non-gaussien. La manière la plus simple est de caractériser le champ aléatoire par ses propriétés probabilistes, *i.e.* la loi de probabilité marginale, la moyenne, la covariance dans l'espace original $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^d$ comme on l'a vu dans la section 2.2.4. Une autre manière est de projeter le champ sur une base de fonctions déterministes quelconques (Kobayashi et al., 2012). L'étude du champ aléatoire est transférée au traitement des coefficients de projection. La troisième approche consiste à travailler avec l'image du champ aléatoire dans le domaine fréquentiel $\mathcal{D}_f \in \mathbb{R}^d$, *i.e.* la présentation spectrale du champ aléatoire (Vanmarcke, 1988; Kobayashi et al., 2012). Nous présentons dans cette section les deux dernières approches qui servent à l'étude de discrétisation des champs dans la section suivante.

2.3.1 Développement en série

Considérons un champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ de moyenne $\mu(\mathbf{x})$ et de fonction de covariance $C_{HH}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ définie pour $\mathbf{x} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$. Un tel champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ peut toujours être projeté sur une base de fonctions déterministes $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ sous la forme :

$$H(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.45)$$

où $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ sont les variables aléatoires de moyenne nulle qui sont les coefficients de projection. Le caractère probabiliste du champ aléatoire est alors porté par ces variables aléatoires $\xi_i(\omega)$. Une réalisation de ces coefficients correspond à une réalisation du champ aléatoire. Le calcul des coefficients de projection dépend du choix de la base. Si nous choisissons un ensemble de fonctions *orthonormales* $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ quelconques pour la base, *i.e.* :

$$\int_{\mathcal{D}} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) d\mathcal{D} = \delta_{ij} \quad (2.46)$$

Les coefficients de projection sont calculés par :

$$\xi_i(\omega) = \int_{\mathcal{D}} [H(\mathbf{x}, \omega) - \mu(\mathbf{x})] \varphi_i(\mathbf{x}) d\mathcal{D} \quad (2.47)$$

La matrice de covariance des variables $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ est facilement calculée et s'écrit :

$$\mathbf{C}_{\xi\xi} = \int_{\mathcal{D}} \int_{\mathcal{D}} C_{HH}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_k(\mathbf{x}) \varphi_l(\mathbf{x}') d\mathcal{D}_{\mathbf{x}} d\mathcal{D}_{\mathbf{x}'} \quad (2.48)$$

Il existe plusieurs choix possibles pour une telle base de fonctions orthonormales. Dans le cas particulier où le champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ est gaussien, [Zhang et Ellingwood \(1994\)](#) propose d'utiliser les polynômes de Legendre. Pour un champ aléatoire quelconque, Karhunen et Loève ([Karhunen, 1947](#); [Loève, 1948](#)) proposent d'utiliser les fonctions $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ solutions du problème aux valeurs propres défini par :

$$\int_{\mathcal{D}} C_{HH}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_i(\mathbf{x}') d\mathcal{D}_{\mathbf{x}'} = \lambda_i \varphi_i(\mathbf{x}) \quad \forall i \in \mathbb{N} \quad (2.49)$$

La projection du champ sur cette base devient :

$$H(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.50)$$

où $\{\lambda_i, i \in \mathbb{N}\}$ sont les valeurs propres correspondantes aux vecteurs propres $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$. L'ensemble de variables aléatoires $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ correspond aux coefficients de projection du champ sur la base choisie. En introduisant (2.50) dans le calcul de $\text{Cov}[H(\mathbf{x}), H(\mathbf{x}')]]$ et en considérant qu'il est égal à $C_{HH}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, nous obtenons :

$$E[\xi_i \xi_j] = \delta_{ij} \quad (2.51)$$

Les équations (2.50) et (2.51) montrent que $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ est un ensemble de variables aléatoires *orthonormales*, c'est à dire *non-corrélées*. La justification de la relation (2.51)

est précisée dans [Ghanem et Spanos \(2003\)](#). Par ailleurs, ces coefficients de projection $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ sont facilement calculés en considérant l'orthogonalité de la base $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ par la formule :

$$\xi_i(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \int_{\mathcal{D}} [H(\mathbf{x}, \omega) - \mu(\mathbf{x})] \varphi_i(\mathbf{x}) d\mathcal{D} \quad (2.52)$$

Les variables aléatoires $\{\xi_i(\theta), i \in \mathbb{N}\}$ ne sont orthonormales que dans le cas où les fonctions de base $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ et les constantes $\{\lambda_i, i \in \mathbb{N}\}$ sont les solutions de l'équation de Fredholm (Eq. (2.49)). Si le champ original est gaussien, $\{\xi_i(\theta), i \in \mathbb{N}\}$ sont des variables aléatoires *gaussiennes* et *orthonormales*, donc *indépendantes* ([Ghanem et Spanos, 2003](#)).

Notons que la représentation du champ aléatoire sous la forme de l'équation (2.50) permet de séparer l'influence des deux aspects, géométrique et aléatoire. L'aspect aléatoire est représenté par les variables aléatoire ξ_i , tandis que celui de la géométrie est représenté par les fonctions propres $\varphi_i(\mathbf{x})$ et par les valeurs propres λ_i .

2.3.2 Représentation spectrale

2.3.2.1 Présentation

La représentation spectrale du champ aléatoire est abordée dans [Vanmarcke \(1988\)](#); [Preumont \(1990\)](#); [Speyer et Chung \(2008\)](#) et [Kobayashi et al. \(2012\)](#). Le champ original et ses propriétés statistiques sont transformés dans le domaine fréquentiel par la transformée de Fourier. Cette section consiste à présenter le lien entre les représentations spatiale et fréquentielle du champ. Pour la simplicité, nous présentons en détail le cas unidimensionnel et le généralisons pour le cas multidimensionnel.

La théorie de la transformée de Fourier montre qu'une fonction $g(x)$ quelconque doit satisfaire deux conditions suivantes pour qu'elle soit transformable ([Kobayashi et al., 2012](#)).

- Condition *carrée intégrable*, *i.e.* :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx < \infty \quad (2.53)$$

- Condition *absolument intégrable*, *i.e.* :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)| dx < \infty \quad (2.54)$$

La transformée de Fourier d'une telle fonction existe et s'écrit :

$$G(f) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{-i2\pi f x} dx \quad (2.55)$$

La transformée de Fourier inverse s'écrit alors :

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(f) e^{i2\pi fx} df \quad (2.56)$$

L'égalité de Parseval présente la correspondance de l'énergie de la fonction $g(x)$ dans deux domaines. Elle s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |G(f)|^2 df \quad (2.57)$$

Considérons maintenant un champ aléatoire unidimensionnel $H(x, \omega)$ de moyenne $\mu(x)$ et de fonction de covariance $C_{HH}(x, x')$ défini dans un domaine \mathcal{D} . Note que $H(x, \omega)$ est aléatoire et on ne peut pas appliquer directement la transformée de Fourier à un tel champ aléatoire. Cependant, un tel champ aléatoire peut être considéré comme une famille de réalisations $h(x, \omega_n)$ aléatoires dont chacune est une fonction déterministe en fonction de x . Si ces fonctions satisfont les conditions (2.53) et (2.54), leurs transformées de Fourier sont également aléatoires. Chacune d'entre elles n'est pas la représentation spectrale du champ $H(x, \omega)$ et ne nous donne pas non plus son contenu spectral. Mais en prenant leur espérance, nous trouvons les relations des propriétés correspondantes des deux représentations.

Le champ aléatoire $H(x, \omega)$ est réécrit par la version tronquée suivante :

$$\check{H}(x, \omega) = \begin{cases} H(x, \omega) & \text{si } x \in \mathcal{D} \\ 0 & \text{si } x \notin \mathcal{D} \end{cases} \quad (2.58)$$

Chaque réalisation $\check{h}(x, \omega_n)$ d'un tel champ satisfait la condition (2.59) ci-dessous et a sa transformée de Fourier $\check{h}(f, \omega_n)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\check{h}(x, \omega_n)| dx < \infty \quad (2.59)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\check{h}(x, \omega_n)|^2 dx < \infty$$

Pour simplifier les notations, dans ce qui suit, on note les familles de réalisations aléatoires $\check{h}(x, \omega)$ et $\check{h}(f, \omega_n)$ respectivement par $\check{H}(x)$ et $\check{H}(f)$.

Pour faire le lien entre représentation spatiale et spectrale, on s'intéresse à l'énergie du champ aléatoire. En prenant l'énergie moyenne de l'égalité de Parseval, nous avons :

$$\lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} |\check{H}(x)|^2 dx \right] = \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} |\check{H}(f)|^2 df \right] \quad (2.60)$$

ou bien :

$$\lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbb{E} \left[|\check{H}(x)|^2 \right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{E} \left[|\check{H}(f)|^2 \right]}{|\mathcal{D}|} df \quad (2.61)$$

Nous introduisons la notion de la *densité spectrale de puissance* (DSP) qui est définie comme l'énergie du champ dans une bande unitaire de la fréquence.

$$P(f) = \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{\mathbb{E} \left[\left| \tilde{H}(f) \right|^2 \right]}{|\mathcal{D}|} \quad (2.62)$$

En développant l'équation (2.62), nous avons :

$$\begin{aligned} P(f) &= \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\tilde{H}(f) \tilde{H}(-f) \right] \\ &= \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \check{H}(x) e^{-i2\pi f x} dx \int_{-\infty}^{\infty} \check{H}(x) e^{i2\pi f x} dx \right] \\ &= \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \check{H}(x_1) e^{-i2\pi f x_1} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} \check{H}(x_2) e^{i2\pi f x_2} dx_2 \right] \\ &= \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \mathbb{E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} \check{H}(x_1) \check{H}(x_2) e^{-i2\pi f (x_2 - x_1)} dx_1 \right] \\ &= \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{-\infty}^{\infty} d\delta \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mathbb{E} \left[\check{H}(x) \check{H}(x + \delta) \right] dx \right] e^{-i2\pi f \delta} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{-\infty}^{\infty} \check{C}(x, x + \delta) dx \right] e^{-i2\pi f \delta} d\delta \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle C(x, x + \delta) \rangle e^{-i2\pi f \delta} d\delta \end{aligned} \quad (2.63)$$

où $\delta = x_2 - x_1$ et $\langle C(x, x + \delta) \rangle$ est la moyenne spatiale de la fonction de covariance définie par :

$$\langle C(x, x + \delta) \rangle = \lim_{|\mathcal{D}| \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{-\infty}^{\infty} \check{C}(x, x + \delta) dx \quad (2.64)$$

L'équation (2.63) montre que dans le cas général (*i.e.* champ aléatoire non-stationnaire), la densité spectrale de puissance est la transformée de Fourier de la moyenne spatiale de la fonction de covariance. C'est le théorème de *Wiener-Khintchine*. Dans le cas où le champ est *stationnaire*, sa fonction de covariance ne dépend que de δ et $\langle C(x, x + \delta) \rangle = C(\delta)$. L'équation (2.63) devient :

$$\begin{aligned} P(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} C(\delta) e^{-i2\pi f \delta} d\delta \\ C(\delta) &= \int_{-\infty}^{\infty} P(f) e^{i2\pi f \delta} df \end{aligned} \quad (2.65)$$

En prenant $\delta = 0$ dans l'équation (2.65), on montre que la variance du champ vaut, dans le cas stationnaire :

$$v = C(0) = \int_{-\infty}^{\infty} P(f)df \quad (2.66)$$

Les relations (2.65) et (2.66) peuvent être généralisées pour le cas multi-dimensionnel en utilisant la transformée de Fourier correspondante.

Notons que cette représentation est valable pour tous les champs aléatoires gaussiens ou non-gaussiens. Mais les équations (2.64) et (2.65) montrent qu'elle est limitée au cas des champs aléatoires stationnaires. Cette représentation est la base pour le développement des méthodes de simulation spectrale (Preumont, 1990; Shinozuka et Deodatis, 1991; Deodatis, 1996) et pour les méthodes d'estimation de la densité spectrale de puissance (Shumway et Stoffer, 2006; Kobayashi et al., 2012). Pour le cas non-stationnaire, des modifications ont été proposées dans Priestly (1967) et ont été utilisées notamment dans Barbato et Conte (2007).

2.3.2.2 Modèles de densité spectrale de puissance

Dans cette section, nous présentons les modèles courants de la densité spectrale de puissance (DSP) pour les champs aléatoires stationnaires unidimensionnels en prenant la transformée de Fourier des fonctions de covariance (Tab. 2.2). La figure 2.6 présente les modèles théoriques et ceux, numériques, calculées à partir des modèles de covariance correspondants et utilisation de la transformée de Fourier rapide (FFT) (Cooley et Tukey, 1965). Nous observons que le modèle numérique a un bon accord avec la référence théorique. Cela nous permet dans la suite de ce mémoire, de travailler avec tous les modèles de DSP, même si dans certains cas nous n'avons pas leurs formes analytiques. La DSP multidimensionnelle est définie comme le produit des DSP unidimensionnelles sur chaque axe.

Modèles	Covariance	DSP
Exponentiel	$C(\delta) = ve^{-\frac{\delta}{l}}$	$P(f) = \frac{v}{2\pi^2 f^2 l^2 + \frac{1}{2l}}$
Gaussien	$C(\delta) = ve^{-\frac{\delta^2}{l^2}}$	$P(f) = v\sqrt{\pi}l^2 e^{-\pi^2 f^2 l^2}$
Sinus cardinal	$C(\delta) = v \frac{\sin(\delta/l)}{\delta/l}$	$P(f) = v\pi l \text{rect}_1(\pi l f)$
Triangulaire	$C(\delta) = v \text{tri}(\delta/l)$	$P(f) = vl \text{sinc}^2(\pi f l)$

Tableau 2.2 – Modèles de la densité spectrale de puissance (cas 1D)

où :

$$\begin{aligned} \text{rect}_a(f) &= \begin{cases} 1 & \text{si } |f| \leq \frac{a}{2} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ \text{tri}(x) &= \begin{cases} 1 - |x| & \text{si } |x| \leq 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \\ \text{sinc}(x) &= \frac{\sin(x)}{x} \end{aligned} \quad (2.67)$$

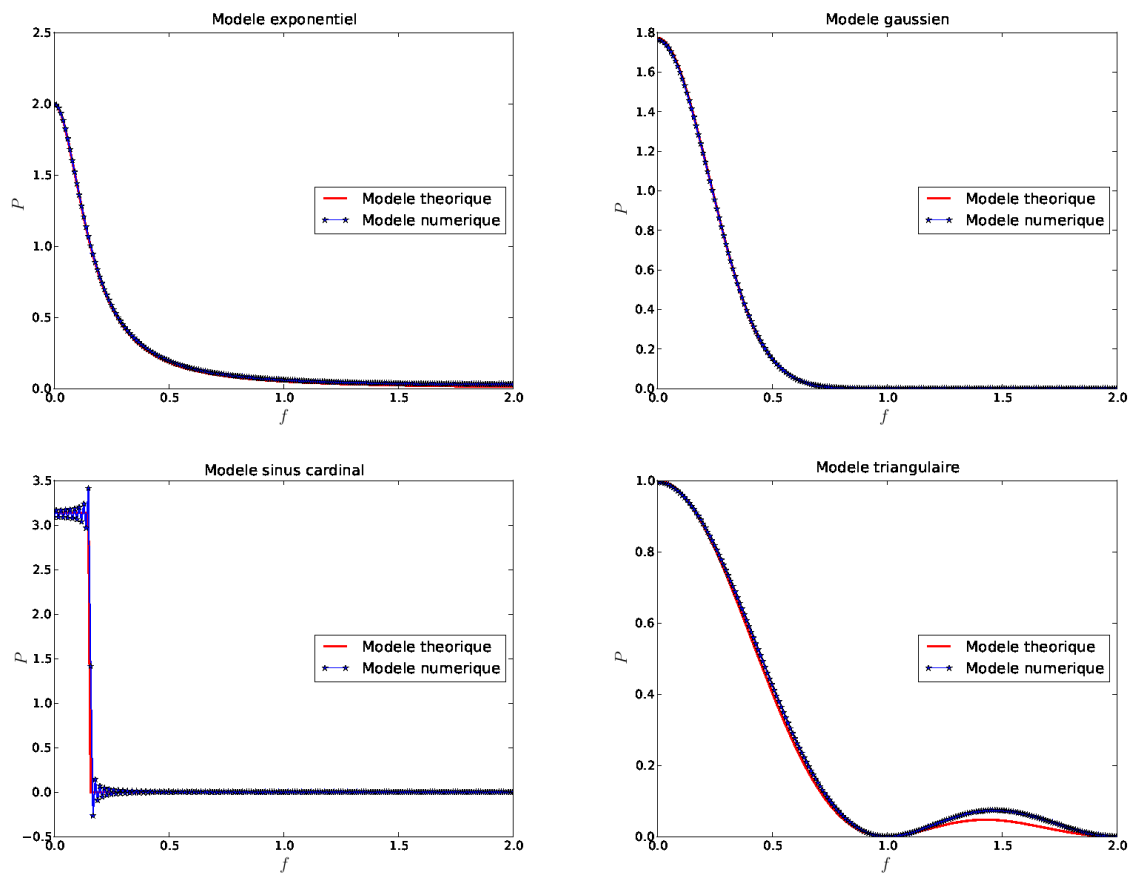


Figure 2.6 – Modèles théoriques et numériques de la densité spectrale de puissance d’un champ aléatoire stationnaire (cas 1D) : $\nu = 1$, $l = 1$

2.3.2.3 Conclusion

Nous avons présenté dans cette section deux approches pour la représentation des champs aléatoires. La représentation de Karhunen-Loève est la plus générale. Elle est utilisable pour tous les champs aléatoires gaussiens, non-gaussiens, stationnaires ou non-stationnaires. La représentation spectrale se limite plutôt au cas stationnaire dans sa version classique. Toutefois, chacune d’entre elles conduit au développement de méthodes de discrétisation, de simulation, ainsi que d’identification particulières, qui sont présentées dans la suite de ce mémoire.

2.4 Discrétisation des champs aléatoires

2.4.1 Introduction

Un champ aléatoire peut se voir comme un ensemble infini de variables aléatoires associées à chaque point de l'espace, ce qui pose des difficultés pratiques pour une modélisation numérique. La construction d'une approximation du champ aléatoire s'appuyant sur un ensemble dénombrable de variables aléatoires associées à un ensemble de points de l'espace est alors nécessaire. Cette approximation est construite en se basant sur une représentation particulière du champ parmi celles provoquées dans les sections précédentes. Plusieurs approches peuvent être envisagées :

- Discrétisation par point, où le champ aléatoire est représenté par N valeurs aux points $\{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N\}$ du domaine de définition.
- Discrétisation moyenne, où l'on divise le domaine en un ensemble d'éléments \mathcal{D}_e . Le champ est alors représenté par une valeur moyenne dans chaque élément.
- Développement en série, où le champ aléatoire est approximé par la troncature d'une série de produits de variables et de fonctions déterministes.

Dans cette section, nous présentons les méthodes de discrétisation par point et par développement en séries qui conduisent naturellement aux méthodes de simulation abordées dans la section suivante.

2.4.2 Discrétisation par point

Dans ce type de discrétisation, le domaine \mathcal{D} est tout d'abord discrétisé par un maillage $\{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N\}$. Le champ est ensuite approximé en se basant sur ses valeurs $H(\mathbf{x}_i)$ aux nœuds ou sur celles aux centres des éléments du maillage. L'approche la plus simple est de considérer que le champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ est directement représenté par le vecteur aléatoire $\mathcal{X} = \{H(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, N\}$ contenant ses valeurs aux nœuds du maillage. Les caractéristiques statistiques du champ sont celles de \mathcal{X} . De façon similaire, [Der Kiureghian et Ke \(1988\)](#) proposent d'approximer le champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ par un vecteur aléatoire contenant ses valeurs aux centres des éléments du maillage. En pratique, le maillage est souvent une grille régulière. Pour bien représenter le champ, il faut que le maillage soit assez fin par rapport aux longueurs de corrélation dans chaque dimension ([Sudret et Der Kiureghian, 2000](#)).

La deuxième approche reprend l'idée de la méthode des éléments finis. Le champ dans chaque élément est approximé par ses valeurs aux nœuds du maillage avec les fonctions de forme. Il s'exprime sous la forme :

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{i=1}^p N_i(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}_i) \quad \mathbf{x} \in \mathcal{D}_e \quad (2.68)$$

où p est le nombre de nœuds de l'élément \mathcal{D}_e et \mathbf{x}_i est la coordonnée du $i^{\text{ème}}$ nœud associé à une fonction d'interpolation N_i . Cette approche approxime mieux le champ. Mais elle demande également une finesse suffisante du maillage. Par ailleurs, sa mise en œuvre est compliquée puisqu'il faut disposer d'outils de maillage et d'interpolation typiquement utilisés pour un calcul aux éléments finis.

Une autre approche dite *estimation linéaire optimale* proposée par [Li et Der Kiureghian \(1993\)](#) prend l'approximation du champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ comme une fonction linéaire du vecteur aléatoire $\mathcal{X} = \{H(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, N\}$.

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{a}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^N b_i(\mathbf{x}) \mathcal{X}_i = \mathbf{a}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}^T(\mathbf{x}) \mathcal{X} \quad (2.69)$$

où les fonctions $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{b}(\mathbf{x})$ sont obtenues par la minimisation de la variance de l'estimation sous une contrainte de non biais :

$$\text{Minimiser} \quad \mathbb{V} [H(\mathbf{x}, \omega) - \hat{H}(\mathbf{x}, \omega)] \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.70)$$

$$\text{Avec} \quad \mathbb{E} [H(\mathbf{x}, \omega) - \hat{H}(\mathbf{x}, \omega)] = 0 \quad (2.71)$$

Cette approche conduit à des approximations plus performantes. Il suffit de disposer d'une grille de points régulièrement répartie dans le domaine \mathcal{D} . Elle est reprise dans la méthode de simulation EOLE ([Li et Der Kiureghian, 1993](#)).

L'avantage de ce type de discrétisation est la facilité de mise en œuvre. Cependant, la nécessité de la finesse du maillage peut poser un problème de ressources informatiques en terme de mémoire. Une étude détaillée de la finesse nécessaire de la grille de points en fonction du type de fonction de covariance est présentée dans [Li et Der Kiureghian \(1993\)](#) et reprise dans [Sudret et Der Kiureghian \(2000\)](#).

2.4.3 Troncature du développement en série

Cette méthode s'appuie sur la représentation du champ aléatoire par un développement en série. Un développement général comme présenté en (2.45) est tronqué à un nombre r de termes. L'approximation du champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ s'écrit alors :

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.72)$$

Dans le cas de la représentation de Karhunen-Loève (Eq. (2.50)), la troncature du développement s'écrit :

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \sqrt{\lambda_i} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.73)$$

La variance de l'erreur d'approximation s'écrit alors :

$$\mathbb{V} [H(\mathbf{x}, \omega) - \hat{H}(\mathbf{x}, \omega)] = v(\mathbf{x}) - \sum_{i=1}^r \lambda_i \varphi_i^2(\mathbf{x}) = \mathbb{V} [H(\mathbf{x}, \omega)] - \mathbb{V} [\hat{H}(\mathbf{x}, \omega)] \quad (2.74)$$

Par orthogonalité des fonctions propres $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$, on peut montrer que.

$$\int_{\mathcal{D}} v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \quad (2.75)$$

Si, de plus, le champ est stationnaire, alors $v(\mathbf{x})$ ne dépend pas de \mathbf{x} et l'intégrale précédente vaut $v|\mathcal{D}|$. Cette relation nous permet de définir rationnellement un critère de troncature. Pour une tolérance (erreur de discrétisation moyenne) ϵ , on va retenir un nombre de termes r tel que :

$$\sum_{i=1}^r \lambda_i \geq (1 - \epsilon) \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i = (1 - \epsilon)v|\mathcal{D}| \quad (2.76)$$

L'ordre de la troncature peut alors être fixé automatiquement une fois ϵ choisi (*e.g.* 10^{-2}).

En terme de temps de calcul, la discrétisation de Karhunen-Loève est optimale au sens où elle fournit la plus petite erreur quadratique parmi les séries du type (2.73) contenant r termes (Ghanem et Spanos, 2003). Par ailleurs, les trajectoires générées par (2.73) sont de même continuité que les modes propres $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i = 1, \dots, r\}$. Cependant, la résolution préliminaire de l'équation intégrale de Fredholm (Eq. (2.49)), dont on ne connaît que peu de solution analytiques, reste le problème principal dans le cas général.

2.4.4 Conclusion

La discrétisation des champs aléatoires est nécessaire pour leur manipulation et leur utilisation pratique. Au lieu de traiter un ensemble infini de variables aléatoires, nous travaillons avec un vecteur aléatoire de taille finie. La première approche basée sur une discrétisation spatiale du domaine \mathcal{D} est simple à mettre en œuvre mais demande en général un nombre important de points. La difficulté principale associée à la deuxième approche est la résolution du problème aux valeurs propres de la décomposition de Karhunen-Loève. Dans la section suivante, nous présentons les méthodes de simulation de trajectoires qui utilisent respectivement ces différentes approches de discrétisation.

2.5 Simulation des champs aléatoires gaussiens stationnaires

2.5.1 Introduction

Les méthodes de simulation se basent sur les différentes méthodes de discrétisation des champs aléatoires présentées à la section précédente. Pour simuler un champ aléatoire gaussien, il faut que sa moyenne, sa variance et son modèle de covariance soient connus (*i.e.* il est alors complètement défini). Dans ce qui suit, nous supposons que le champ aléatoire gaussien est *stationnaire* et *ergodique*. Dès lors, dans cette section, nous nous

concentrons sur les méthodes de simulation de ces champs aléatoires. Une comparaison du temps de calcul associé aux différentes méthodes nous permet de choisir la plus adaptée pour la suite de ce travail.

Considérons un champ aléatoire gaussien stationnaire $H(\mathbf{x}, \omega)$ de moyenne μ , de variance v et de fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. Nous considérons tout d'abord une discrétisation spatiale du champ en un ensemble de points $\{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N\}$. L'objectif est de simuler une réalisation du champ représentée par un vecteur aléatoire $\mathcal{X} = \{H(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, N\}$ dont la matrice de covariance \mathbf{R} est calculée à partir la fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$:

$$R_{ij} = C(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) \quad (2.77)$$

Plusieurs méthodes de simulation sont disponibles dans la littérature (Schlather, 1999, 2009). Nous rappelons tout d'abord la méthode de simulation directe qui utilise la décomposition de Cholesky de la matrice de covariance $\mathbf{R} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ pour la simulation. Une réalisation \mathcal{X} du champ aléatoire gaussien est simulé par le produit $\mathcal{X} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{L}\boldsymbol{\epsilon}$ où $\boldsymbol{\mu} = [\mu, \dots, \mu]$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ sont respectivement le vecteur des moyennes et un vecteur de variables aléatoires gaussiennes centrées réduites. Cette méthode donne une simulation exacte et rapide, *i.e.* la matrice de covariance de la réalisation simulée est exactement \mathbf{R} . Cependant, elle devient coûteuse en temps de calcul (décomposition de Cholesky de la matrice de covariance) lorsque le nombre de points N est grand.

La méthode des *bandes tournantes* a été proposée par Matheron (1973) et reprise dans Schlather (1999). Elle est applicable seulement pour un champ aléatoire *gaussien stationnaire* et *isotrope*. Le point fort de cette méthode est de pouvoir simuler un champ d -dimensionnel ($d = 2, 3$) en se basant sur la simulation d'un processus aléatoire unidimensionnel. Cependant, l'erreur de l'approximation de cette méthode est difficile à contrôler. Nous ne nous intéressons pas à cette méthode dans notre travail.

La méthode dite "*expansion optimal linear estimation*" (EOLE) a été proposée par Li et Der Kiureghian (1993) en combinant la méthode de discrétisation "*optimal linear estimation*" et la représentation de *Karhunen-Loève* du champ aléatoire. Elle n'est applicable que pour les champs gaussiens. Le champ est discrétisé en un ensemble de points $\{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, M\}$ et puis simulé en un autre ensemble de points $\{\mathbf{x}_j, j = 1, \dots, N\}$ ($M < N$). Cette méthode est une modification de la méthode de Karhunen-Loève. Grâce à la discrétisation du champ en un nombre réduit de points, le temps de calcul est réduit considérablement.

La méthode de Karhunen-Loève utilise la discrétisation par la troncature du développement en série (Eq. (2.73)). La résolution du problème aux valeurs propres dans un domaine continu (Eq. (2.49)) est difficile. En ajoutant une discrétisation spatiale (ou une discrétisation par point), on peut se ramener à un problème aux valeurs propres sur la matrice de covariance \mathbf{R} ce qui simplifie le problème. Cette méthode, baptisée *Karhunen-Loève discrète* sera détaillée dans la section 2.5.2.

La méthode "*Circulant Embedding*" a été proposée indépendamment par Dietrich et Newsam (1993), Wood et Chan (1994) et a été développée dans Schlather (1999), Nowak (2004), Percival (2006). Elle utilise la représentation naturelle du champ aléatoire dans le domaine original \mathcal{D} et une discrétisation par point pour la simulation. Malgré une

origine différente, cette méthode et la méthode de Karhunen-Loève discrète ont un même principe de simulation. Cependant, dans la résolution du problème aux valeurs propres de la matrice de covariance, l'approche "Circulant Embedding" exploite des propriétés des matrices de structure particulière en utilisant l'algorithme de Transformée de Fourier Rapide (FFT). Dès lors, le temps de calcul est considérablement réduit. Le détail de cette méthode est présenté dans la section 2.5.3.

Enfin, la *méthode spectrale* utilise la représentation du champ aléatoire dans le domaine fréquentiel pour le simuler. Elle n'est applicable que pour simuler un champ aléatoire gaussien et est présentée dans [Preumont \(1990\)](#). Le champ est simulé dans l'espace de fréquentiel en utilisant une discrétisation spatiale. La réalisation du champ dans l'espace original est obtenue par la transformée de Fourier de celle simulée dans l'espace fréquentiel. L'utilisation de l'algorithme FFT va permettre de réduire le temps de calcul associé à cette méthode.

Dans les sections suivantes, nous détaillons dans un premier temps, respectivement les trois méthodes : Karhunen-Loève discrète, "Circulant Embedding" et spectrale. Dans un deuxième temps, nous comparons les méthodes en insistant sur le lien entre les deux premières et sur l'intérêt de la réduction du temps de calcul pour les des deux dernières.

2.5.2 Méthode de Karhunen-Loève discrète

Cette méthode utilise la discrétisation de Karhunen-Loève présentée dans la section 2.4.3 pour la simulation des champs aléatoires. Nous rappelons ici cette discrétisation (Eq. (2.73)).

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \sqrt{\lambda_i} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.78)$$

où $\{\lambda_i, i \in \mathbb{N}\}$ sont les valeurs propres correspondantes aux vecteurs propres $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ du problème (2.49). Les variables aléatoires $\{\xi_i(\omega), i \in \mathbb{N}\}$ correspondent aux coefficients de projection du champ sur la base choisie. Elles sont orthonormales dans le cas général. Dans le cas où le champ original est gaussien, ces variables sont gaussiennes, orthonormales et indépendantes.

La difficulté principale reste la résolution du problème aux valeurs propres (Eq. (2.49)) pour trouver les valeurs propres λ_i et les fonctions propres $\varphi_i(\mathbf{x})$. Celle-ci peut être surmontée par une discrétisation spatiale du domaine en un ensemble de points $\{\mathbf{x}_i, i = 1, \dots, N\}$. La version "discrète" de l'équation (2.49) devient alors :

$$\mathbf{R}\varphi_i = \lambda_i \varphi_i \quad i = 1, \dots, N \quad (2.79)$$

où \mathbf{R} est la matrice de covariance calculée par l'équation (2.77), λ_i et φ_i sont respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice \mathbf{R} . En tenant compte de ce résultat dans l'équation (2.78), une réalisation d'un champ aléatoire gaussien, stationnaire est simulée par :

$$\mathcal{X} = \mu + \Phi \Lambda^{\frac{1}{2}} \epsilon \quad (2.80)$$

où $\boldsymbol{\mu}$ est le vecteur de moyenne de taille $N \times 1$ dont chaque composante est la moyenne μ du champ, $\boldsymbol{\Lambda}$ est une matrice diagonale de taille $r \times r$ dont la diagonale est le vecteur $\boldsymbol{\lambda}$ contenant les valeurs propres λ_i , $\boldsymbol{\Phi}$ est une matrice de taille $N \times r$ dont chaque colonne est un vecteur propre $\boldsymbol{\varphi}_i$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ est un vecteur de taille $r \times 1$ de *variables gaussiennes centrées réduites indépendantes*.

Cette méthode peut être vue comme une simplification de la méthode de Karhunen-Loève originale. Grâce à la troncature, le nombre de variables prises en compte est en général faible ($r \ll N$), le temps de simulation est réduit. La figure 2.7 présente une réalisation d'un champ aléatoire gaussien stationnaire de modèle de covariance gaussien simulée par cette méthode ainsi que l'estimation de l'erreur correspondante.

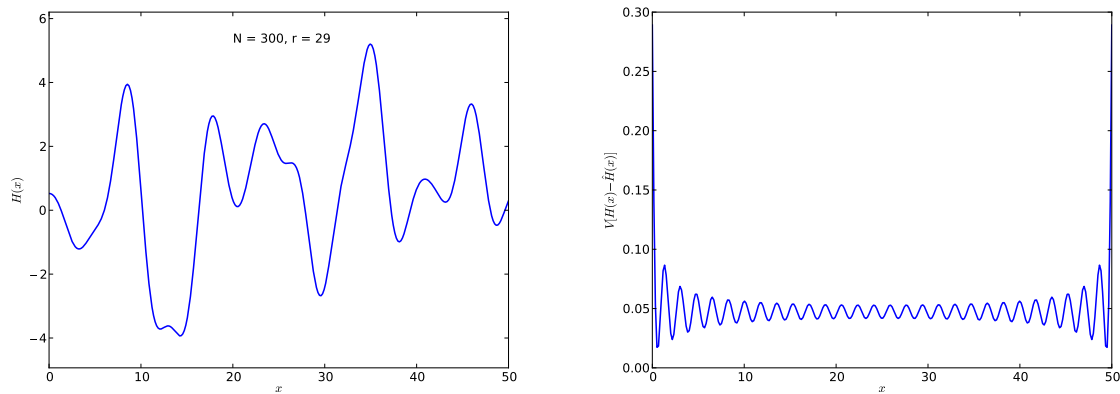


Figure 2.7 – Réalisation d'un champ gaussien avec modèle de covariance gaussien simulée par la méthode de Karhunen-Loève discrète à gauche et l'estimation de l'erreur correspondante à droite : $\mu = 0$, $v = 4$, $l = 2$ ($N = 300$ points, $r = 29$ termes)

2.5.3 Méthode "Circulant Embedding"

Cette méthode exploite certaines propriétés de matrices de structure particulière en utilisant l'algorithme (FFT) pour simuler des réalisations du champ aléatoire gaussien. La matrice de covariance \mathbf{R} originale (Eq. (2.77)) ne possède pas cette structure intéressante. La technique "Circulant Embedding" transforme le problème en introduisant un domaine fictif et une matrice de covariance de structure particulière. Les détails de cette méthode sont disponibles dans [Kozintsev \(1999\)](#); [Schlather \(1999\)](#); [Nowak \(2004\)](#); [Percival \(2006\)](#); [Dang et al. \(2011c\)](#).

Dans ce qui suit, nous présentons tout d'abord certains types de matrices à structures particulières et leurs propriétés. Ensuite, nous présentons le principe de simulation d'un champ aléatoire gaussien stationnaire en supposant que la matrice de covariance est *circulante*. Puis, nous détaillons la technique "Circulant Embedding". Enfin, nous montrons qu'elle est similaire dans son principe de simulation à la méthode de Karhunen-Loève discrète.

2.5.3.1 Matrices structurées

a. Matrice diagonale

Une matrice dont seules les composantes diagonales sont non nulles est dite matrice diagonale. Considérons maintenant une matrice diagonale $\mathbf{\Lambda}$ de taille $n \times n$ dont les composantes positives forment un vecteur $\boldsymbol{\lambda}$. Les propriétés de cette matrice sont :

- Sa racine carrée $\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$ est une matrice diagonale dont les composantes diagonales sont les racines carrées des composantes du vecteur $\boldsymbol{\lambda}$.
- Son inverse $\mathbf{\Lambda}^{-1}$ est une matrice diagonale dont les composantes diagonales sont les inverses des composantes du vecteur $\boldsymbol{\lambda}$.

b. Matrice structurée par bloc

Considérons des matrices quelconques \mathbf{B} de taille $m \times n$ de même structure :

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{bmatrix} \quad (2.81)$$

Une matrice \mathbf{C} est dite *matrice structurée d'ordre 2 par les blocs* \mathbf{B} avec N partitions de ligne et M partitions de colonne si elle possède une structure s'appliquant aux matrices \mathbf{B} , *i.e.* chaque composante C_{ij} est une matrice \mathbf{B} correspondante.

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} [\mathbf{B}]_{11} & \cdots & [\mathbf{B}]_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{B}]_{N1} & \cdots & [\mathbf{B}]_{NM} \end{bmatrix} \quad (2.82)$$

c. Matrice de Toeplitz

Une matrice \mathbf{T} est dite *matrice de Toeplitz* si toutes ses diagonales descendant de gauche à droite sont composées d'un même terme. Une *matrice de Toeplitz symétrique* est complètement définie par sa première ligne. Pour construire la $(k+1)^{eme}$ ligne de la matrice, il suffit de déplacer sa k^{eme} ligne à droite d'une unité et de remplir le premier terme de la $(k+1)^{eme}$ ligne par le $(k+1)^{eme}$ terme de la première ligne. Graphiquement, la structure d'une telle matrice \mathbf{T} de taille $n \times n$ est la suivante :

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} t_1 & t_2 & t_3 & \cdots & t_n \\ t_2 & t_1 & t_2 & \cdots & t_{n-1} \\ t_3 & t_2 & t_1 & \cdots & t_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_n & t_{n-1} & t_{n-2} & \cdots & t_1 \end{bmatrix} \quad (2.83)$$

d. Matrice circulante

Une matrice circulante est une matrice carrée dans laquelle nous passons d'une ligne à la suivante par une permutation circulaire (décalage vers la droite) des composantes. Une matrice circulante \mathbf{C} est présentée graphiquement comme suit :

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_n \\ c_n & c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_2 & c_3 & c_4 & \cdots & c_1 \end{bmatrix} \quad (2.84)$$

Notons qu'une matrice circulante est aussi complètement définie par sa première ligne et qu'elle est aussi une matrice de Toeplitz, mais non-symétrique.

e. Matrice de Vandermonde et matrice de Fourier discrète

Une matrice de Vandermonde est complètement définie par les éléments $\{\alpha_k, k = 1, \dots, n\}$. La k^{eme} colonne de la matrice se compose des éléments α_k à la puissance $(k-1)$ ou bien encore $V_{lk} = \alpha_l^{k-1}, l = 1, \dots, n$. Sous forme matricielle, une matrice de Vandermonde s'écrit :

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \alpha_1^0 & \alpha_1^1 & \cdots & \alpha_1^{n-1} \\ \alpha_2^0 & \alpha_2^1 & \cdots & \alpha_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_n^0 & \alpha_n^1 & \cdots & \alpha_n^{n-1} \end{bmatrix} \quad (2.85)$$

Si α_k sont égaux à β^{k-1} , avec $\beta = e^{-\frac{2\pi i}{n}}$, nous obtenons une matrice de Fourier discrète du problème 1D. Sous forme matricielle, elle s'écrit :

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \beta & \beta^2 & \cdots & \beta^{(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \beta^{n-1} & \beta^{2(n-1)} & \cdots & \beta^{(n-1)^2} \end{bmatrix} \quad (2.86)$$

Pour le problème d - dimensionnel, la matrice de Fourier discrète correspondante est une matrice structurée d'ordre 2 par le bloc donné par la matrice \mathbf{F} ci-dessus. Les propriétés de la matrice de Fourier discrète sont les suivantes (Nowak, 2004) :

- Le produit de la matrice \mathbf{F} avec un vecteur \mathbf{u} quelconque est la transformée de Fourier discrète du vecteur \mathbf{u} , noté $\hat{\mathbf{u}}$. Le calcul direct de ce produit coûte $(n-1)^2$ produits élémentaires. Mais si celui-ci est calculé par l'algorithme de la transformée de Fourier rapide, le coût est seulement de l'ordre de $n \log_2(n)$.

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{F}\mathbf{u} = \mathfrak{F}(\mathbf{u}) \quad (2.87)$$

- \mathbf{F} est une matrice unitaire multipliée par un facteur n . Cela signifie que :

$$\mathbf{F}^H \mathbf{F} = n\mathbf{I} \quad (2.88)$$

où \mathbf{F}^H est la transposée de la matrice complexe conjuguée de \mathbf{F} . Nous en déduisons la transformée de Fourier inverse :

$$\mathbf{u} = \mathfrak{F}^{-1}(\hat{\mathbf{u}}) = \mathbf{F}^{-1}\hat{\mathbf{u}} = \frac{1}{n}\mathbf{F}^H\hat{\mathbf{u}} \quad (2.89)$$

- \mathbf{F} est une matrice symétrique.

$$\mathbf{F}^T = \mathbf{F} \quad (2.90)$$

- La matrice de Fourier contient les vecteurs propres communs à toutes les matrices circulantes. Cela signifie que pour une matrice circulante \mathbf{C} de taille $n \times n$ quelconque, nous avons toujours :

$$\mathbf{C} = \frac{1}{n}\mathbf{F}^H\mathbf{\Lambda}\mathbf{F} \quad (2.91)$$

où $\mathbf{\Lambda}$ est une matrice diagonale contenant les valeurs propres de la matrice \mathbf{C} . Cette propriété nous permet de trouver les valeurs propres d'une matrice circulante via la transformée de Fourier. En multipliant l'équation (2.91) par \mathbf{F} , nous obtenons :

$$\mathbf{F}\mathbf{C} = \mathbf{\Lambda}\mathbf{F} \quad (2.92)$$

Notons qu'une matrice circulante est complètement définie par sa première ligne (Eq. (2.84)). Nous écrivons l'équation (2.92) pour la première ligne :

$$\mathbf{F}\mathbf{C}_1 = \mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_1 \quad (2.93)$$

Comme toutes les composantes de \mathbf{F}_1 sont égales à 1 (Eq. (2.86)), l'équation (2.93) devient :

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{F}\mathbf{C}_1 = \mathfrak{F}(\mathbf{C}_1) \quad (2.94)$$

où $\boldsymbol{\lambda}$ est le vecteur des termes diagonaux de la matrice $\mathbf{\Lambda}$ contenant les valeurs propres de la matrice \mathbf{C} .

En résumé, l'équation (2.94) indique que le vecteur des valeurs propres d'une matrice circulante s'obtiennent par la transformée de Fourier discrète de sa première ligne, qui peut être calculée très efficacement par l'algorithme FFT.

Remarque : Certains auteurs utilisent la définition de la matrice de Fourier suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{F}' = \frac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{F} \\ \mathbf{F}'^{-1} = \frac{1}{\sqrt{n}}\mathbf{F}^H \end{cases} \quad (2.95)$$

ou bien :

$$\begin{cases} \mathbf{F}' = \frac{1}{n}\mathbf{F} \\ \mathbf{F}'^{-1} = \mathbf{F}^H \end{cases} \quad (2.96)$$

2.5.3.2 Principe de simulation

Supposons que la matrice de covariance \mathbf{R} soit une matrice circulante¹. Selon l'équation (2.91), celle-ci possède toujours une décomposition aux valeurs propres de la forme :

$$\mathbf{R} = \frac{1}{N} \mathbf{F}^H \mathbf{\Lambda} \mathbf{F} \quad (2.97)$$

où \mathbf{F} est la matrice de Fourier définie par l'équation (2.86) dont chaque colonne est un vecteur propre de la matrice \mathbf{R} et $\mathbf{\Lambda}$ est une matrice diagonale dont la diagonale $\boldsymbol{\lambda}$ contient les valeurs propres de la matrice \mathbf{R} . La racine carrée de celle-ci est facilement obtenue par :

$$\mathbf{R}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F} \quad (2.98)$$

La justification de l'équation (2.98) s'écrit :

$$\left(\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}\right)^H \mathbf{R}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{N} \mathbf{F}^H \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F} = \frac{1}{N} \mathbf{F}^H \mathbf{\Lambda} \mathbf{F} = \mathbf{R} \quad (2.99)$$

Le champ sera facilement simulé avec le facteur $\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}$. Nous générons tout d'abord un vecteur aléatoire complexe $\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\epsilon}_1 + i\boldsymbol{\epsilon}_2$, où $\boldsymbol{\epsilon}_1$ et $\boldsymbol{\epsilon}_2$ sont les vecteurs aléatoires contenant les *variables gaussiennes centrées réduites indépendantes*. Ensuite, la simulation d'une réalisation complexe \mathcal{X} du champ est simulée par :

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 + i\mathcal{X}_2 = \boldsymbol{\mu} + \left(\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}\right)^H \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.100)$$

où $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_1 + i\boldsymbol{\mu}_2$ est le vecteur complexe avec $\boldsymbol{\mu}_1 = \boldsymbol{\mu}_2$ dont chaque composante est la moyenne μ du champ. Chaque composante \mathcal{X}_1 et \mathcal{X}_2 de \mathcal{X} est une réalisation du champ que l'on veut simuler. En introduisant les équations (2.98), (2.89) dans l'équation (2.100), nous obtenons :

$$\mathcal{X} = \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{\sqrt{N}} \mathbf{F}^H \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{\mu} + \sqrt{N} \mathfrak{F}^{-1} \left(\boldsymbol{\lambda}^{\frac{1}{2}} \circ \boldsymbol{\epsilon}\right) \quad (2.101)$$

où \circ représente le produit terme à terme des deux vecteurs. Le problème posé est de montrer que la matrice de covariance de chacune des deux réalisations \mathcal{X}_1 et \mathcal{X}_2 est exactement la matrice \mathbf{R} . Notons \mathbf{F}_1 et \mathbf{F}_2 respectivement la partie réelle et la partie imaginaire de la matrice de Fourier \mathbf{F} , *i.e.* $\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 + i\mathbf{F}_2$. Comme \mathbf{F} est symétrique, \mathbf{F}_1 et \mathbf{F}_2 sont également symétriques. Nous récrivons l'équation (2.97).

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \frac{1}{N} (\mathbf{F}_1 + i\mathbf{F}_2)^H \mathbf{\Lambda} (\mathbf{F}_1 + i\mathbf{F}_2) \\ &= \frac{1}{N} (\mathbf{F}_1 - i\mathbf{F}_2) \mathbf{\Lambda} (\mathbf{F}_1 + i\mathbf{F}_2) \\ &= \frac{1}{N} [(\mathbf{F}_1 \mathbf{\Lambda} \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 \mathbf{\Lambda} \mathbf{F}_2) + i(\mathbf{F}_1 \mathbf{\Lambda} \mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_2 \mathbf{\Lambda} \mathbf{F}_1)] \end{aligned} \quad (2.102)$$

1. Si l'on prend la forme classique (2.77), ce n'est bien évidemment pas le cas, et nous verrons à la section suivante par quel artifice nous ramener à ce cas.

Comme la matrice \mathbf{R} est réelle, nous avons alors :

$$\begin{cases} \frac{1}{N}(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_2) = \mathbf{R} \\ \mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_2 - \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_1 = \mathbf{0} \end{cases} \quad (2.103)$$

D'autre part, l'équation (2.101) est réécrite par :

$$\begin{aligned} \mathcal{X} = \mathcal{X}_1 + i\mathcal{X}_2 &= \boldsymbol{\mu}_1 + i\boldsymbol{\mu}_2 + \frac{1}{\sqrt{N}}(\mathbf{F}_1 + i\mathbf{F}_2)^H \mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}(\boldsymbol{\epsilon}_1 + i\boldsymbol{\epsilon}_2) \\ &= \boldsymbol{\mu}_1 + i\boldsymbol{\mu}_2 + \frac{1}{\sqrt{N}}(\mathbf{F}_1 - i\mathbf{F}_2)\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}(\boldsymbol{\epsilon}_1 + i\boldsymbol{\epsilon}_2) \\ &= \left[\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{\sqrt{N}}(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2) \right] \\ &\quad + i \left[\boldsymbol{\mu}_2 + \frac{1}{\sqrt{N}}(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2 - \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1) \right] \end{aligned} \quad (2.104)$$

Nous calculons maintenant la matrice de covariance de la réalisation \mathcal{X}_1 .

$$\begin{aligned} \text{Cov}[\mathcal{X}_1\mathcal{X}_1^T] &= \text{E}[(\mathcal{X}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)(\mathcal{X}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)^T] \\ &= \frac{1}{N}\text{E}[(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2)(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2)^T] \\ &= \frac{1}{N}\text{E}[(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2)(\boldsymbol{\epsilon}_1^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_1 + \boldsymbol{\epsilon}_2^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_2)] \\ &= \frac{1}{N}\text{E}[\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1\boldsymbol{\epsilon}_1^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_1] + \frac{1}{N}\text{E}[\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_1\boldsymbol{\epsilon}_2^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_2] \\ &\quad + \frac{1}{N}\text{E}[\mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2\boldsymbol{\epsilon}_1^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_1] + \frac{1}{N}\text{E}[\mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\epsilon}_2\boldsymbol{\epsilon}_2^T\mathbf{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{F}_2] \\ &= \frac{1}{N}\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_1 + 0 + 0 + \frac{1}{N}\mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_2 \\ &= \frac{1}{N}(\mathbf{F}_1\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2\mathbf{\Lambda}\mathbf{F}_2) = \mathbf{R} \end{aligned} \quad (2.105)$$

De la même manière, nous montrons que la matrice de covariance de la réalisation \mathcal{X}_2 est exactement \mathbf{R} . De plus, nous pouvons également montrer que la matrice de covariance entre \mathcal{X}_1 et \mathcal{X}_2 est $\mathbf{0}$, ce qui montre que les deux réalisations sont indépendantes.

En résumé, l'équation (2.101) montre que la simulation d'une réalisation du champ ne nécessite que le vecteur $\boldsymbol{\lambda}$ qui est selon l'équation (2.94) la transformée de Fourier de la première ligne de la matrice \mathbf{R} . Grâce à cette simplification et à l'utilisation de l'algorithme FFT, cette méthode de simulation est très rapide. Les étapes de calcul sont les suivantes :

- Étape 1 : Calculer la première ligne de la matrice de covariance \mathbf{R} , notée \mathbf{R}_1 .
- Étape 2 : Calculer le vecteur des valeurs propres $\boldsymbol{\lambda}$ à partir de \mathbf{R}_1 selon l'équation (2.94), *i.e.* $\boldsymbol{\lambda} = \mathfrak{F}(\mathbf{R}_1)$.

- Étape 3 : Générer un vecteur aléatoire complexe $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$, où ϵ_1 et ϵ_2 sont des vecteurs de *variables gaussiennes centrées réduites indépendantes*.
- Étape 4 : Prendre le produit de terme à terme des vecteurs λ et ϵ .
- Étape 5 : Simuler un vecteur \mathcal{X} selon l'équation (2.101) par transformée de Fourier inverse (iFFT). Chaque partie (réelle et imaginaire) du vecteur \mathcal{X} est une réalisation du champ.

2.5.3.3 Méthode “Circulant Embedding”

Il est évident que la matrice de covariance \mathbf{R} telle que présentée à l'équation (2.77) *n'est pas* circulante. L'idée de la méthode “Circulant Embedding” est alors d'inclure le domaine original \mathcal{D} dans un nouveau \mathcal{D}' plus large et périodique. Puis nous simulons dans le domaine \mathcal{D}' une réalisation \mathcal{Y} dont sa partie dans le domaine $\mathcal{D} \in \mathcal{D}'$ est la réalisation \mathcal{X} . L'objectif est donc de construire le domaine \mathcal{D}' de manière à ce que la matrice $\mathbf{R}_{\mathcal{Y}}$ soit circulante (Nowak, 2004). L'illustration graphique est présentée sur la figure 2.8.

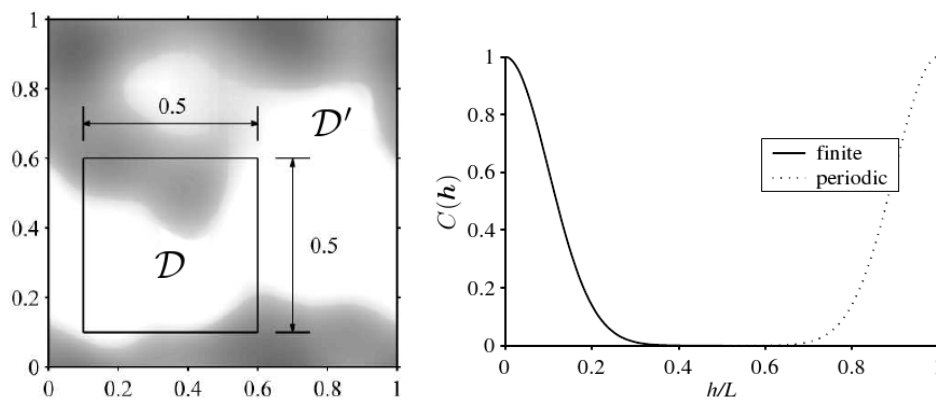


Figure 2.8 – Méthode de simulation - “Circulant Embedding” - Extension périodique du domaine original à gauche et fonction de covariance correspondante à droite (Nowak, 2004)

La taille du domaine \mathcal{D}' n'est pas limitée et peut être 2 fois, 3 fois (ou plus) grande que celle du domaine \mathcal{D} . Nous présentons ici le cas le plus simple où la taille de \mathcal{D}' est exactement 2 fois celle de \mathcal{D} . En pratique, nous construisons directement la matrice $\mathbf{R}_{\mathcal{Y}}$ à partir de celle \mathbf{R} . Cette construction suit les étapes suivantes.

- Étape 1 : Construire la matrice de covariance \mathbf{R} selon l'équation (2.77).

ⓐ Dans le cas 1D, celle-ci a la forme :

$$\mathbf{R}_1 = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \cdots & c_{N-1} & c_N \\ c_2 & c_1 & \cdots & c_{N-2} & c_{N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{N-1} & c_{N-2} & \cdots & c_3 & c_2 \\ c_N & c_{N-1} & \cdots & c_2 & c_1 \end{bmatrix} \quad (2.106)$$

Comme le champ est stationnaire, la covariance entre deux points \mathbf{x}_i et \mathbf{x}_j ne dépend que de la distance $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$, nous montrons que cette matrice de covariance \mathbf{R}_1 est une matrice de Toeplitz symétrique.

ⓐ Dans le cas 2D, avec une grille de $M \times N$ points, une réalisation du champ est représentée par un vecteur de taille MN . La matrice de covariance \mathbf{R}_2 de ce vecteur est également une matrice de Toeplitz structurée par les blocs ayant la même structure que \mathbf{R}_1 , notés \mathbf{R}_1^* . La matrice \mathbf{R}_2 s'écrit alors :

$$\mathbf{R}_2 = \begin{bmatrix} [\mathbf{R}_1]_{11} & \cdots & [\mathbf{R}_1^*]_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{R}_1^*]_{M1} & \cdots & [\mathbf{R}_1]_{MM} \end{bmatrix} \quad (2.107)$$

Chaque matrice $[\mathbf{R}_1^*]_{ij}$ est la matrice de covariance des variables sur la ligne i , et de celles sur la ligne j de la grille $N \times M$ ($i, j = 1, \dots, M$).

ⓐ Dans le cas 3D, de la même façon, avec une grille de $M \times N \times K$ points, une réalisation du champ est représentée par un vecteur de taille MNK et la matrice de covariance \mathbf{R}_3 de ce vecteur est une matrice de Toeplitz structurée par les blocs ayant la même structure que \mathbf{R}_2 , notés \mathbf{R}_2^* . Elle a la forme :

$$\mathbf{R}_3 = \begin{bmatrix} [\mathbf{R}_2]_{11} & \cdots & [\mathbf{R}_2^*]_{1K} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{R}_2^*]_{K1} & \cdots & [\mathbf{R}_2]_{KK} \end{bmatrix} \quad (2.108)$$

Chaque matrice $[\mathbf{R}_2^*]_{ij}$ est la matrice de covariance des variables sur le plan i , et de celles sur le plan j de la grille $N \times M \times K$ ($i, j = 1, \dots, K$).

- Étape 2 : Construire la matrice \mathbf{R}_y à partir de la matrice \mathbf{R} . Comme \mathbf{R}_y est une matrice circulante, elle est complètement définie par sa première ligne \mathbf{R}_y^1 . Dès lors, il suffit de présenter la technique de construction de cette ligne.

ⓐ Dans le cas 1D, la première ligne \mathbf{R}_y^1 est construite à partir de celle (notée \mathbf{R}^1) de la matrice \mathbf{R} en prenant la symétrie de celle-ci par rapport à sa dernière composante c_N . Mais nous nous limitons au terme c_2 pour assurer la périodicité de \mathcal{D}' . La ligne \mathbf{R}_y^1 a une longueur de $2N - 2$ et s'écrit ([Percival, 2006](#)) :

$$\mathbf{R}_y^1 = [c_1 \ c_2 \ \cdots \ c_{N-1} \ c_N \ c_{N-1} \ c_{N-2} \ \cdots \ c_2] \quad (2.109)$$

La matrice \mathbf{R}_y sera construite à partir de cette première ligne et a la forme :

$$\mathbf{R}_y = \begin{bmatrix} c_1 & c_2 & \cdots & c_{N-1} & c_N & c_{N-1} & c_{N-2} & \cdots & c_2 \\ c_2 & c_1 & \cdots & c_{N-2} & c_{N-1} & c_N & c_{N-1} & \cdots & c_3 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_N & c_{N-1} & \cdots & c_2 & c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_{N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_3 & c_4 & \cdots & c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & c_{N-4} & \cdots & c_2 \\ c_2 & c_3 & \cdots & c_N & c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & \cdots & c_1 \end{bmatrix} \quad (2.110)$$

Nous montrons que la sous-matrice en haut à gauche de \mathbf{R}_y est la matrice \mathbf{R}_x . Cela signifie que les N premiers composants de \mathcal{Y} ont la même matrice de covariance que \mathcal{X} . Si le nombre de périodes augmente, nous pouvons retrouver la matrice \mathbf{R}_x périodiquement le long de la diagonale de \mathbf{R}_y . Les composants communs à ces matrices expriment les frontières communes des domaines \mathcal{D} périodiques.

- ⓐ Dans le cas 2D, la première ligne de la matrice \mathbf{R}_2 est un vecteur de taille NM . Nous le transformons en une matrice \mathbf{B}_2 de taille $N \times M$ par une transformation notée \mathcal{T} qui a la forme suivante :

$$\mathbf{B}_2 = \mathcal{T}(\mathbf{R}_2^1) = \begin{bmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{N1} & \cdots & c_{NM} \end{bmatrix} \quad (2.111)$$

La première ligne de la matrice \mathbf{R}_y , correspondant à l'extension périodique du domaine \mathcal{D} , est un vecteur de taille $(2N - 2)(2M - 2)$. Si nous transformons celui-ci en une matrice \mathbf{C}_2 de taille $(2N - 2) \times (2M - 2)$ avec la même fonction \mathcal{T} , celle-ci à son tour est une extension par la symétrie de la matrice \mathbf{B}_2 respectivement par rapport à sa dernière ligne et sa dernière colonne en se limitant à la deuxième ligne et la deuxième colonne pour assurer la périodicité. Elle s'écrit :

$$\mathbf{C}_2 = \begin{bmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1(M-1)} & c_{1M} & c_{1(M-1)} & \cdots & c_{12} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{(N-1)1} & \cdots & c_{(N-1)(M-1)} & c_{(N-1)M} & c_{(N-1)(M-1)} & \cdots & c_{(N-1)2} \\ c_{N1} & \cdots & c_{N(M-1)} & c_{NM} & c_{N(M-1)} & \cdots & c_{N2} \\ c_{(N-1)1} & \cdots & c_{(N-1)(M-1)} & c_{(N-1)M} & c_{(N-1)(M-1)} & \cdots & c_{(N-1)2} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{21} & \cdots & c_{2(M-1)} & c_{2M} & c_{2(M-1)} & \cdots & c_{22} \end{bmatrix} \quad (2.112)$$

- ⓐ Dans le cas 3D, de la même façon, nous représentons la première ligne \mathbf{R}_3^1 par un tenseur d'ordre 3 de taille $N \times M \times K$, noté \mathbf{B}_3 . Puis nous prenons la symétrie de celui-ci par rapport à ses trois axes pour obtenir un tenseur de taille $(2N - 2) \times (2M - 2) \times (2K - 2)$, noté \mathbf{C}_3 . La première ligne \mathbf{R}_y^1 est obtenue par la transformée de ce tenseur en un vecteur.

Remarques :

- La simulation d'une réalisation d'un champ dont la matrice de covariance est circulaire ne nécessite que la connaissance de la première ligne de la matrice de covariance.
- Dans les cas 2D ou 3D, il suffit d'utiliser respectivement la transformée de Fourier en 2D et 3D dans la simulation. Les valeurs propres sont calculées directement à partir de la matrice \mathbf{C}_2 ou du tenseur \mathbf{C}_3 par la transformée de Fourier 2D ou 3D.
- Le vecteur \mathcal{X} est obtenu en extrayant un sous-vecteur de taille N des premières composantes du vecteur \mathcal{Y} .
- Nous obtenons 2 réalisations du champ avec chaque simulation, associées respectivement à la partie réelle et imaginaire du vecteur complexe calculé.

La figure 2.9 présente deux réalisations d'un champ aléatoire gaussien, de modèle de covariance gaussien, simulées par cette méthode "Circulant Embedding"

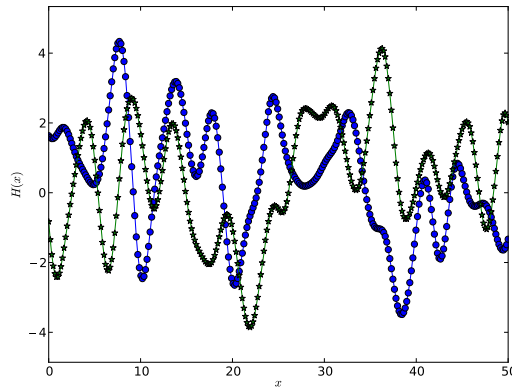


Figure 2.9 – Méthode de simulation - Deux réalisations d'un champ gaussien, modèle de covariance gaussien simulées par la méthode "Circulant-Embedding" : $\mu = 0$, $v = 4$, $l = 2$

2.5.3.4 Comparaison avec la méthode de Karhunen-Loève discrète

En comparant les équations (2.80) et (2.101), nous constatons que les deux formules présentent une analogie. Le terme \sqrt{N} est le facteur de correction venant de la décomposition des valeurs propres d'une matrice circulante correspondant à la définition de la matrice de Fourier (Eq. (2.86)). Si nous utilisons la matrice de Fourier définie par l'équation (2.95), ce facteur de correction disparaît. Dès lors, la méthode "Circulant Embedding" peut être vue comme la méthode de Karhunen-Loève discrète appliquée au cas particulier où la matrice de covariance est circulante. La résolution du problème aux valeurs propres de la matrice de covariance (Eq. (2.79)) se fait alors à l'aide de l'équation (2.91). La différence entre les deux méthodes vient de la technique "Circulant

Embedding”. De plus, la méthode “Circulant Embedding” ne tient pas compte de la troncature du nombre de valeurs propres (l’ensemble du spectre est pris en compte), mais elle utilise l’algorithme FFT pour réduire le temps de simulation.

2.5.4 Méthode spectrale

2.5.4.1 Introduction

La méthode spectrale utilise la représentation spectrale du champ aléatoire et la discrétisation spatiale de la DSP pour simuler une réalisation du champ. Elle simule tout d’abord une réalisation du champ dans le domaine fréquentiel. Ensuite, la transformée de Fourier de cette réalisation nous donne une réalisation du champ dans le domaine original. Les détails de cette méthode sont disponibles dans [Preumont \(1990\)](#); [Shinozuka et Deodatis \(1991\)](#); [Bocchini et Deodatis \(2008\)](#); [Dang et al. \(2011c\)](#).

Dans un premier temps, pour simplifier les notations, nous prenons en détail la méthode dans le cas unidimensionnel. Ensuite, nous généralisons la méthode dans les cas bidimensionnel et tridimensionnel.

2.5.4.2 Cas unidimensionnel

Simulons une réalisation $\mathcal{X} = \{h(x_i), i = 0, \dots, N - 1\}$ d’un champ aléatoire $H(x, \omega)$ de moyenne $\mu = 0$ et de fonction de covariance $C(\delta)$ dans un domaine \mathcal{D} , sur une grille régulière $\{x_i, i = 0, \dots, N - 1\}$. Notons $P(f)$, $\{f_i, i = 0, \dots, N - 1\}$ et $\mathcal{X}_f = \{\tilde{h}(f_i), i = 0, \dots, N - 1\}$ respectivement la fonction de densité spectrale de puissance (DSP), la grille et la réalisation correspondantes dans le domaine fréquentiel \mathcal{D}_f .

Nous partons de la relation donnée par l’équation (2.66).

$$C(0) = \int_{-\infty}^{\infty} P(f)df = E [|H(x)|^2] \quad (2.113)$$

Notons que le domaine \mathcal{D} est défini dans la partie positive de l’espace, comme la fonction DSP est positive et paire, nous réécrivons l’équation (2.113) comme suit :

$$2 \int_0^{\infty} P(f)df = E [|H(x)|^2] \quad (2.114)$$

Comme le champ aléatoire est représenté par la réalisation \mathcal{X} , la variance du champ est estimée par :

$$\hat{v} = E [|H(x)|^2] \approx \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} |h(x_k)|^2 \quad (2.115)$$

La discrétisation de l’équation (2.114) en tenant compte de l’équation (2.115) nous donne la relation :

$$\sum_{k=0}^{N-1} 2P(f_k)\Delta f \approx \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} |h(x_k)|^2 \quad (2.116)$$

Où Δf est choisie par le théorème d'échantillonnage de Shannon ([Preumont, 1990](#)), *i.e.* la fréquence d'échantillonnage doit être au moins deux fois de la fréquence maximale du signal, qui vaut dans ce cas $(N - 1)\Delta f$.

$$\frac{1}{\Delta x} = 2(N - 1)\Delta f \quad \text{avec} \quad \Delta x = \frac{|\mathcal{D}|}{N - 1} \quad (2.117)$$

Nous en déduisons :

$$\Delta f = \frac{1}{2|\mathcal{D}|} \quad \text{et} \quad f_k = k\Delta f = \frac{k}{2|\mathcal{D}|} \quad (2.118)$$

D'autre part, la réalisation \mathcal{X}_f du champ dans le domaine fréquentiel est définie par la transformée de Fourier discrète de \mathcal{X} de résolution Δf . Elle s'écrit :

$$\tilde{h}(f_k) = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} h(x_l) e^{-i2\pi kl/2N} \quad (2.119)$$

Par ailleurs, l'égalité de Parseval montre que l'énergie totale d'un signal ne dépend pas de la représentation du signal. En appliquant cette égalité à la réalisation du champ représenté par le vecteur \mathcal{X} et par \mathcal{X}_f , nous avons² :

$$\sum_{k=0}^{N-1} |\tilde{h}(f_k)|^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} |h(x_k)|^2 \quad (2.120)$$

En combinant l'équation (2.116) et celle (2.120), nous obtenons :

$$\sum_{k=0}^{N-1} |\tilde{h}(f_k)|^2 = \sum_{k=0}^{N-1} 2P(f_k)\Delta f \quad (2.121)$$

L'équation (2.121) nous donne le moyen de choisir le module de chaque composante du vecteur \mathcal{X}_f .

$$|\tilde{h}(f_k)| = \sqrt{2P(f_k)\Delta f} \quad (2.122)$$

Les phases des composantes du vecteur \mathcal{X}_f sont choisies comme une réalisation d'une variable aléatoire φ_k uniforme dans $[0, 2\pi]$. Donc chaque composante du vecteur \mathcal{X}_f a la forme :

$$\tilde{h}(f_k) = \sqrt{2P(f_k)\Delta f} e^{-i(2\pi f_k + \varphi_k)} \quad (2.123)$$

L'association des modules aux phases comme ci-dessus entraîne une répartition d'une moitié de l'énergie totale du signal à chaque partie réelle et imaginaire. Une réalisation \mathcal{X} du champ original sera obtenue en prenant la partie réelle de la transformée de Fourier inverse du vecteur \mathcal{X}_f et en prenant en compte un coefficient de correction de $\sqrt{2}$ pour conserver l'énergie totale. Le théorème central limite assure que la réalisation \mathcal{X} simulée converge vers un champ gaussien.

$$h(x_l) = \sqrt{2}\Re \left\{ \sum_{k=0}^{N-1} \left[\sqrt{2P(f_k)\Delta f} e^{-i(2\pi f_k + \varphi_k)} \right] e^{i2\pi kl/2N} \right\} \quad (2.124)$$

2. La démonstration de cette relation est disponible dans [Baudoin et Bercher \(2001\)](#).

Il faut noter que le vecteur \mathcal{X}_f est de taille N , mais la résolution de la transformée de Fourier discrète (2.124) est deux fois plus que celle de la transformée d'un vecteur de taille N . Dès lors, la transformée de Fourier discrète doit être de taille $2N$. Pour ce faire, on complète le vecteur \mathcal{X}_f par des 0 pour qu'il soit de taille $2N$ et on prend sa transformée de Fourier. Les N premières composantes de cette dernière constituent le vecteur \mathcal{X} .

Numériquement, la mise au point de cette méthode de simulation est très simple et rapide. Les étapes sont les suivantes :

- Étape 1 : Calculer les coordonnées f_k des points de discrétisation dans le domaine fréquentiel correspondant à ceux dans le domaine original selon le théorème de Shannon (Eq. (2.121)).
- Étape 2 : Calculer le module de chaque composante de la réalisation dans le domaine fréquentiel selon l'équation (2.122).
- Générer une réalisation de phase φ_k selon la loi uniforme dans l'intervalle $[0, 2\pi]$ et les associer aux modules selon l'équation (2.123).
- Calculer la réalisation du champ dans le domaine original en appliquant la transformée de Fourier inverse (iFFT). Dans ce cas, comme indiqué ci-dessus, la transformée de Fourier inverse doit être de taille $2N$.

Grâce à l'utilisation de l'algorithme de transformée de Fourier rapide (FFT), le temps de simulation de cette méthode est réduit considérablement. La figure 2.10 présente une réalisation d'un champ aléatoire gaussien, de modèle de covariance gaussien, simulée par cette méthode de simulation.

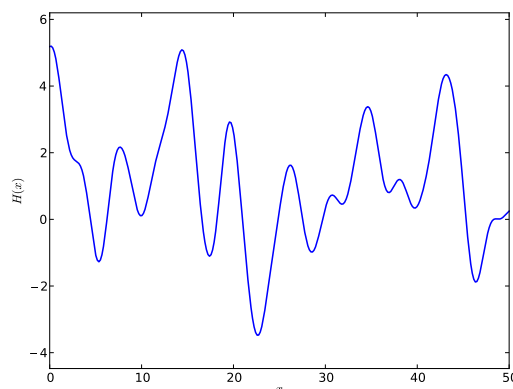


Figure 2.10 – Méthode de simulation - Réalisation d'un champ gaussien, modèle de covariance gaussien simulée par la méthode spectrale : $\mu = 0$, $v = 4$, $l = 2$

2.5.4.3 Cas bidimensionnel

Dans le cas bidimensionnel, le champ aléatoire $H(x_1, x_2, \omega)$ est simulé dans un domaine $\mathcal{D} = [\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2]$ sur une grille régulière de $N \times N$ points $\{(x_1^k, x_2^l); k, l = 0, \dots, N-1\}$. Tenant compte de l'utilisation de la transformée de Fourier 2D, l'équation (2.116) devient :

$$\sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} 2^2 P(f_1^k, f_2^l) \Delta f_1 \Delta f_2 \approx \frac{1}{N^2} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} |h(x_1^k, x_2^l)|^2 \quad (2.125)$$

où $\Delta f_1 = \frac{1}{2\mathcal{D}_1}$ et $\Delta f_2 = \frac{1}{2\mathcal{D}_2}$ sont déterminés selon le théorème de Shannon. L'égalité de Parseval dans le cas 2D s'écrit :

$$\sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} |\tilde{h}(f_1^k, f_2^l)|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} |h(x_1^k, x_2^l)|^2 \quad (2.126)$$

où :

$$\tilde{h}(f_1^k, f_2^l) = \frac{1}{N^2} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} h(x_1^m, x_2^n) e^{-i2\pi km/2N} e^{-i2\pi ln/2N} \quad (2.127)$$

On en déduit alors :

$$\sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} 2^2 P(f_1^k, f_2^l) \Delta f_1 \Delta f_2 = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} |\tilde{h}(f_1^k, f_2^l)|^2 \quad (2.128)$$

Dès lors, les modules $|\tilde{h}(f_1^k, f_2^l)|$ sont choisis sous forme :

$$|\tilde{h}(f_1^k, f_2^l)| = \sqrt{2^2 P(f_1^k, f_2^l) \Delta f_1 \Delta f_2} \quad (2.129)$$

Les composantes de la réalisation \mathcal{X}_f dans le domaine fréquentiel s'écrivent :

$$\tilde{h}(f_1^k, f_2^l) = \sqrt{2^2 P(f_1^k, f_2^l) \Delta f_1 \Delta f_2} e^{-i[2\pi(f_1^k + f_2^l) + \varphi_{kl}]} \quad (2.130)$$

où φ_{kl} sont les variables aléatoire tirées selon la loi uniforme dans l'intervalle $[0, 2\pi]$ sur la grille de points. La réalisation \mathcal{X} dans le domaine original est obtenue par :

$$\mathcal{X} = \sqrt{2} \Re \left\{ \mathfrak{F}_{2,2N}^{-1}(\mathcal{X}_f) \right\} \quad (2.131)$$

où $\mathfrak{F}_{2,2N}^{-1}$ note la transformée de Fourier inverse dans le cas 2D, de taille $2N \times 2N$.

La figure 2.10 présente une réalisation d'un champ aléatoire gaussien, de modèle de covariance gaussien, simulée par cette méthode de simulation.

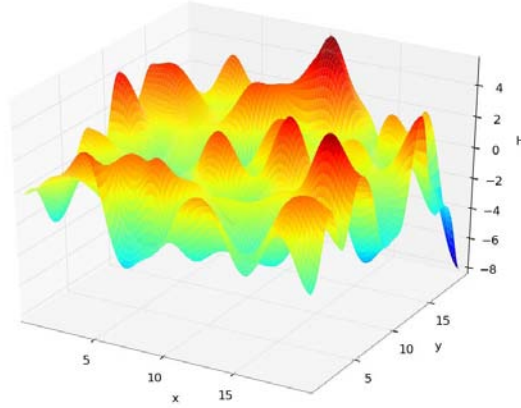


Figure 2.11 – Méthode de simulation - Réalisation d'un champ gaussien, modèle de covariance gaussien simulée par la méthode spectrale : $\mu = 0$, $v = 4$, $l_1 = 2$, $l_2 = 2$

2.5.4.4 Cas tridimensionnel

Dans le cas tridimensionnel, on simule le champ aléatoire $H(x_1, x_2, x_3, \omega)$ dans un domaine $\mathcal{D} = [\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2, \mathcal{D}_3]$ sur une grille régulière de $N \times N \times N$ points $\{(x_1^k, x_2^l, x_3^m); k, l, m = 0, \dots, N-1\}$. De la même manière, les composantes de la réalisation \mathcal{X}_f dans le domaine fréquentiel ont la forme :

$$\tilde{h}(f_1^k, f_2^l, f_3^m) = \sqrt{2^3 P(f_1^k, f_2^l, f_3^m) \Delta f_1 \Delta f_2 \Delta f_3} e^{-i[2\pi(f_1^k + f_2^l + f_3^m) + \varphi_{klm}]} \quad (2.132)$$

La réalisation \mathcal{X} dans le domaine original est obtenue par :

$$\mathcal{X} = \sqrt{2} \Re \left\{ \mathfrak{F}_{3,2N}^{-1}(\mathcal{X}_f) \right\} \quad (2.133)$$

où $\mathfrak{F}_{3,2N}^{-1}$ note la transformée de Fourier inverse dans le cas 3D, de taille $2N \times 2N \times 2N$.

2.5.5 Comparaison des méthodes

Après cette présentation des différentes méthodes de la littérature qui permettent de simuler des champs 1D, et que nous avons étendu aux cas 2D et 3D, nous nous proposons de les évaluer et de comparer leurs performances selon deux critères :

- La qualité de la représentation des propriétés statistiques du champ par les réalisations simulées, *i.e.* la loi marginale en chaque point et le modèle de covariance entre différents points ;
- Le temps nécessaire pour réaliser une simulation.

Comme le champ est supposé gaussien, l'évaluation du premier critère consiste à re-identifier le modèle de covariance du champ à partir des réalisations simulées. Cette réponse sera présentée dans le chapitre suivant, après avoir présenté en détail les méthodes d'identification.

Dans cette section, nous nous intéressons seulement au temps de simulation associé aux différentes méthodes. Nous distinguons deux types de temps. Le premier est le temps nécessaire pour pré-calculer les quantités utiles avant la simulation, noté T_{fixe} . Celles-ci sont calculés une seule fois dans la première simulation et sont réutilisés dans les suivantes. Le deuxième est le temps de simulation d'une réalisation du champ connaissant les quantités pré-calculées et noté T_{simul} .

Le tableau 2.3 présente ces temps pour simuler 100 réalisations d'un champ aléatoire gaussien stationnaire dans un domaine 1D de 1000 sur une grille de 1001 points (le temps total T_{total} est égal à $T_{fixe} + T_{simul}$). Le tableau 2.4 présente les temps pour simuler 100 réalisations dans le cas 2D avec : domaine 50×50 , grille 51×51 points. Comme le nombre de points dans le cas 3D est très grand, les trois premières méthodes présentent un très long temps de calcul. Dès lors, dans le tableau 2.5, nous ne présentons que les temps de calcul associés aux deux dernières méthodes pour simuler 100 réalisations dans un domaine 3D de $50 \times 50 \times 50$ sur une grille de $51 \times 51 \times 51$ points.

Méthode	$T_{fixe} (s)$	$T_{simul} (s)$
Simulation directe	0,383	0,268
Karhunen-Loève discrète	5,678	1,639
EOLE	0,030	2,282
Circulant Embedding	0,001	0,065
Spectrale	0,001	0,050

Tableau 2.3 – Méthode de simulation - Comparaison du temps de calcul des différentes méthodes (100 réalisations de champ 1D sur une grille de 1001 points)

Méthode	$T_{fixe} (s)$	$T_{simul} (s)$
Simulation directe	13,21	1,282
Karhunen-Loève discrète	23,08	6,522
EOLE	0,417	117,5
Circulant Embedding	0,007	0,343
Spectrale	0,001	0,676

Tableau 2.4 – Méthode de simulation - Comparaison du temps de calcul des différentes méthodes (100 réalisations de champ 2D sur une grille de 51×51 points)

Méthode	$T_{fixe} (s)$	$T_{simul} (s)$
Circulant Embedding	0,278	45,17
Spectrale	0,030	106,8

Tableau 2.5 – Méthode de simulation - Comparaison du temps de calcul des différentes méthodes (100 réalisations de champ 3D sur une grille de $51 \times 51 \times 51$ points)

Nous observons que les méthodes “Circulant Embedding” et spectrale sont beaucoup plus rapides que les autres méthodes, tant au niveau du temps de calcul fixe T_{fixe} qu’au niveau du temps de simulation T_{simul} . Cette différence s’accroît avec l’augmentation du nombre de points de la grille (dans le cas 2D et 3D). La méthode spectrale est la plus rapide dans l’étape de pré-traitement, tandis que la méthode “Circulant Embedding” est la meilleure au niveau du temps de simulation unitaire de nouvelles réalisations. Dans notre travail, nous aurons besoin de milliers de réalisations simulées pour la propagation d’incertitudes. Le temps de calcul est alors un paramètre décisif dans le choix de la méthode de simulation.

2.5.6 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté trois méthodes de simulation d’un champ aléatoire gaussien stationnaire correspondant chacune à un type de représentation du champ. Nous avons montré que malgré l’origine différente des deux méthodes Karhunen-Loève discrète et “Circulant Embedding”, leur principes de simulation sont les mêmes. La différence ne vient que de la technique “Circulant Embedding”. Cette démonstration nous permet d’interpréter la méthode “Circulant Embedding” de manière plus simple en se basant sur la méthode de Karhunen-Loève. De plus, une comparaison du temps de calcul des différentes méthodes montre une bien meilleure performance des méthodes “Circulant Embedding” et spectrale. Cela nous donne un critère intéressant dans le choix de la méthode de simulation pour la suite de ce travail.

2.6 Simulation des champs aléatoires non-gaussiens non-stationnaires

2.6.1 Introduction

Rappelons que tandis qu’un champ aléatoire gaussien est complètement défini par ses propriétés statistiques des deux premiers ordres, un champ aléatoire non-gaussien n’est complètement défini que lorsque sa loi de probabilité conjointe à tout ordre est connue. La simulation d’un tel champ aléatoire non-gaussien doit alors reproduire cette loi de probabilité conjointe à tout ordre. En pratique, la modélisation physique ne nécessite souvent que des champs non-gaussiens obtenue par transformation de champs gaussiens. Un tel champ aléatoire peut être défini par ses propriétés statistiques de plus bas ordre (Sakamoto et Ghanem, 2001), *e.g.* la loi de probabilité marginale $f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ en chaque point et la fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ entre deux points \mathbf{x} et \mathbf{x}' . Dès lors, la simulation cherche à reproduire uniquement ces deux propriétés probabilistes. Actuellement, il existe principalement deux approches pour simuler de tels champs aléatoires non-gaussiens.

La première utilise le développement en série du champ pour le discrétiser. Ensuite, une simulation a priori est réalisée par une génération des variables aléatoires non-gaussiennes intervenant dans le développement en série. Cette réalisation a priori ne possède pas exactement les propriétés probabilistes d’ordre 2. Celles-ci sont approchées par

un algorithme itératif en ajustant la génération des variables aléatoires non-gaussiennes à chaque itération (Sakamoto et Ghanem, 2001; Phoon et al., 2005). Pour la première itération, les variables sont considérées indépendantes et de même lois de probabilité marginale que celles du champ.

La deuxième se base sur la transformation non-linéaire $NL[.]$ d'un champ gaussien en un champ non-gaussien :

$$NG(\mathbf{x}, \omega) = NL[H(\mathbf{x}, \omega)] \quad (2.134)$$

La densité de probabilité $f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ marginale en chaque point visée peut toujours être obtenue avec une telle transformation. Mais la fonction de covariance simulée a priori ne correspond pas forcément à celle visée théoriquement. Celle-ci est alors approchée par un algorithme itératif en ajustant son estimation vers l'objectif à chaque itération. Cette approche est développée dans le cadre de la méthode de simulation spectrale (Shinozuka et Deodatis, 1991; Deodatis, 1996; Popescu et al., 1998; Bocchini et Deodatis, 2008).

Dans cette section, nous présentons les méthodes issues de ces deux approches en montrant le lien avec la simulation des champs gaussiens.

2.6.2 Méthode de Karhunen-Loève

Comme la représentation de Karhunen-Loève d'un champ aléatoire ne dépend pas de la stationnarité de la fonction de covariance, cette méthode est utilisable pour simuler également les champs aléatoires non-stationnaires. Le principe de la simulation d'un champ aléatoire gaussien, non-stationnaire est le même que le cas gaussien (Sec. 2.5.2). La simulation d'un champ aléatoire non-gaussien utilise également la discrétisation de Karhunen-Loève du champ (Eq. (2.73)).

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mu(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^r \sqrt{\lambda_i} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (2.135)$$

où $\{\lambda_i, i = 1, \dots, r\}$ et $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i = 1, \dots, r\}$ sont respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres de la fonction de covariance, résultant du problème de Fredholm (Eq. (2.49)). Les variables aléatoires $\{\xi_i(\omega), i = 1, \dots, r\}$ sont *orthonormales* et *non-corrélées*. Elles sont déterminées en considérant l'orthogonalité de la base $\{\varphi_i(\mathbf{x}), i \in \mathbb{N}\}$ par l'équation (2.52) :

$$\xi_i(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \int_{\mathcal{D}} [H(\mathbf{x}, \omega) - \mu(\mathbf{x})] \varphi_i(\mathbf{x}) d\mathcal{D} \quad (2.136)$$

Le problème posé est de générer les variables $\xi_i(\omega)$ non-gaussiennes, orthonormales (non-corrélées) mais *non-indépendantes*. Si une telle réalisation de ces variables est générée, la fonction de covariance estimée à partir d'une réalisation simulée par l'équation (2.135) va

approcher celle du champ (Phoon et al., 2005). Elle s'écrit :

$$\begin{aligned}\hat{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \text{E} \left[\left(\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) - \mu(\mathbf{x}) \right) \left(\hat{H}(\mathbf{x}', \omega) - \mu(\mathbf{x}') \right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r \sqrt{\lambda_i \lambda_j} \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}') \text{E} [\xi_i(\omega) \xi_j(\omega)] \\ &= \sum_{i=1}^r \lambda_i \varphi_i(\mathbf{x}) \varphi_i(\mathbf{x}') \approx C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\end{aligned}\quad (2.137)$$

Cependant, les lois de probabilité de ces variables sont inconnues. Cela est surmonté par un algorithme itératif proposé par Phoon et al. (2005).

- Étape 1 : Générer n réalisations des variables $\{\xi_i^k(\omega), i = 1, \dots, r\}$ et simuler n réalisations correspondantes $\hat{H}_0^k(\mathbf{x}, \omega_j)$ selon l'équation (2.135) avec k est le numéro de l'itération. Comme la loi de probabilité des variables ξ_i est inconnue a priori, nous les considérons initialement comme des variables indépendantes et identiquement distribuées selon la loi $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$.
- Étape 2 : Estimer la fonction de répartition marginale empirique à partir de n réalisations pour chaque \mathbf{x} par :

$$\hat{F}_{H(\mathbf{x})}^k(\cdot | \mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \mathbf{1}_{[-\infty, y]} \left(\hat{H}_0^k(\mathbf{x}, \omega_j) \right) \quad (2.138)$$

où $\mathbf{1}_{[-\infty, y]}(\cdot)$ est la fonction indicatrice.

- Étape 3 : Transformer toutes les réalisations simulées à l'étape 1 avec la loi de probabilité marginale de l'objectif $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ par la transformation non-linéaire.

$$\hat{H}^k(\mathbf{x}, \omega_j) = F_{H(\mathbf{x})}^{-1} \left[\hat{F}_{H(\mathbf{x})}^k \left(\hat{H}_0^k(\mathbf{x}, \omega_j) | \mathbf{x} \right) \right] \quad (j = 1, \dots, n) \quad (2.139)$$

où $F_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ est la fonction de répartition correspondante à $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$.

- Étape 4 : Estimer les générations des variables $\xi_i^{k+1}(\omega)$ de l'itération prochaine par l'équation (Eq. (2.136)) avec les réalisations du champ $\hat{H}^k(\mathbf{x}, \omega_j)$ obtenues à l'étape précédente.
- Étape 5 : Standardiser et éliminer la corrélation entre les variables $\xi_i^{k+1}(\omega)$ pour qu'elles soient orthonormales et non-corrélées. Les détails pour cette étape sont disponibles dans Phoon et al. (2005).
- Étape 6 : Répéter ces étapes de 1 à 5 jusqu'à la convergence de $\hat{F}_{H(\mathbf{x})}^k(\cdot | \mathbf{x})$ à $F_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$.

Notons que cette méthode est applicable pour simuler un champ aléatoire non-gaussien stationnaire ou non-stationnaire. Cependant, le temps de calcul élevé reste l'inconvénient principal de cette méthode. Dans le cas d'un champ stationnaire, nous rappelons que le principe de simulation de la méthode "Circulant Embedding" est celui de la méthode de Karhunen-Loève. Dès lors, il est possible d'appliquer la méthode "Circulant Embedding" à l'étape 1 de l'algorithme ci-dessus pour réduire le temps de calcul.

2.6.3 Chaos polynomial

Cette méthode est proposée par [Sakamoto et Ghanem \(2001\)](#). Elle combine la décomposition de chaos polynomiaux et le développement en série de Karhunen-Loève pour simuler un champ aléatoire non-gaussien non-stationnaire. Considérons un champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ ayant la loi de probabilité marginale $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ au point \mathbf{x} , la fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ et la moyenne $\mu(\mathbf{x})$. Notons que la fonction de densité de probabilité $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ n'est pas obligatoirement identique en tous les points de l'espace si le champ est non-stationnaire.

L'idée principale de cette méthode est de décomposer en chaque point \mathbf{x} la variable aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ sur une base polynomiale d'Hermite uni-dimensionnelle $\Gamma_i(\mathbf{x})$ des variables gaussiennes centrées réduites $\gamma(\mathbf{x})$. Elle s'écrit :

$$H(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i(\mathbf{x}) \Gamma_i(\mathbf{x}) \quad (2.140)$$

où :

$$\begin{aligned} \Gamma_0(\mathbf{x}) &= 1 \\ \Gamma_1(\mathbf{x}) &= \gamma(\mathbf{x}) \\ \Gamma_2(\mathbf{x}) &= \gamma^2(\mathbf{x}) - 1 \\ \Gamma_3(\mathbf{x}) &= \gamma^3(\mathbf{x}) - 3\gamma(\mathbf{x}) \\ \Gamma_4(\mathbf{x}) &= \gamma^4(\mathbf{x}) - 6\gamma^2(\mathbf{x}) + 3 \\ &\dots \end{aligned} \quad (2.141)$$

et $\alpha_i(\mathbf{x})$ sont les coefficients de projection. Grâce à l'orthogonalité de la base polynomiale, ces coefficients sont calculés par :

$$\alpha_i(\mathbf{x}) = \frac{\mathbb{E}[H(\mathbf{x}, \omega) \Gamma_i(\mathbf{x})]}{\mathbb{E}[\Gamma_i^2(\mathbf{x})]} \quad (2.142)$$

Notons que les variables gaussiennes $\gamma(\mathbf{x})$ ne sont pas indépendantes et forment un champ gaussien, noté $\gamma(\mathbf{x}, \omega)$. Les variables de celui-ci sont les variables gaussiennes centrées réduites dont la fonction de covariance est déterminée par la résolution de l'équation (2.143) ci-dessous :

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \mathbb{E} \left[\left(H(\mathbf{x}_1, \omega) - \mu(\mathbf{x}_1) \right) \left(H(\mathbf{x}_2, \omega) - \mu(\mathbf{x}_2) \right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_i(\mathbf{x}_1) \alpha_j(\mathbf{x}_2) \mathbb{E}[\Gamma_i(\mathbf{x}_1) \Gamma_j(\mathbf{x}_2)] \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i(\mathbf{x}_1) \alpha_i(\mathbf{x}_2) i! \left(\mathbb{E}[\gamma(\mathbf{x}_1) \gamma(\mathbf{x}_2)] \right)^i \end{aligned} \quad (2.143)$$

Lorsque l'équation (2.143) est résolue, le champ gaussien $\gamma(\mathbf{x}, \omega)$ est bien défini. Une réalisation de ce champ gaussien nous permet de simuler une réalisation du champ $H(\mathbf{x}, \omega)$

par l'équation (2.140). Notons que le champ gaussien $\gamma(\mathbf{x}, \omega)$ n'est pas stationnaire. Alors une représentation de type de Karhunen-Loève est choisie pour le simuler. Elle s'écrit :

$$\gamma(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_j} \xi_j(\omega) \varphi_j(\mathbf{x}) \quad (2.144)$$

En introduisant celle-ci dans l'équation (2.140), le champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ est représenté comme une décomposition sur une base de chaos polynomial d'Hermite Ψ_k des variables $\xi_j(\omega)$.

$$H(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{k=1}^{\infty} \vartheta_k(\mathbf{x}) \Psi_k \quad (2.145)$$

Les coefficients de projection $\vartheta_k(\mathbf{x})$ sont calculés par (Sakamoto et Ghanem, 2001) :

$$\vartheta_k(\mathbf{x}) = \frac{p!}{\mathbb{E}[\Psi_k^2]} \alpha_p(\mathbf{x}) \prod_{l=1}^p \sqrt{\lambda_{j(l)}} \varphi_{j(l)}(\mathbf{x}) \quad (2.146)$$

où p est le degré du polynôme Ψ_k et j est l'indice de la variables ξ_j constituant le polynôme Ψ_k . Les valeurs de l'indice j doivent être correspondantes à la constitution de Ψ_k .

Cette méthode est très efficace dans la simulation d'un champ aléatoire non-gaussien. Elle est utilisable même si la loi de probabilité marginale des variables varie dans le domaine. Cependant le temps de calcul est très élevé. Dans le cas du champ non-gaussien, stationnaire dont la loi de probabilité marginale $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ constante, cette méthode de simulation reproduit bien les propriétés probabilistes du champ, tandis que le temps de calcul est significativement réduit.

2.6.4 Méthode spectrale

L'extension de la méthode spectrale pour la simulation d'un champ aléatoire non-gaussien est proposé initialement par Yamazaki et Shinozuka (1988). L'idée principale est de simuler un champ gaussien et de le transformer en champ non-gaussien. Comme la méthode spectrale utilise la fonction de la densité spectrale de puissance (DSP) dans la simulation, le champ est obligatoirement stationnaire. Considérons un champ $H(\mathbf{x}, \omega)$ stationnaire ayant la loi de probabilité marginale $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ ne dépend pas de \mathbf{x} et une densité spectrale de puissance $P(\mathbf{f})$.

Nous simulons tout d'abord une réalisation d'un champ gaussien $H_G(\mathbf{x}, \omega)$ avec la DSP $P(\mathbf{f})$. Ensuite cette réalisation est transformée en un champ non-gaussien de loi marginale $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$. Il est clair que cette réalisation obtenue ne correspond pas à la fonction de la DSP de l'objectif à cause de la non-linéarité de la transformation. Dès lors, un algorithme nous permet de l'approcher itérativement jusqu'à la convergence. Les détails sont donnés ci-dessous :

- Étape 1 : Simuler une réalisation d'un champ gaussien $h_G^j(\mathbf{x}, \omega)$ avec la DSP $P_G^j(\mathbf{f})$ par la méthode spectrale présentée à la section 2.5.4. A la première itération, la fonction $P_G^j(\mathbf{f})$ est prise égale à $P(\mathbf{f})$ correspondant au champ $H(\mathbf{x}, \omega)$.

- Étape 2 : Transformer cette réalisation en utilisant la fonction de répartition $F_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$ correspondant à $f_{H(\mathbf{x})}(\cdot)$.

$$h^j(\mathbf{x}, \omega) = F_{H(\mathbf{x})}^{-1} \left(\Phi \left[h_G^j(\mathbf{x}, \omega) \right] \right) \quad (2.147)$$

où Φ est la fonction de répartition gaussienne standard.

- Étape 3 : Estimer la DSP empirique $P^j(\mathbf{f})$ du champ à partir de la réalisation du champ $h^j(\mathbf{x}, \omega)$ obtenue à l'étape 2. La méthode d'estimation de la fonction de la DSP sera présentée en détail dans le chapitre 3.
- Étape 4 : Mettre à jour la fonction de la DSP pour l'itération suivante :

$$P_G^{j+1}(\mathbf{f}) = \frac{P_G^j(\mathbf{f})}{P^j(\mathbf{f})} P(\mathbf{f}) \quad (2.148)$$

- Étape 5 : Répéter les étapes de 1 à 4 jusqu'à la convergence de la DSP empirique $P^j(\mathbf{f})$ vers la DSP objectif $P(\mathbf{f})$.

L'avantage de cette méthode est la simplicité de la mise en œuvre et le faible temps de calcul pour la simulation du champ gaussien. Cependant plusieurs travaux *e.g.* [Deodatis et Micaletti \(2001\)](#); [Bocchini et Deodatis \(2008\)](#) montrent que cet algorithme est très difficile à faire converger. Des modifications sont également proposées. Celles-ci sont récapitulées et comparées dans [Bocchini et Deodatis \(2008\)](#). De plus, cette méthode est également étendue pour la simulation d'un champ non-gaussien, non-stationnaire et multidimensionnel ([Deodatis, 1996](#); [Popescu et al., 1998](#)).

2.6.5 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté différentes méthodes de simulation d'un champ aléatoire non-gaussien, non-stationnaire. Dans le cadre de notre travail, nous conservons cependant l'hypothèse que le champ aléatoire est gaussien et stationnaire. Dès lors, la présentation de ces méthodes se limite à l'exposé des principes de simulation sans exemples illustratifs. Elles pourront être utilisées ultérieurement pour étendre les résultats présentés aux chapitre 4 et 5 en s'affranchissant de l'hypothèse gaussienne.

2.7 Conclusion

Ce chapitre a permis de présenter des méthodes de simulation d'un champ aléatoire qui joue le rôle de la troisième étape de la nouvelle méthodologie proposée. Nous avons présenté en détails les méthodes de simulation d'un champ aléatoire gaussien stationnaire qui servent directement à la construction du modèle mécano-probabiliste dans notre travail. Une comparaison du temps de calcul associé à chacune de ces méthodes nous donne un critère de choix pour la méthode à retenir pour la suite. La validation de la reproduction des propriétés statistiques des réalisations simulées sera présentée au chapitre 3, après avoir étudié les méthodes d'identification des propriétés statistiques à partir de trajectoires. Nous avons également présenté brièvement des méthodes de simulation d'un champ aléatoire non-gaussien non-stationnaire comme une perspective de notre travail.

Identification des champs aléatoires

Sommaire

3.1	Introduction	92
3.2	Méthode de krigeage	93
3.3	Krigeage simple - Méthode du variogramme	94
3.3.1	Covariogramme, corrélogramme et variogramme	94
3.3.2	Variogramme empirique	98
3.3.3	Identification du variogramme empirique	102
3.3.4	Résultats	103
3.3.5	Conclusion	104
3.4	Krigeage universel - Méthode de maximum de vraisemblance	104
3.4.1	Krigeage universel	104
3.4.2	Fonction de vraisemblance	105
3.4.3	Maximum de vraisemblance	105
3.4.4	Maximum de vraisemblance restreint	107
3.4.5	Résultats	107
3.4.6	Conclusion	109
3.5	Méthode du périodogramme	109
3.5.1	Estimation du périodogramme	109
3.5.2	Périodogramme moyen	112
3.5.3	Fenêtres	113
3.5.4	Procédures d'estimation du périodogramme - Limitations	117
3.5.5	Méthode de moyennage du périodogramme modifié	118
3.5.6	Résultats	119
3.5.7	Conclusion	121
3.6	Validation	122
3.6.1	Comparaison des méthodes d'identification	122
3.6.2	Validation des méthodes de simulation	123
3.6.3	Validation dans le cas bidimensionnel	124
3.7	Conclusion	126

3.1 Introduction

L'identification d'un champ aléatoire dans un cadre général est un problème complexe. Il s'agit d'identifier la loi de probabilité marginale de chaque variable du champ, leur covariance, ainsi que leur loi de probabilité conjointe. Cependant, lorsque le champ aléatoire est gaussien, la loi de probabilité conjointe des variables gaussiennes est complètement définie par les lois de probabilité marginale des variables et par leurs covariances. Dès lors, le problème d'identification d'un champ aléatoire gaussien est de trouver les paramètres de la loi marginale de chaque variable et d'identifier le modèle de covariance entre elles.

Dans ce travail, nous supposons que les champs sont *gaussiens*, *stationnaires* et *ergodiques*. Un tel champ aléatoire gaussien est complètement défini par la moyenne μ , la variance v des variables¹ et la fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ entre eux. Nous rappelons que la moyenne μ , la variance v sont constantes pour toutes les variables et peuvent être estimées par les moments spatiaux (Sec. 2.2.4.2). Dès lors, il reste à identifier le modèle de covariance entre ces variables. Les données du problème d'identification sont les réalisations du champ $\mathcal{X}_i = \{h_i(\mathbf{x}_1), h_i(\mathbf{x}_2), \dots, h_i(\mathbf{x}_N)\}$, $i = 1, \dots, K$ observées en un ensemble de points $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\}$ du domaine d'observation \mathcal{D} .

L'identification de la fonction de covariance d'un champ gaussien est l'objectif principal de ce chapitre. Pour analyser la structure de la variabilité d'un champ gaussien stationnaire, une méthode simple a été proposée dans le domaine minier géostatistique. Elle consiste à estimer directement le *corrélogramme* ou le *variogramme* à partir des réalisations du champ (Cressie, 1991; Bailey et Gatrell, 1995; Chilès et Delfiner, 1999; Journel et Huijbregts, 2003; Sherman, 2011). Une autre méthode indirecte appelée *maximum de vraisemblance* consiste à maximiser la fonction de probabilité conjointe des variables du champ sachant que celles-ci sont gaussiennes (Kitanidis, 1983, 1987; Cressie, 1991). Ces deux méthodes reposent principalement sur la théorie du *krigeage*. D'un autre côté, dans le domaine du traitement du signal, des méthodes basées sur l'estimation de la *densité spectrale de puissance* (DSP) sont proposées pour identifier la variabilité temporelle du signal (Welch, 1967; Preumont, 1990; Hearn et Metcalfe, 1995; Stoica et Moses, 2005; Shumway et Stoffer, 2006; Kobayashi et al., 2012). Ces méthodes sont étudiées dans notre travail pour identifier la variabilité spatiale de la microstructure du matériau. L'hypothèse de loi marginale gaussienne sera vérifiée par une méthode classique, *e.g.* histogramme ou lissage par noyau des réalisations.

Dans ce chapitre, on présente tout d'abord la théorie du krigeage en la replaçant dans son contexte. Ensuite, on présente la méthode du variogramme et celle de maximum de vraisemblance en les liant à la théorie du krigeage. Puis on présente la méthode du *périodogramme* pour estimer la densité spectrale de puissance du champ aléatoire en utilisant sa représentation spectrale. Enfin, une validation de ces méthodes est présentée. Des réalisations d'un champ aléatoire gaussien stationnaire sont simulées avec les méthodes de simulation présentées dans le chapitre 2. Puis elles sont utilisées pour valider

1. Dans toute la suite de ce mémoire, on notera de façon non conventionnelle v la variance des différentes quantités d'intérêt, de façon à ne pas confondre avec la notation σ désignant une contrainte.

les méthodes d'identification en retrouvant les paramètres ayant servi à la simulation. Cette validation permet également de valider indirectement nos implémentations des méthodes de simulation.

3.2 Méthode de krigeage

La méthode du krigeage a été introduite par l'ingénieur minier sud-africain Krige (1951) et a été développée par Matheron (1962), Matheron (1963a) et Matheron (1963b). Elle a été également présentée dans Cressie (1991); Chilès et Delfiner (1999) et Journel et Huijbregts (2003). Il s'agit de construire un modèle d'approximation d'un champ aléatoire supposé gaussien en se basant sur les observations expérimentales représentées par une *unique* réalisation $\mathcal{X} = \{h(\mathbf{x}_1), h(\mathbf{x}_2), \dots, h(\mathbf{x}_N)\}$ et d'utiliser ce modèle pour estimer le champ en tout autre point $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$. Le modèle de base de la méthode de krigeage est la décomposition d'un champ aléatoire en une partie déterministe et une partie aléatoire de moyenne nulle :

$$H(\mathbf{x}, \omega) = \sum_{j=0}^p f_j(\mathbf{x})\beta_j + Z(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{f}^T \boldsymbol{\beta} + Z(\mathbf{x}, \omega) \quad (3.1)$$

où $\mu(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^p f_j(\mathbf{x})\beta_j$ est la partie déterministe définie par une combinaison linéaire de fonctions $f_j(\mathbf{x})$ dépendant de \mathbf{x} (*i.e.* une base de fonctions, *e.g.* polynomiales); β_i sont les coefficients à calculer et $Z(\mathbf{x}, \omega)$ est un champ aléatoire gaussien *stationnaire de moyenne nulle* et de fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \boldsymbol{\theta}) = v\rho(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \boldsymbol{\theta})$ où $\boldsymbol{\theta}$ est le vecteur des paramètres et v est la variance.

Le modèle d'approximation du champ est construit à partir d'une réalisation $\mathcal{X} = \{h(\mathbf{x}_1), h(\mathbf{x}_2), \dots, h(\mathbf{x}_N)\}$ par une combinaison linéaire :

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{a}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\mathcal{X}} \quad (3.2)$$

où $\boldsymbol{\mathcal{X}}$ est un vecteur de taille $1 \times N$ contenant les composantes de la réalisation \mathcal{X} (observations) et $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ est le vecteur de coefficients de taille $1 \times N$ dépendant du point \mathbf{x} considéré. Ce dernier est calculé en minimisant la variance de l'erreur sous la contrainte de non biais :

$$\text{Minimiser} \quad \text{V} \left[H(\mathbf{x}, \omega) - \hat{H}(\mathbf{x}, \omega) \right] \quad (3.3)$$

$$\text{Avec} \quad \text{E} \left[H(\mathbf{x}, \omega) - \hat{H}(\mathbf{x}, \omega) \right] = 0 \quad (3.4)$$

Nous distinguons trois types de krigeage en fonction du choix de la base des fonctions $f(\mathbf{x})$.

- *Krigeage simple* : La partie déterministe est définie par une constante m connue. Ce type de krigeage est le plus simple. L'incertitude du champ est totalement contenue dans la partie aléatoire $Z(\mathbf{x}, \omega)$.
- *Krigeage ordinaire* : La partie "régression" se limite à un unique coefficient β_1 qui est à estimer.

- *Krigeage universel* : Les $f_j(\mathbf{x})$ sont des fonctions dépendantes du point courant \mathbf{x} , e.g. polynomiales, périodiques, etc. . La partie déterministe approche au mieux la variation spatiale en tendance moyenne. Dès lors, le terme $Z(\mathbf{x}, \omega)$ représente les fluctuations autour de cette tendance moyenne.

3.3 Krigeage simple - Méthode du variogramme

Le krigeage simple (Journal et Huijbregts, 2003) décompose le champ en une partie constante déterministe et une partie aléatoire.

$$H(\mathbf{x}, \omega) = m + Z(\mathbf{x}, \omega) \quad (3.5)$$

où m est une constante représentant la moyenne du champ et $Z(\mathbf{x}, \omega)$ est un champ aléatoire, stationnaire de moyenne nulle et de fonction de covariance inconnue $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. La partie déterministe est calculée par la moyenne spatiale des observations $\mathcal{X} = \{h(\mathbf{x}_1), h(\mathbf{x}_2), \dots, h(\mathbf{x}_N)\}$.

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(\mathbf{x}_i) \quad (3.6)$$

Le modèle de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ est identifié par la méthode du *variogramme*.

3.3.1 Covariogramme, corrélogramme et variogramme

Les définitions de *covariogramme*, de *corrélogramme* et de *variogramme* sont présentées dans Bailey et Gatrell (1995), Journal et Huijbregts (2003) et Marcotte (2009). Ces objets représentent la dépendance spatiale entre les variables d'un champ aléatoire en différents points.

Considérons maintenant un champ aléatoire gaussien $H(\mathbf{x}, \omega)$ de moyenne $\mu(\mathbf{x})$, de variance $v(\mathbf{x})$ et de modèle de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$. La fonction de covariance du champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ est aussi appelée covariogramme dans la littérature sur le krigeage.

$$C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \text{Cov} [H(\mathbf{x}_i), H(\mathbf{x}_j)] \quad (3.7)$$

Identiquement, le corrélogramme est définie par la fonction d'auto-corrélation du champ.

$$\rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{\text{Cov} [H(\mathbf{x}_i), H(\mathbf{x}_j)]}{\sqrt{v(\mathbf{x}_i)v(\mathbf{x}_j)}} \quad (3.8)$$

Notons Γ un ensemble de toutes les différences possibles entre deux variables $\{H(\mathbf{x}_i), H(\mathbf{x}_j)\}$ quelconques associés à deux points \mathbf{x}_i et \mathbf{x}_j . Les composantes de cet ensemble sont aussi des variables aléatoires. Le *variogramme* théorique noté γ est alors défini par la moitié de la variance de ces variables :

$$\gamma(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} \text{V} [H(\mathbf{x}_i) - H(\mathbf{x}_j)] \quad (3.9)$$

Le facteur $\frac{1}{2}$ est introduit par commodité mathématique et parfois $\gamma(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ est aussi appelé *semi-variogramme*. La relation entre le variogramme et le covariogramme ainsi définis s'écrit :

$$\gamma(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2}(v(\mathbf{x}_i) + v(\mathbf{x}_j)) - C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \quad (3.10)$$

où $v(\mathbf{x}_i)$ est la variance du champ au point \mathbf{x}_i

$$v(\mathbf{x}_i) = V[H(x_i, \omega)] \quad (3.11)$$

Dans le cas où le champ aléatoire est stationnaire et isotrope, *i.e.* $v(\mathbf{x}_i) = v(\mathbf{x}_j) = v$ et le covariogramme ne dépend que de la distance euclidienne $\delta = |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ entre les deux points, nous obtenons :

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &\equiv C(\delta) \\ \rho(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &\equiv \rho(\delta) = \frac{C(\delta)}{v} \\ \gamma(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &\equiv \gamma(\delta) = v - C(\delta) \end{aligned} \quad (3.12)$$

La figure 3.1 présente les modèles courants de covariogramme, de corrélogramme et de variogramme dans le cas unidimensionnel (Sec. 2.2.4.3).

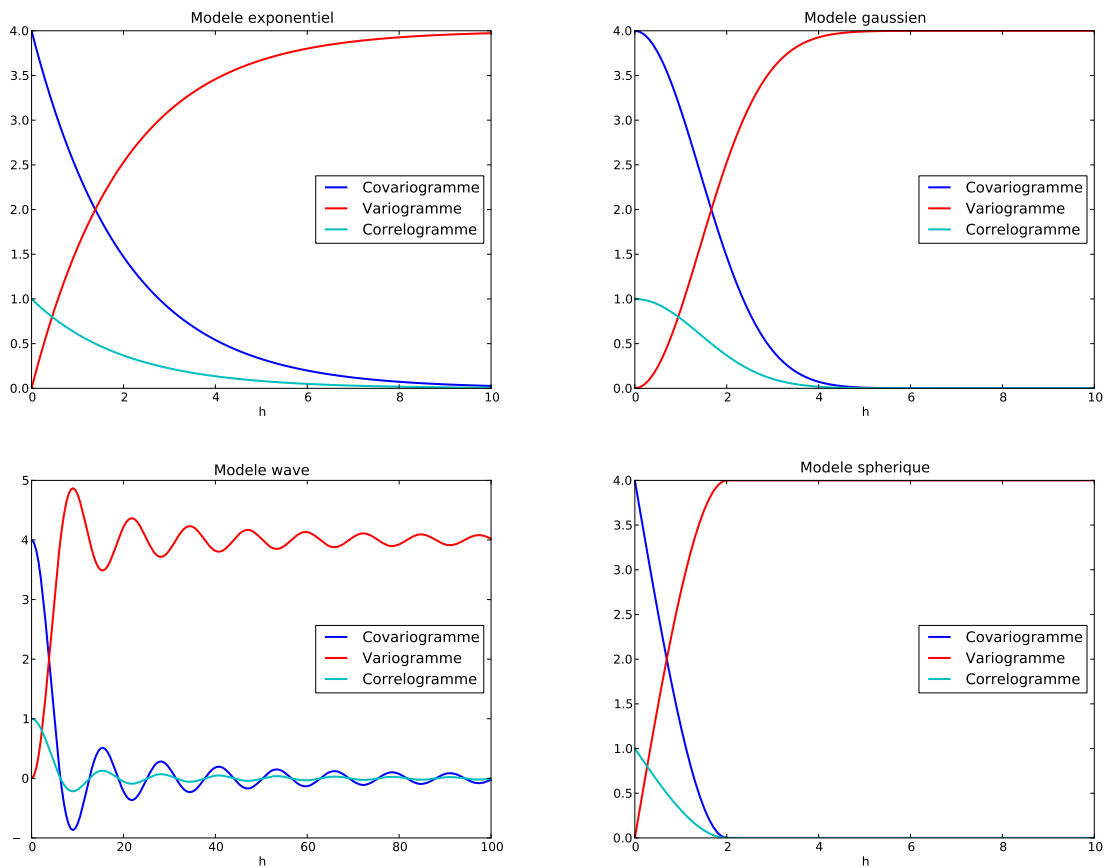


Figure 3.1 – Modèles courants de covariogramme, de corrélogramme et de variogramme

Nous observons que si la fonction $C(\delta)$ reste positive, le covariogramme est décroissant de v à 0 lorsque la distance δ augmente. Par contre le variogramme est croissant de 0 à v . Le covariogramme et le corrélogramme ont une même tendance décroissante avec δ , tandis que le variogramme possède une tendance croissante et une asymptote égale à v .

La distance à laquelle le variogramme atteint sa valeur maximale est appelée *la longueur de corrélation empirique* ou *la portée*, notée l . Nous constatons que lorsque la distance entre les deux points dépasse cette portée, les variables ne sont plus corrélées (la valeur du covariogramme est proche de 0 voire égale à 0 strictement). La valeur correspondante du variogramme est appelée *palier*. La longueur de corrélation ainsi définie dépend de la forme de la fonction d'auto-corrélation. Une définition de la longueur de corrélation théorique est proposée pour éviter cette dépendance et pour pouvoir interpréter et comparer différents modèles (Vanmarcke, 1988; Sudret, 2007). Elle s'écrit :

$$\vartheta = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(0, x) dx = 2 \int_0^{\infty} \rho(x) dx \quad (3.13)$$

Dans le cas 1D, la relation entre l et ϑ est présentée dans le tableau 3.1 pour les différents modèles.

Modèle	Gaussien	Exponentiel	Wave
ϑ	$\sqrt{\pi}l$	$2l$	πl

Tableau 3.1 – Relation entre la longueur de corrélation l apparaissant dans le covariogramme et la longueur de corrélation théorique ϑ

En réalité, il peut aussi exister un effet appelé *effet de pépité* (*nugget effect* en anglais). Il s'agit de l'erreur de localisation et d'analyse quand nous faisons des essais. Cet effet entraîne une dispersion du champ aléatoire à petite distance δ et est modélisé par une discontinuité du variogramme à l'origine. Normalement, lorsque $\delta = 0$, la valeur du variogramme doit être nulle. L'effet de pépité consiste à superposer une constante C_0 , qui est la limite :

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \gamma(\delta) = C_0 \quad (3.14)$$

La valeur C_0 représente l'effet de pépité. Elle dépend de l'échelle d'observation. Plus l'échelle d'observation augmente, plus l'effet de pépité diminue. En tenant compte de cet effet de pépité, le variogramme d'un champ aléatoire devient :

$$\gamma(\delta) = C_0 + v - C(\delta) \quad (3.15)$$

Les figures 3.2 et 3.3 présentent l'influence de l'effet de pépité et de la longueur de corrélation sur une trajectoire particulière et sur le variogramme. Nous observons clairement la dispersion du champ causée par l'effet de pépité sur la figure 3.2. La figure 3.3 montre que plus la longueur de corrélation est petite, plus la fréquence de variation du champ est grande.

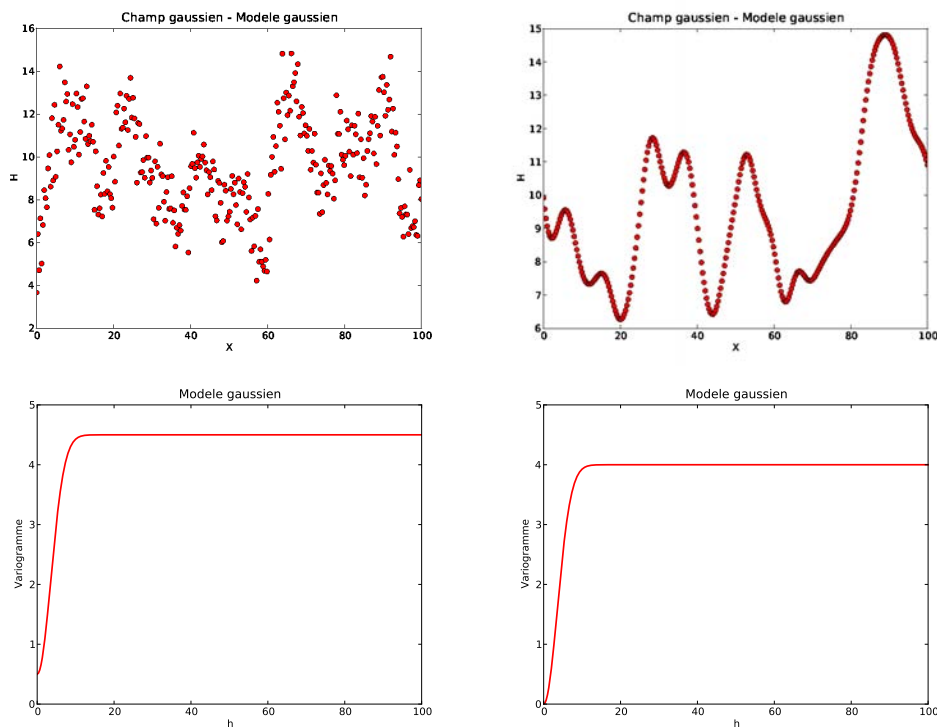


Figure 3.2 – Influence de l'effet de pépite sur une trajectoire et sur le variogramme (gaussien) : $(\mu = 10, v = 4, l = 5, C_0 = 0,5)$ à gauche et $(\mu = 10, v = 4, l = 5, C_0 = 0)$ à droite

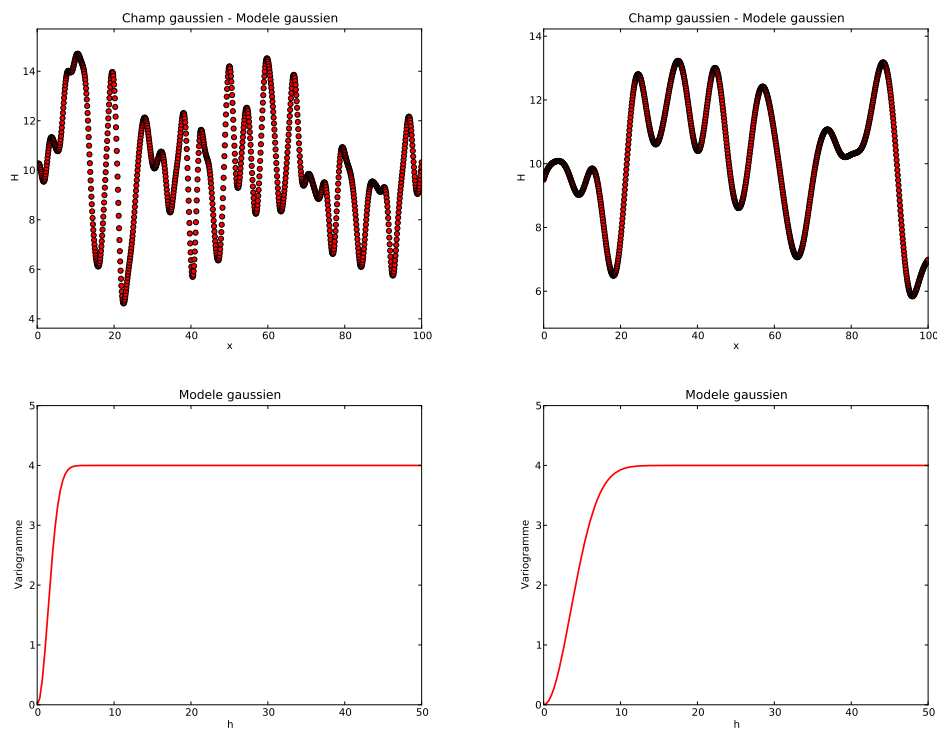


Figure 3.3 – Influence de la longueur de corrélation sur une trajectoire et sur le variogramme (gaussien) : $(\mu = 10, v = 4, l = 2, C_0 = 0)$ à gauche et $(\mu = 10, v = 4, l = 5, C_0 = 0)$ à droite

3.3.2 Variogramme empirique

La définition du variogramme (3.9) montre qu'il est possible de l'estimer directement à partir des observations $\mathcal{X} = \{h(x_1), h(x_2), \dots, h(x_N)\}$ du champ sans connaître sa moyenne, si on suppose que le champ est homogène. Par contre, par définition, l'estimation du covariogramme ou du corrélogramme demande d'estimer par avance la moyenne, ce qui pourrait introduire une incertitude d'estimation supplémentaire. Cette remarque nous amène à l'utilisation de l'estimation du *variogramme empirique* pour identifier le modèle de covariance du champ aléatoire. Les détails de la définition et de la construction du variogramme empirique sont disponibles dans [Cressie \(1991\)](#), [Bailey et Gatrell \(1995\)](#), [Journel et Huijbregts \(2003\)](#), [Marcotte \(2009\)](#) et [Sherman \(2011\)](#). La définition de l'estimation du variogramme empirique retenue ici est la suivante :

$$\hat{\gamma}(\delta) = \frac{1}{2N(\delta)} \sum_{|x_i - x_j| = \delta} [h(x_i) - h(x_j)]^2 \quad (3.16)$$

où $N(\delta)$ est le nombre de paires de points x_i, x_j dont l'écart est δ .

Pour l'illustration, considérons un exemple simple dans un cas unidimensionnel. Nous calculons le variogramme empirique à partir d'une trajectoire en utilisant le tableau de données 3.2 suivant.

x	0	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30
$h(x)$	10,87	11,03	10,15	10,29	10,77	9,57	8,94	9,14	9,42	9,36	9,18

Tableau 3.2 – Exemple de variogramme empirique - tableau des données

Pour chaque distance δ , nous trouvons tous les paires possibles de points dont la distance est de δ et nous calculons la différence correspondante des valeurs du champ. Le tableau 3.3 présente le calcul pour $\delta = 3$. Observons que pour $\delta = 3$, le nombre de paires est de $N(\delta) = 10$, la somme des différences aux carrées est de 3,0413. La valeur du variogramme correspondante à la distance $\delta = 3$ est calculée par la formule (3.15) : $\hat{\gamma}(3) = 0,152$.

Points		Distance	$H(x)$		Différence
x_i	x_j	δ	$h(x_i)$	$h(x_j)$	$[h(x_i) - h(x_j)]^2$
0	3	3	10,87	11,03	0,0256
3	6	3	11,03	10,15	0,7744
6	9	3	10,15	10,29	0,0196
9	12	3	10,29	10,77	0,2304
12	15	3	10,77	9,570	1,4400
15	18	3	9,570	8,940	0,3969
18	21	3	8,940	9,140	0,0400
21	24	3	9,140	9,420	0,0784
24	27	3	9,420	9,360	0,0036
27	30	3	9,360	9,180	0,0324

Tableau 3.3 – Exemple de variogramme empirique - tableau de calcul pour $\delta = 3$

De la même manière, nous pouvons construire le tableau des valeurs du variogramme empirique (Tab. 3.4), et représenter la courbe correspondante (Fig. 3.4).

δ	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30
$\hat{\gamma}$	0,152	0,324	0,337	0,487	0,828	1,118	0,926	0,969	1,423	1,422

Tableau 3.4 – Variogramme empirique - tableau de calcul pour différentes valeur de δ

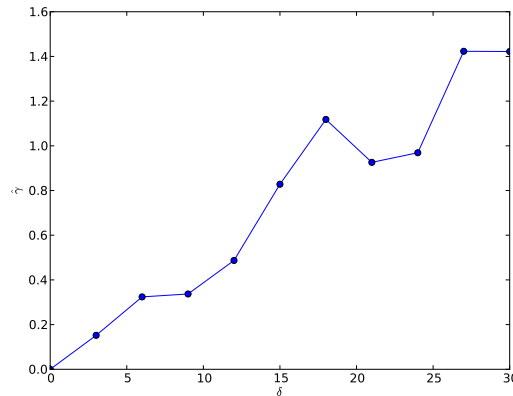


Figure 3.4 – Variogramme empirique estimé à partir des données dans la tableau 3.2

L'exemple précédent est simpliste, notamment parce que les points d'observation sont régulièrement espacés. Ce n'est pas toujours le cas en pratique. On distingue alors deux constructions du variogramme empirique : *construction point par point* et *construction par intervalles*. Celles-ci sont présentées dans les sections suivantes. On se limite au cas unidimensionnel pour simplifier les notations.

3.3.2.1 Construction point par point

Le variogramme empirique est construit selon les étapes suivantes :

- Étape 1 : On génère toutes les paires de points possibles (x_i, x_j) et on calcule la distance correspondante de chaque paire $\delta_{i,j} = |x_i - x_j|$. Ces distances sont stockées dans un ensemble $A = \{\delta_{i,j} = |x_i - x_j|; i, j = 1, \dots, N\}$.
- Étape 2 : On filtre dans l'ensemble A toutes les valeurs différentes possibles de $\delta_{i,j}$ et on les stocke dans un ensemble $B = \{\delta_k, k = 1, \dots, M\}$.
- Étape 3 : Pour chaque valeur $\delta_k, k = 1, \dots, M$ dans B , on compte dans A le nombre $N(\delta_k)$ de paires (x_i, x_j) réalisant cette distance δ_k . On calcule ensuite la somme des différences aux carrées correspondantes et on les stocke dans un ensemble D .

$$D = \left\{ \Delta_k = \sum_{\{(x_i, x_j): |x_i - x_j| = \delta_k\}} [h(x_i) - h(x_j)]^2 \right\}$$

- Étape 4 : On calcule la valeur du variogramme empirique correspondant à chaque valeur δ_k par la formule : $\hat{\gamma}(\delta_k) = \frac{\Delta_k}{2N(\delta_k)}$ et on trace le variogramme empirique point par point avec les couples $(\delta_k, \hat{\gamma}(\delta_k))$.

3.3.2.2 Construction par intervalles

Le variogramme empirique est construit selon les étapes suivantes :

- Étape 1 : On génère toutes les paires de points possibles (x_i, x_j) et on calcule la distance correspondante de chaque paire $\delta_{i,j} = |x_i - x_j|$. Ces distances sont stockées dans un ensemble $A = \{\delta_{i,j} = |x_i - x_j|; i, j = 1, \dots, N\}$.

- Étape 2 : On divise le domaine $\left[\min(A), \frac{\max(A)}{2} \right]$ en K intervalles de taille

$$T = \frac{\max(A)/2 - \min(A)}{K}. \text{ On obtient un ensemble de bornes}$$

$$\Gamma = \left\{ \delta_0 = \min(A), \dots, \delta_k = \delta_0 + kT, \dots, \delta_K = \frac{\max(A)}{2} \right\}.$$

- Étape 3 : Pour chaque intervalle $[\delta_k, \delta_{k+1}[$, on compte le nombre N_k de paires (x_i, x_j) dont la distance $\delta_k \leq \delta_{i,j} = |x_i - x_j| < \delta_{k+1}$. On calcule la somme des différences aux carrées correspondantes et on les stocke dans un ensemble comme dans la méthode précédente.
- Étape 4 : On associe chaque valeur Δ_k à une valeur $\bar{\delta}_k$ moyenne des distances $\delta_{i,j}$ tombant dans l'intervalle $[\delta_k, \delta_{k+1}[$:

$$\bar{\delta}_k = \frac{1}{N_k} \sum_{\{(x_i, x_j) : \delta_{i,j} \in [\delta_k, \delta_{k+1}[\}} \delta_{i,j}$$

- Étape 5 : On calcule les valeur du variogramme empirique par la formule : $\hat{\gamma}_k = \frac{\Delta_k}{2N_k}$ et on trace point par point les couples $\{\bar{\delta}_k, \hat{\gamma}_k\}$.

3.3.2.3 Remarques sur la construction du variogramme empirique

[Marcotte \(2009\)](#) donne des indications sur les valeurs des paramètres à prendre pour obtenir des variogrammes de bonne qualité.

- Pour chaque point expérimental du variogramme, il faut au moins 30 paires de points, *i.e.* pour chaque intervalle, $N(\delta) \geq 30$. Dans le cas où $N(\delta) \leq 10$, la valeur $\hat{\gamma}(\delta)$ associée n'est pas considérée comme fiable et on ignore ce point pour la suite (Sec. 3.3.3).
- Le nombre de paires $N(\delta)$ diminue lorsque la distance δ augmente. On ne tient donc pas compte des valeurs du variogramme lorsque δ dépasse environ $\frac{\mathcal{D}_{max}}{2}$, où \mathcal{D}_{max} est la taille du domaine d'observation considéré.

La figure 3.5 présente une réalisation simulée d'un champ aléatoire gaussien et les variogrammes empiriques construits par la méthode "point par point" et la méthode "par intervalles". On observe que celui construit par la méthode "point par point" est assez dispersé. De plus, le nombre de calculs dans cette méthode est grand car le cardinal M de l'ensemble B (étape 2) est de l'ordre de grandeur de la moitié du nombre de points décrivant la trajectoire.

Pour la suite, on utilise donc la méthode par intervalles pour construire le variogramme. Dans cette méthode, le choix de nombre d'intervalles est très important. Si celui-ci est grand, le nombre de calculs est élevé et le variogramme est alors dispersé. Par contre, s'il est trop petit, le variogramme n'est pas lisible. Pour le choix de ce nombre, nous proposons d'utiliser la *formule de Sturges* (Sturges, 1926), qui donne le nombre de classes optimal à utiliser pour tracer un histogramme à partir d'un échantillon de taille donnée.

$$K = 1 + \frac{10 \log_{10}(M)}{3} \quad (3.17)$$

où K est le nombre de classes de l'histogramme de toutes les distances possibles entre les points et M est le nombre de ces distances.

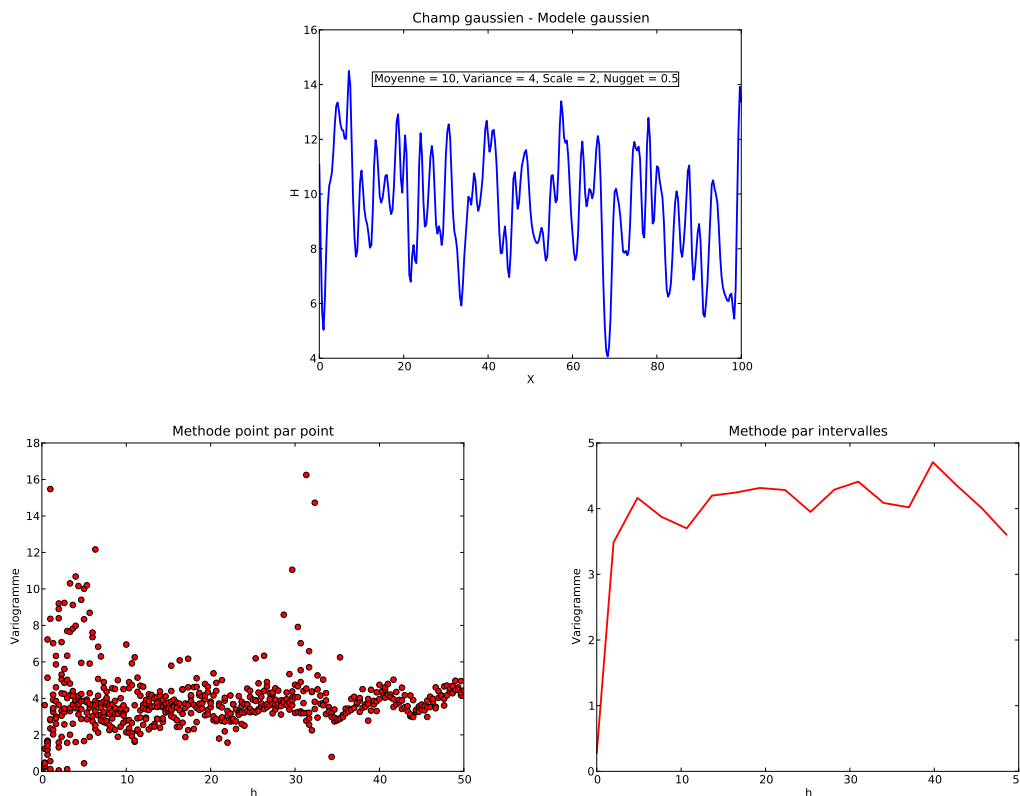


Figure 3.5 – Une réalisation simulée d'un champ gaussien, modèle de covariance gaussien et les variogrammes empiriques construits par la méthodes "point par point" et la méthode "par intervalles"

3.3.3 Identification du variogramme empirique

Malgré une bonne estimation du variogramme empirique, l'utilisation directe de celui-ci risque de conduire à des difficultés dues au bruit numérique. Cela signifie que la prédiction de la variabilité spatiale du champ aléatoire par une telle estimation du variogramme empirique pourra conduire à des situations pathologiques (matrice de covariance associée à la discrétisation non définie positive). Dès lors, on approxime en pratique le variogramme empirique par un modèle théorique défini positif (Sec. 2.2.4.3), dont on choisit la forme. La méthode des moindres carrés est appliquée pour estimer les paramètres du variogramme théorique qui permettent de reproduire au mieux le variogramme empirique.

Supposons donné un variogramme empirique $\hat{\gamma}(\delta)$ estimé en un ensemble de points $\{\delta_k, k = 1, \dots, M\}$. Le modèle théorique est noté $\gamma(\delta, \boldsymbol{\theta})$ avec $\boldsymbol{\theta}$ le vecteur des paramètres à identifier, *i.e.* la variance v , la longueur de corrélation l et l'effet de pépité C_0 . Notons $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ le vecteur contenant les valeurs du variogramme empirique $\hat{\gamma}(\delta)$ et $\boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})$ est celui contenant les valeurs du variogramme théorique calculées aux points $\{\delta_k, k = 1, \dots, M\}$ avec un $\boldsymbol{\theta}$ donné. Il y a trois méthodes pour l'estimation par moindres carrés des paramètres d'ajustement $\boldsymbol{\theta}$ (Cressie, 1991; Sherman, 2011) :

- *Moindres carrés ordinaires* (OLS - *Ordinaire Least Square* en anglais), dans lequel les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ sont choisis pour minimiser $[\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]^T [\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]$.
- *Moindres carrés généralisés* (GLS - *Generalized Least Square* en anglais), dans lequel les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ sont choisis pour minimiser $[\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]$ où $\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})$ est la matrice de covariance du vecteur aléatoire $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$ qui dépend des paramètres $\boldsymbol{\theta}$.
- *Moindres carrés pondérés* (WLS - *Weighted Least Square* en anglais), dans lequel les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ sont choisis pour minimiser $[\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]^T \mathbf{W}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\hat{\boldsymbol{\gamma}} - \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\theta})]$ où $\mathbf{W}(\boldsymbol{\theta})$ est une matrice diagonale dont la diagonale contenant les pondérations.

Sherman (2011) montre que la méthode OLS peut être mise en œuvre immédiatement par un algorithme non-linéaire, tandis que les deux autres rencontrent des difficultés dans le calcul au préalable les matrices $\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})$ et $\mathbf{W}(\boldsymbol{\theta})$. Mais elle n'est pas le meilleur estimateur puisqu'elle ne prend pas en compte l'influence des paramètres : i. le nombre de paires de points dans chaque intervalle $N(\delta)$, ii. la variance des composantes du vecteur $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$, iii. la covariance entre les composantes du vecteur $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$. Le troisième paramètre est pris en compte dans la méthode GLS, tandis que les deux premiers sont pris en compte dans la méthode WLS. Il y a plusieurs types de pondération possibles.

- Pondération P1 : Cressie (1991) montre dans son livre le détail du calcul de la matrice de covariance \mathbf{R} et le vecteur de variance $\mathbf{v}_{\hat{\boldsymbol{\gamma}}}$ des composantes du vecteur $\hat{\boldsymbol{\gamma}}$. Il propose de prendre la matrice de pondération \mathbf{W} telle que sa diagonale est le vecteur $\mathbf{v}_{\hat{\boldsymbol{\gamma}}}$.

$$w_{kk}^{(1)} = v_{\hat{\gamma}_k} = \frac{\gamma^2(\delta_k)}{N(\delta_k)}$$

Cette pondération est reprise dans Fuentes (2000) et Sherman (2011).

- La pondération P2 et P3 : [Schlather \(2009\)](#) dans ses travaux propose de séparer l'influence de différents paramètres $\gamma^2(\delta_k)$ et $N(\delta_k)$ de la pondération P1. Il prend deux pondération P2 et P3 ci-dessous :

$$w_{kk}^{(2)} = \sqrt{N(\delta_k)}$$

$$w_{kk}^{(3)} = \gamma^2(\delta_k)$$

3.3.4 Résultats

La figure 3.6 présente une réalisation d'un champ aléatoire gaussien, de modèle de covariance exponentiel, simulée par la méthode spectrale et l'identification du variogramme empirique ordinaire par les méthodes OLS et WLS. La comparaison entre les paramètres obtenus et ceux de référence (*i.e.* ceux utilisés pour générer la trajectoire) est présentée dans le tableau 3.5. La figure 3.6 montre un bon accord entre les différentes méthodes des moindres carrés. Cet accord est confirmé par le tableau 3.5. Par rapport aux paramètres de référence, l'erreur maximale est encore de l'ordre de 13,5%.

Comme ces paramètres ont été identifiés avec *une seule* réalisation du champ, le résultat est acceptable. Cependant, les différentes expériences numériques menées ont montré que l'identification du variogramme et son ajustement sont souvent sensibles aux paramètres utilisés (nombre de classes, choix des pondérations). L'extension aux problèmes bidimensionnel ou tridimensionnel présentant une anisotropie (effet attendu dans les applications aux champs de contraintes du chapitre suivant) est par ailleurs délicate.

	v	l	C_0
Référence	4,00	2,00	0,50
OLS – CL	3,78	2,17	0,49
WLS – P1	3,76	2,27	0,50
WLS – P2	3,83	2,15	0,44
WLS – P3	3,76	2,27	0,52

Tableau 3.5 – Variogramme empirique - tableau des paramètres fittés

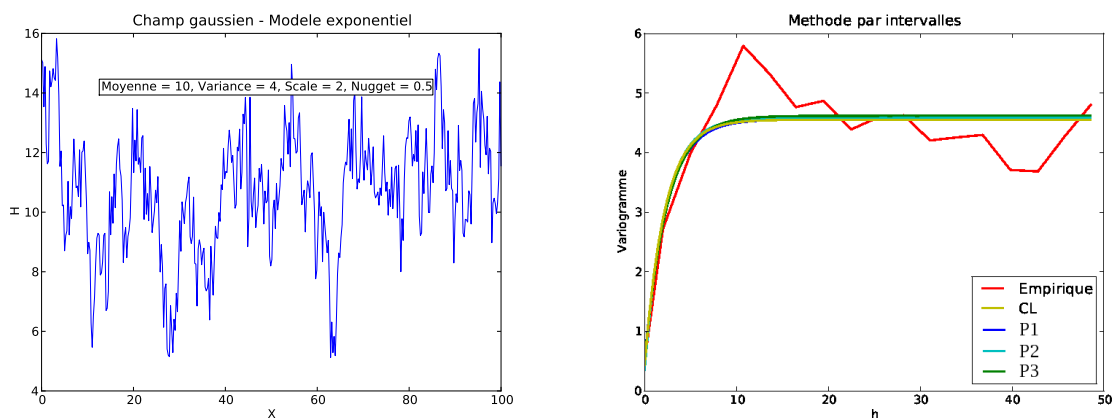


Figure 3.6 – Variogramme empirique simple - ajustement par la méthode des moindres carrés

3.3.5 Conclusion

La méthode du variogramme est une méthode simple et intuitive tant dans sa compréhension que dans sa mise en œuvre. Elle est applicable même lorsque l'on ne dispose que d'une seule réalisation du champ. S'il y a plusieurs jeux de données disponibles, nous pouvons prendre le variogramme empirique obtenu en moyennant ceux relatifs à chaque réalisation disponible. Le fait de moyennner les variogrammes empiriques nous permet de lisser le résultat et de réduire l'erreur de l'estimation. Cependant, lorsque le nombre de points d'observations (ou nombre de réalisations) est grand, ou encore dans le cas multidimensionnel, cette méthode peut devenir coûteuse en temps de calcul.

3.4 Krigeage universel - Méthode de maximum de vraisemblance

3.4.1 Krigeage universel

Le krigeage universel utilise des fonctions $\{f_j(\mathbf{x}), j = 1, \dots, p\}$ dépendant du point courant \mathbf{x} pour exprimer une non stationnarité de la moyenne, *e.g.* des fonctions polynomiales ou périodiques. Le modèle d'approximation du champ au point \mathbf{x} est défini par une combinaison linéaire des observations $\mathcal{X} = \{h(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, N\}$ et présenté par l'équation (3.2). Les coefficients β_j sont déterminés par la condition de variance minimale sous contrainte de non biais (Eq. (3.3), Eq. (3.4)). La résolution de ces équations est détaillée dans Kitanidis (1983, 1987); Cressie (1991) et Lophaven et al. (2002). Nous ne présentons ici que les résultats. Le modèle d'approximation du champ aléatoire $H(\mathbf{x}, \omega)$ est donné par :

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{f}^T \boldsymbol{\beta} + \mathbf{r}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathcal{X} - \mathbf{F} \boldsymbol{\beta}) \quad (3.18)$$

avec :

$$\boldsymbol{\beta} = (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathcal{X} \quad (3.19)$$

où :

- \mathbf{R} est la matrice de corrélation du vecteur aléatoire \mathcal{X} de taille $N \times N$:

$$R_{ij} = \frac{1}{\nu} \mathbb{E} [\mathcal{X} \mathcal{X}^T] = \rho(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, \boldsymbol{\theta}) \quad i, j = 1, \dots, N \quad (3.20)$$

- \mathbf{r} est un vecteur de taille $1 \times N$ représentant la corrélation entre $H(\mathbf{x})$ et le vecteur \mathcal{X} :

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = [\rho(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}|, \boldsymbol{\theta}), \dots, \rho(|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}|, \boldsymbol{\theta})]^T \quad (3.21)$$

- \mathbf{F} est une matrice de taille $N \times p$ dont chaque ligne i représente les valeurs des fonctions $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ au point \mathbf{x}_i .

$$\mathbf{F} = [\mathbf{f}(\mathbf{x}_1), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{x}_N)]^T \quad (3.22)$$

La variance de l'erreur de l'estimation est calculée par :

$$\mathbb{E} \left[\left(\hat{H}(\mathbf{x}) - H(\mathbf{x}) \right)^2 \right] = v \left(1 + \mathbf{u}^T (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{u} - \mathbf{r}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r} \right) \quad (3.23)$$

avec $\mathbf{u} = \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{r} - \mathbf{f}$ et v la variance du champ $Z(\mathbf{x}, \omega)$ qui est estimée par :

$$\hat{v} = \frac{1}{N} (\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{R}^{-1} (\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}) \quad (3.24)$$

Nous constatons que le modèle d'approximation du champ aléatoire est complètement défini lorsque la fonction de covariance $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \boldsymbol{\theta}) = v\rho(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|, \boldsymbol{\theta})$ est connue. Le problème posé est d'identifier cette fonction de covariance. Il s'agit de trouver les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ d'un modèle de covariance théorique en utilisant les observations du champ. Le problème est résolu par la méthode du *maximum de vraisemblance*, présentée dans la section suivante.

3.4.2 Fonction de vraisemblance

La fonction de vraisemblance des observations $\mathcal{X} = \{h(\mathbf{x}_i), i = 1, \dots, N\}$ est définie par la densité de probabilité conjointe des variables gaussiennes en cet ensemble de points (Kitanidis, 1987; Cressie, 1991). Elle s'écrit :

$$L(\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta}) = (2\pi)^{-N/2} (v)^{-N/2} |\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})|^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2v} [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}] \right] \quad (3.25)$$

où $|\cdot|$ note le déterminant et où les autres notations sont définies à la section 3.4.1. L'idée est de trouver les paramètres $\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta}$ pour que la probabilité d'observer les valeurs effectivement observées soit maximale. Le problème consiste en une optimisation non-linéaire visant à maximiser la fonction de vraisemblance pour trouver les paramètres. En pratique, au lieu de maximiser directement la fonction de vraisemblance, on minimise son logarithme népérien négatif.

$$\tilde{L}(\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta}) = \frac{N}{2} \ln(2\pi) + \frac{N}{2} \ln v + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})| + \frac{1}{2v} [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}] \quad (3.26)$$

3.4.3 Maximum de vraisemblance

Le problème posé est de minimiser la fonction $L(\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta})$ définie par l'équation (3.26). On élimine tous les termes constants qui n'interviennent pas dans le problème d'optimisation. La fonction à minimiser devient :

$$\tilde{L}(\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta}) = \frac{N}{2} \ln v + \frac{1}{2} \ln |\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})| + \frac{1}{2v} [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\mathcal{X} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}] \quad (3.27)$$

Les conditions nécessaires sont (Kitanidis, 1987) :

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -[\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{F} = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \tilde{L}}{\partial v} = \frac{N}{2v} - \frac{1}{2v^2} [\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})[\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}] = 0 \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial \theta_j} &= \frac{1}{2} \text{Tr} [\mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{R}'_j(\boldsymbol{\theta})] - \frac{1}{2} [\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{R}'_j(\boldsymbol{\theta})\mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) [\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

où $\text{Tr}(\cdot)$ note la trace d'une matrice et $\mathbf{R}'_j(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\partial \mathbf{R}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \theta_j}$. Une résolution directe par l'algorithme de type Newton est présentée dans Kitanidis (1983). Il montre que l'estimateur des paramètres par la méthode de maximum de vraisemblance est non-biaisé et consistante. Cependant, une telle résolution directe d'un problème d'optimisation à plusieurs inconnues est toujours délicate. Une autre résolution de type itérative est présentée dans Kitanidis (1987); Fuentes (2000); Lophaven et al. (2002). Nous présentons ici le principe de cette résolution.

Notons que, pour un $\boldsymbol{\theta}$ donné, les équations (3.28) et (3.29) nous donnent respectivement les estimateurs de $\boldsymbol{\beta}$ et de v .

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\theta}) = [\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})\mathbf{F}]^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{\mathcal{X}} \quad (3.31)$$

$$\hat{v}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N} [\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}]^T \mathbf{R}^{-1}(\boldsymbol{\theta})[\boldsymbol{\mathcal{X}} - \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}] \quad (3.32)$$

Nous constatons que ces estimateurs sont bien les solutions du modèle d'approximation du krigeage universel (Eq. (3.19), Eq. (3.24)). Cela montre que les coefficients $\boldsymbol{\beta}$ et la variance v estimés par la méthode de maximum de vraisemblance, réalisent bien une estimation non-biaisée de variance minimale du champ aléatoire.

Les étapes de la résolution sont les suivantes :

- Choisir un point de départ du vecteur des paramètres $\boldsymbol{\theta}$.
- Estimer les coefficients $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ et la variance \hat{v} par les équations (3.31), (3.32).
- Minimiser la fonction $\tilde{L}(\boldsymbol{\beta}, v, \boldsymbol{\theta})$ sachant les estimateurs $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ et \hat{v} .
- Répéter les étapes 2 et 3 jusqu'à la convergence.

Le principe de cette résolution est simple mais la complexité des formules (3.31) et (3.32) peut causer des difficultés dans la mise en œuvre. Fuentes (2000) propose d'utiliser la décomposition de Cholesky de la matrice de covariance $\mathbf{R} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ pour simplifier le problème en raisonnant sur les données modifiées par la transformation linéaire par la matrice \mathbf{L}^{-1} .

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{X}}^* &= \mathbf{L}^{-1}\boldsymbol{\mathcal{X}} \\ \mathbf{F}^* &= \mathbf{L}^{-1}\mathbf{F} \\ Z^* &= \mathbf{L}^{-1}Z \end{aligned} \quad (3.33)$$

Le modèle de krigeage du vecteur $\boldsymbol{\mathcal{X}}^*$ peut être écrit :

$$\boldsymbol{\mathcal{X}}^* = \mathbf{F}^* \boldsymbol{\beta} + Z^* \quad (3.34)$$

où $Z^* \sim \mathcal{N}(0, \nu \mathbf{I})$ où \mathbf{I} est la matrice d'identité. La méthode du maximum de vraisemblance est maintenant appliquée au vecteur $\boldsymbol{\mathcal{X}}^*$. Alors, les estimateurs (3.31), (3.32) deviennent :

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\boldsymbol{\theta}) = [\mathbf{F}^{*T}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta})]^{-1} \mathbf{F}^{*T}(\boldsymbol{\theta}) \boldsymbol{\mathcal{X}}^* \quad (3.35)$$

$$\hat{\nu}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N} [\boldsymbol{\mathcal{X}}^* - \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta}) \hat{\boldsymbol{\beta}}]^T [\boldsymbol{\mathcal{X}}^* - \mathbf{F}^*(\boldsymbol{\theta}) \hat{\boldsymbol{\beta}}] \quad (3.36)$$

3.4.4 Maximum de vraisemblance restreint

L'estimation du maximum de vraisemblance est connue comme non-biaisée et consistante. Cependant, [Kitanidis \(1987\)](#) montre que cette méthode présente des limitations dans le cas où la longueur de corrélation du champ et la taille du domaine d'observation sont du même ordre. De plus, la dépendance de l'estimation des paramètres $\boldsymbol{\theta}$ à celle des coefficients $\boldsymbol{\beta}$ peut entraîner des erreurs indésirables. La méthode du *maximum de vraisemblance restreint* a été créée pour résoudre ces problèmes. Cette méthode a été proposée par [Patterson et Thompson \(1971\)](#) et détaillée dans [Kitanidis \(1987\)](#).

Le principe de cette approche est de prendre une transformation du vecteur $\boldsymbol{\mathcal{X}}$ par une matrice \mathbf{L} pour que le résultat ne contienne pas les coefficients $\boldsymbol{\beta}$.

$$\boldsymbol{\mathcal{X}}^* = \mathbf{L} \boldsymbol{\mathcal{X}} = \mathbf{L} \mathbf{F} \boldsymbol{\beta} + \mathbf{L} Z \quad (3.37)$$

Alors la matrice \mathbf{L} est choisie pour que $\mathbf{L} \mathbf{F} = 0$. Le vecteur $\boldsymbol{\mathcal{X}}^* = \mathbf{L} Z$ est gaussien avec :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\mathcal{X}}^*] = 0 \quad (3.38)$$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\mathcal{X}}^* \boldsymbol{\mathcal{X}}^{*T}] = \nu \mathbf{L} \mathbf{R} \mathbf{L}^T \quad (3.39)$$

Nous appliquons maintenant l'estimation de maximum de vraisemblance avec les observations $\boldsymbol{\mathcal{X}}^*$. Dans les équations, nous remplaçons $\boldsymbol{\mathcal{X}}$ par $\boldsymbol{\mathcal{X}}^*$, \mathbf{R} par $\mathbf{L} \mathbf{R} \mathbf{L}^T$ et les termes $\mathbf{F} \boldsymbol{\beta}$ sont éliminés. La difficulté réside dans le choix de la matrice \mathbf{L} . Le choix de celle-ci n'est en effet pas arbitraire. On peut par exemple choisir $\mathbf{L} = \mathbf{I} - \mathbf{F}(\mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T$ ([Kitanidis, 1987](#)).

3.4.5 Résultats

Cette section est réservée à la présentation des résultats obtenus par la méthode de *maximum de vraisemblance* (MV). Le problème d'optimisation est résolu en utilisant le package [spicy.optimize](#) (version 0.7.0) en Python (version 2.6.5). Le tableau 3.6 présente les paramètres de référence et ceux identifiés par MV. La figure 3.7 présente l'approximation par krigeage universel, l'estimation de l'erreur correspondante (Eq. (3.23)), ainsi que la fonction de vraisemblance. Les résultats obtenus sont proches

des valeurs de référence (Tab. 3.6), l'erreur maximal étant 10% sur la longueur l . On note que la variance estimée est plus proche ($< 2\%$ d'erreur) de la référence que dans l'approche par variogramme (6% d'erreur). On observe bien sur la figure 3.7 que le logarithme népérien négatif \tilde{L} de la fonction de vraisemblance est minimale lorsque la longueur de corrélation $l \approx 1$.

	v	l
Référence	4,00	1,00
MV	3,99	0,895

Tableau 3.6 – Maximum de vraisemblance - tableau des paramètres identifiés

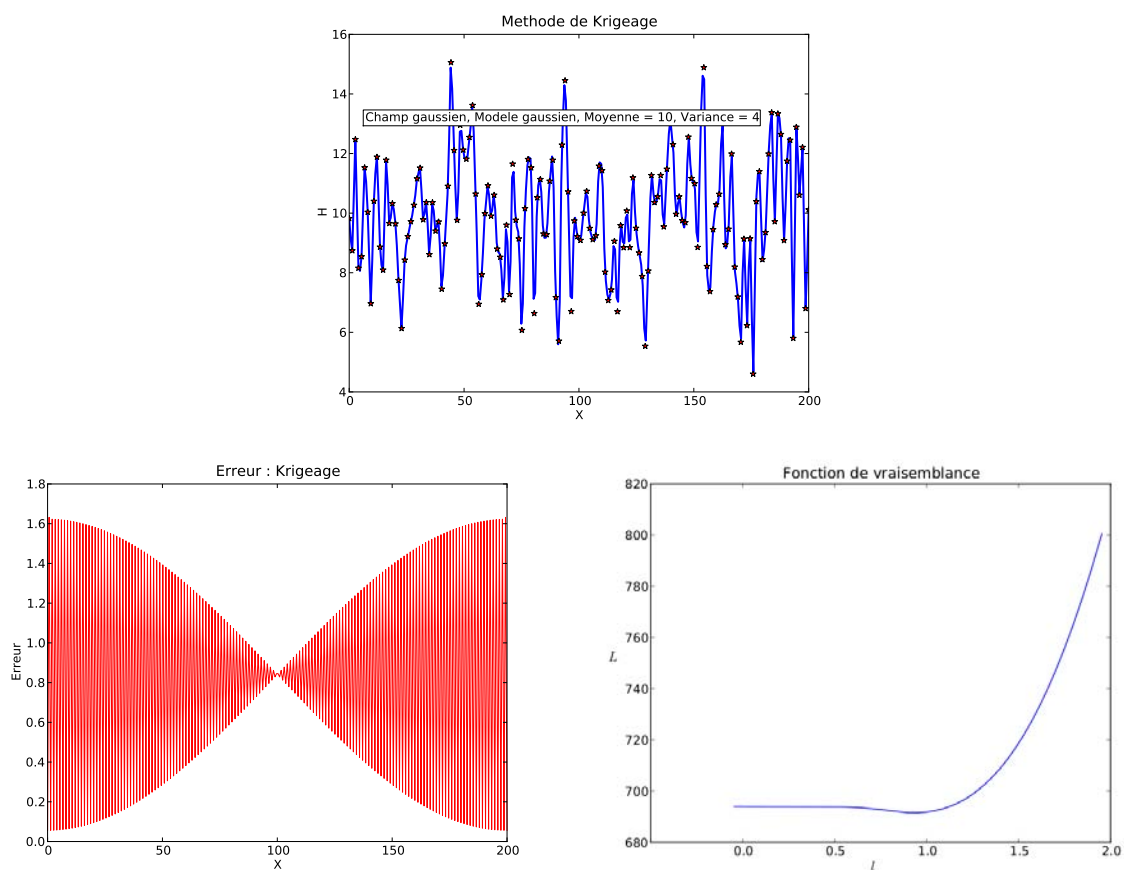


Figure 3.7 – Maximum de vraisemblance - réalisation simulée, diagramme de l'erreur et de la fonction de vraisemblance

3.4.6 Conclusion

La méthode de maximum de vraisemblance est indépendante du modèle d'approximation du krigeage universel, mais ces approches sont très liées dans la mise en œuvre pratique. L'estimation des coefficients $\hat{\beta}$ de la partie déterministe par la méthode de maximum de vraisemblance reproduit le résultat du modèle du krigeage. À l'inverse, le krigeage utilise l'estimateur de la variance du champ aléatoire résultant de l'estimation de maximum de vraisemblance.

Cette méthode apparaît très utile dans le cas où nous n'avons qu'une seule réalisation du champ aléatoire objet de l'étude dont chaque composante est une valeur fixée du champ. Par exemple, dans l'industrie minière de charbon, les observations en un ensemble de points nous donnent les teneurs de charbon en ces points. Ces valeurs du champ sont fixées et tous les modèles d'approximation doivent reproduire ces valeurs à ces mêmes points. Mais lorsque nous avons plusieurs réalisations du champ observées en un même ensemble de points (par exemple les champs de contraintes résultant de plusieurs calculs polycristallins dans notre cas), chaque réalisation donne une estimation différente des coefficients β et alors une estimation différente des paramètres θ . Dès lors, nous n'appliquons pas cette méthode à notre travail dans la suite.

3.5 Méthode du périodogramme

La méthode du *périodogramme* identifie le modèle de covariance du champ aléatoire en utilisant la représentation spectrale. Elle se base sur l'hypothèse de stationnarité et d'ergodicité du champ. Pour un champ aléatoire stationnaire, la relation de Wiener-Khintchine (Eq. (2.65)) représente la *densité spectrale de puissance* (DSP) comme la transformée de Fourier de la fonction de covariance du champ. La présente méthode consiste à estimer la DSP empirique (appelé périodogramme empirique) et à l'identifier avec un modèle théorique (Sec. 2.3.2.1) en lieu et place de la fonction de covariance. Cette méthode est présentée dans Welch (1967); Hearn et Metcalfe (1995); Stoica et Moses (2005); Shumway et Stoffer (2006); Dang et al. (2011c) et Kobayashi et al. (2012).

Dans cette section, par simplicité, on présente en détail cette méthode dans le cas unidimensionnel. Pour le cas multidimensionnel, la fonction de covariance (resp. la DSP) multidimensionnelle est définie comme étant le produit des covariances (resp. des DSP) unidimensionnelles sur chaque axe. La méthode du périodogramme est généralisée en utilisant la transformée de Fourier correspondante.

3.5.1 Estimation du périodogramme

Considérons un champ aléatoire unidimensionnel stationnaire, ergodique $H(x, \omega)$ de moyenne supposée nulle, défini sur un domaine fini \mathcal{D} de la partie positive de l'espace. Sa version discrète est représentée par un vecteur aléatoire $\mathcal{X} = \{H(x_i), i = 0, \dots, (N - 1)\}$

sur une grille régulière $\{x_k = k\Delta x, k = 0, \dots, (N-1)\}$ où $\Delta x = \frac{|\mathcal{D}|}{N-1}$ représente la résolution de discrétisation du champ dans le domaine \mathcal{D} . La grille correspondant dans le domaine fréquentiel est $\{f_m = m\Delta f, m = 0, \dots, (N-1)\}$. Comme indiqué dans la section 2.5.4.2, selon le théorème de Shannon, la relation entre Δx et Δf s'écrit :

$$\Delta f = \frac{1}{2(N-1)\Delta x} = \frac{1}{2|\mathcal{D}|} \quad (3.40)$$

Pour estimer le périodogramme du champ $H(x, \omega)$, on commence par l'estimation de sa fonction de covariance à partir du vecteur \mathcal{X} s'écrit (Stoica et Moses, 2005; Broersen, 2006) :

$$\hat{C}(\delta_n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} H(x_k + \delta_n)H(x_k) \quad (3.41)$$

où $\{\delta_n = n\Delta x, n = 0, \dots, (N-1)\}$ désigne l'ensemble de distances servant à estimer la covariance du champ dans le domaine original \mathcal{D} .

Selon la relation de Wiener-Khintchine, la transformée de Fourier de l'estimation de la fonction de covariance nous donne l'estimation du périodogramme. Dans ce cas, pour une estimation discrète de la fonction de covariance $\hat{C}(\delta_n)$ selon l'équation (3.41), on utilise la transformée de Fourier discrète. L'estimation du périodogramme s'écrit (Stoica et Moses, 2005) :

$$\begin{aligned} \hat{P}(f_m) &= \sum_{n=0}^{N-1} \hat{C}(\delta_n) e^{-i2\pi mn/2N} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} H(x_k + \delta_n)H(x_k) e^{-i2\pi mn/2N} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} H(x_k + \delta_n)H(x_k) e^{-i2\pi(k+n)m/2N} e^{i2\pi km/2N} \\ &= \frac{1}{N} \left(\sum_{n=0}^{N-1} H(x_k + \delta_n) e^{-i2\pi(k+n)m/2N} \right) \left(\sum_{k=0}^{N-1} H(x_k) e^{i2\pi km/2N} \right) \\ &= \frac{1}{N} \left(\sum_{t=0}^{N-1} H(x_t) e^{-i2\pi tm/2N} \right) \left(\sum_{k=0}^{N-1} H(x_k) e^{i2\pi km/2N} \right) \\ &= \frac{1}{N} \tilde{H}(f_m) \tilde{H}^*(f_m) \\ &= \frac{1}{N} |\tilde{H}(f_m)|^2 \end{aligned} \quad (3.42)$$

où $|\cdot|$ note le module d'un nombre complexe, $\tilde{H}(f_m)$ est la transformée de Fourier discrète de $H(x)$ et $\tilde{H}^*(f_m)$ est le conjugué de $\tilde{H}(f_m)$.

$$\tilde{H}(f_m) = \sum_{n=0}^{N-1} H(x_n) e^{-i2\pi nm/2N} \quad (3.43)$$

Notons ici que les équations (3.42) et (3.43) représentent des transformées de Fourier discrètes des vecteurs de tailles N , tandis que leurs résolutions correspondent à des transformées des vecteurs de tailles $2N$. Dès lors, en pratique on doit utiliser la transformée de Fourier rapide (FFT) de taille $2N$ en complétant les vecteur sous-jacents par des 0 pour qu'ils soient de tailles $2N$.

Un bon estimateur doit satisfaire les deux conditions de non biais et de consistance. Nous allons vérifier ces deux conditions pour les estimateurs de la fonction de covariance et du périodogramme. Comme le champ est représenté par le vecteur aléatoire \mathcal{X} de taille N limitée, l'espérance de l'estimateur de la fonction de covariance (3.40) s'écrit (Stoica et Moses, 2005) :

$$\begin{aligned} \mathbb{E} [\hat{C}(\delta_n)] &= \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1-n} \mathbb{E} [H(x_k + \delta_n)H(x_k)] \\ &= \frac{N-n}{N} \mathbb{E} [H(x_k + \delta_n)H(x_k)] \\ &= \left(1 - \frac{n}{N}\right) C(\delta_n) \end{aligned} \quad (3.44)$$

Comme la fonction de covariance est symétrique, l'équation (3.44) peut être écrite :

$$\mathbb{E} [\hat{C}(\delta)] = w_B(n)C(\delta) \quad (3.45)$$

où $w_B(n)$ est la fenêtre de Bartlett (triangulaire) définie par :

$$w_B(n) = \begin{cases} 1 - \frac{|n|}{N} & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.46)$$

On observe donc que l'estimateur (3.41) que l'estimateur de la fonction de covariance du champ aléatoire est biaisé. Mais lorsque N tend vers l'infini, le terme $1 - \frac{|n|}{N}$ tend vers 1. L'estimateur de la fonction de covariance est alors asymptotiquement non biaisé. De plus, sa variance dépend des moments d'ordre quatre (Hearn et Metcalfe, 1995; Broersen, 2006), mais tend vers presque sûrement vers 0 lorsque N tend vers l'infini (Lacroix et Baldi, 2005). Dès lors, l'estimateur de la fonction de covariance est asymptotiquement consistant.

On revient à l'estimateur du périodogramme. En prenant la transformée de Fourier de l'équation (3.45), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathfrak{F} \left\{ \mathbb{E} [\hat{C}(\delta)] \right\} &= \mathfrak{F} \{ w_B(n)C(\delta) \} \\ \mathbb{E} \left[\mathfrak{F} \left\{ \hat{C}(\delta) \right\} \right] &= \mathfrak{F} \{ w_B(n) \} * \mathfrak{F} \{ C(\delta) \} \\ \mathbb{E} [\hat{P}(f)] &= W_B(f) * P(f) \end{aligned} \quad (3.47)$$

où $*$ note le produit de convolution, \mathfrak{F} note la transformée de Fourier et $W_B(f)$ est la transformée de Fourier de la fenêtre de Bartlett :

$$W_B(f) = \frac{1}{N} \left(\frac{\sin(N\pi f)}{\sin(\pi f)} \right)^2 \quad (3.48)$$

L'équation (3.48) montre que l'estimateur du périodogramme est biaisé. Cependant, puisque $W_B(f)$ converge vers une impulsion de Dirac quand N tend vers l'infini, cet estimateur est asymptotiquement non-biaisé. La variance de l'estimateur du périodogramme dépend des moments d'ordre quatre du champ. Elle est calculée approximativement par (Broersen, 2006) :

$$\text{V} [\hat{P}(f)] = \left\{ \text{E} [\hat{P}(f)] \right\}^2 \quad (3.49)$$

Selon l'équation (3.49), l'estimateur du périodogramme n'est pas consistant. Dès lors, si nous avons plusieurs réalisations du champ, l'estimation du périodogramme avec cet estimateur diffère selon la réalisation. Une solution présentée dans la section suivante propose d'utiliser le périodogramme moyenné sur plusieurs réalisations.

3.5.2 Périodogramme moyen

Comme indiqué dans la section précédente, l'estimation de la DSP est asymptotiquement non-biaisée mais non consistante. Il faut alors une solution pour réduire la variance de l'estimateur. La méthode du périodogramme moyen (Bartlett, 1948; Welch, 1967) consiste à diminuer la variance de l'estimateur en prenant la moyenne d'estimations *indépendantes* du périodogramme. Les détails de cette méthode sont disponibles dans Hearn et Metcalfe (1995); Stoica et Moses (2005); Shumway et Stoffer (2006)

Considérons maintenant un ensemble de variables aléatoires $\{X_i, i = 1, \dots, n\}$ indépendantes de moyenne μ et de variance v . Une variable Y définie par la moyenne $Y = (X_1 + X_2 + \dots + X_n)/n$ a la même moyenne μ que X_i . Mais sa variance v/n est n fois plus faible que celle de X . De la même manière, Bartlett propose d'estimer K périodogrammes avec K réalisations indépendantes du champ et de prendre la moyenne de ceux-ci. L'estimation de chacun de ces périodogrammes est non consistante mais la variance du périodogramme moyen va tendre vers 0 lorsque K tend vers l'infini, rendant cet estimateur consistant asymptotiquement.

Notons $\{\mathcal{X}_i, i = 1, \dots, K\}$, K réalisations supposées indépendantes d'un champ aléatoire $H(x, \omega)$. Pour chaque réalisation, on estime la DSP par l'estimateur (3.42). Le périodogramme est estimé par la moyenne de l'ensemble de périodogrammes $\{\hat{P}_i(f), i = 1, \dots, K\}$.

$$\hat{P}(f) = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \hat{P}_i(f) \quad (3.50)$$

La moyenne et la variance de cet estimateur sont calculées par :

$$\text{E} [\hat{P}(f)] = \text{E} [\hat{P}_i(f)] = P(f) * W_B(f) \quad (3.51)$$

$$\text{V} [\hat{P}(f)] = \frac{1}{K} \text{V} [\hat{P}_i(f)] = \frac{1}{K} P^2(f) \quad (3.52)$$

Les équations (3.51) et (3.52) montrent que l'estimateur du périodogramme moyen est asymptotiquement non-biaisé et consistante lorsque K tend vers l'infini. Dans le cas où il y a une seule longue réalisation du champ, celle-ci est divisée en plusieurs sous-réalisations

qui ne se recouvrent pas. Le périodogramme du champ est calculé par la moyenne de ceux estimés à partir des sous-réalisations.

3.5.3 Fenêtres

Jusqu'ici nous avons construit un estimateur du périodogramme moyen non-biaisé et consistant. Un élément important pour satisfaire la première condition est le choix de la fenêtre de décalage. Cette fenêtre intervient dans l'estimateur de la fonction de covariance du fait de la taille limitée (N points) de chaque réalisation du champ. Par conséquent, elle entraîne la convolution de l'estimation de la DSP avec la transformée de Fourier de la fenêtre qui lisse le périodogramme empirique (Stoica et Moses, 2005). Cette section se propose d'étudier la signification spectrale de la fenêtre.

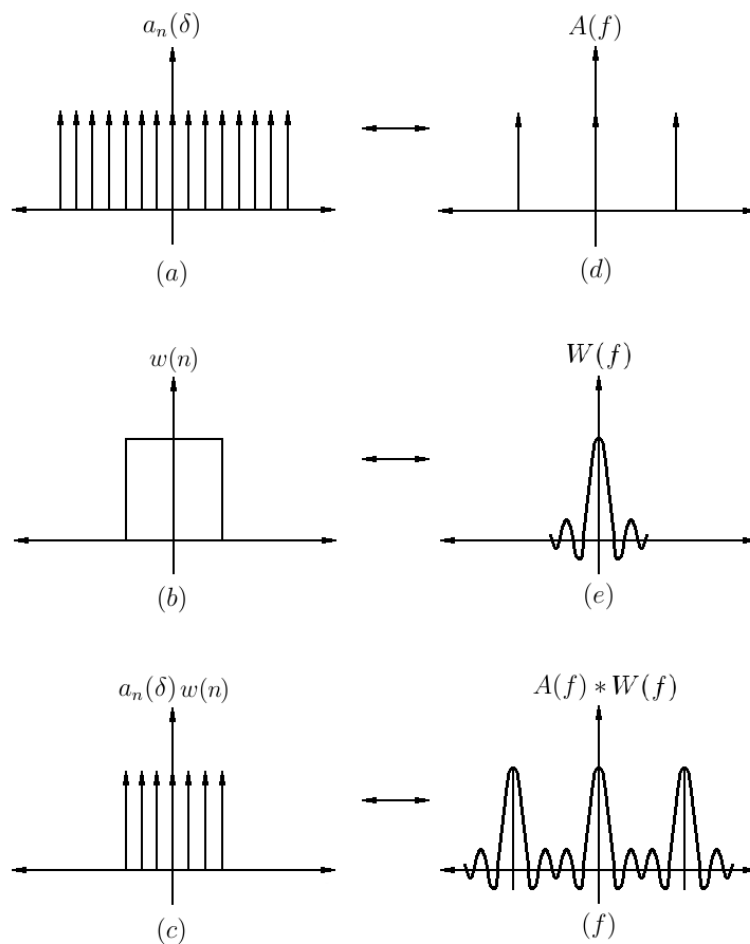


Figure 3.8 – Influence de la fenêtre d'observation sur la transformée de Fourier d'une séquence de Dirac

Considérons un exemple de la transformée de Fourier d'une séquence comme l'indique la figure 3.8. La transformée de Fourier d'une séquence de Dirac infinie (Fig. 3.8a) est une séquence de Dirac (Fig. 3.8d). Une fenêtre d'observation rectangulaire (Fig. 3.8b)

a une transformée de Fourier sous forme d'une fonction d'oscillation (Fig. 3.8e) qui se constitue d'un lobe principal et de lobes secondaires. Lorsque l'on applique cette fenêtre d'observation à la séquence, la transformée de Fourier de leur produit (Fig. 3.8c) est calculée par la convolution de leurs transformées de Fourier (Fig. 3.8f). En comparant les figures 3.8d et 3.8f, nous constatons que :

- Chaque Dirac de la figure 3.8d est maintenant représenté par un lobe principal de la fenêtre. Cela signifie que lorsque l'on applique la fenêtre d'observation à la séquence, la résolution de la transformée de cette dernière diminue. Dès lors, pour que l'estimation de la transformée de Fourier d'une séquence à partir d'une observation finie de celle-ci soit précise, il faut que la transformée de Fourier de la fenêtre d'observation possède un lobe principal étroit, *i.e.* sa largeur est petite.
- Il existe des lobes secondaires entre ceux principaux. Ceux-ci représentent l'oscillation causée par la fenêtre d'observation. Dès lors, la fenêtre d'observation doit posséder des lobes secondaires aussi petits que possible.

En conclusion, afin de diminuer l'effet spectral de la fenêtre d'observation sur le résultat, il faut choisir une fenêtre telle que sa transformée de Fourier a un lobe principal étroit et des lobes secondaires faibles. De nombreux modèles de fenêtre sont proposées. La figure 3.9 présente une représentation graphique des modèles de fenêtre et leur transformée de Fourier correspondante dans le cas 1D (Harris, 1978; Stoica et Moses, 2005). Dans le cas multidimensionnel, la fenêtre multidimensionnelle est définie comme étant le produit des fenêtres unidimensionnelles sur chaque axe.

- ✓ Fenêtre rectangulaire

$$w(n) = \begin{cases} 1 & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.53)$$

- ✓ Fenêtre de Bartlett ou fenêtre triangulaire.

$$w(n) = \begin{cases} 1 - \frac{|n|}{N} & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.54)$$

- ✓ Fenêtre de Hann.

$$w(n) = \begin{cases} 0,5 + 0,5 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.55)$$

- ✓ Fenêtre de Hamming.

$$w(n) = \begin{cases} 0,54 + 0,46 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.56)$$

- ✓ Fenêtre de Blackman.

$$w(n) = \begin{cases} 0,42 + 0,5 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 0,08 \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right) & \text{si } |n| \leq N \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.57)$$

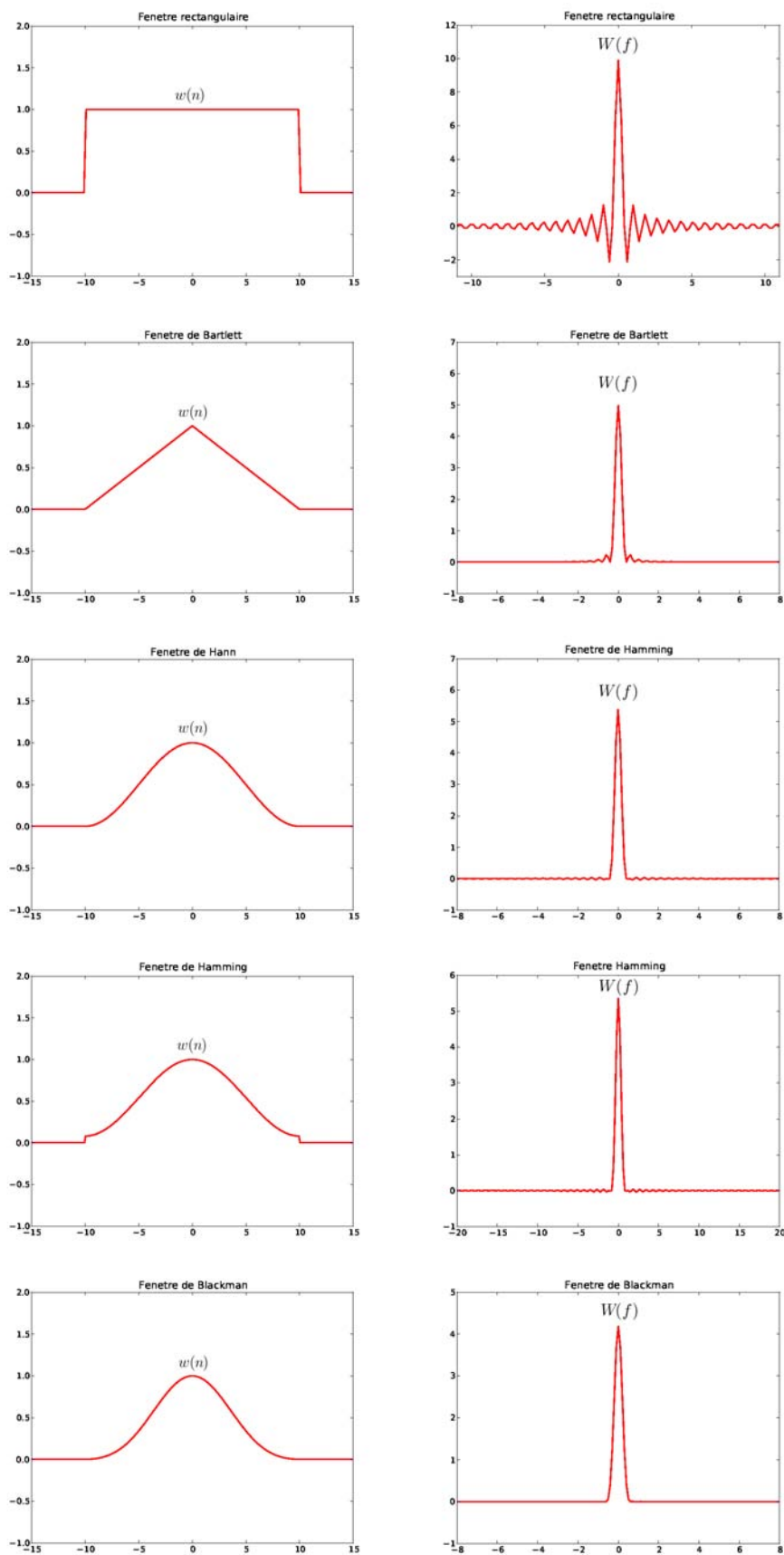


Figure 3.9 – Modèles de fenêtre et leurs transformées de Fourier correspondantes

Le choix du modèle de fenêtre doit satisfaire les deux conditions ci-dessus. Cependant, [Stoica et Moses \(2005\)](#) montre que ces deux conditions ne peuvent pas être simultanément satisfaites. Ce phénomène est observable dans le tableau 3.7. Dès lors, le choix doit équilibrer ces deux conditions en favorisant la plus importante.

Fenêtre	Largeur du lobe principal (radian)	Hauteur du lobe secondaire (dB)
Rectangulaire	$2\pi/N$	-13
Bartlett	$4\pi/N$	-25
Hann	$4\pi/N$	-31
Hamming	$4\pi/N$	-41
Blackman	$6\pi/N$	-57

Tableau 3.7 – Largeur du lobe principal et hauteur du lobe secondaire de différents modèles de fenêtre ([Stoica et Moses, 2005](#))

Pour illustrer l'influence de ces deux paramètres, considérons un autre exemple pour comparer l'influence du modèle rectangulaire et celui de Hamming comme l'indique la figure 3.10.

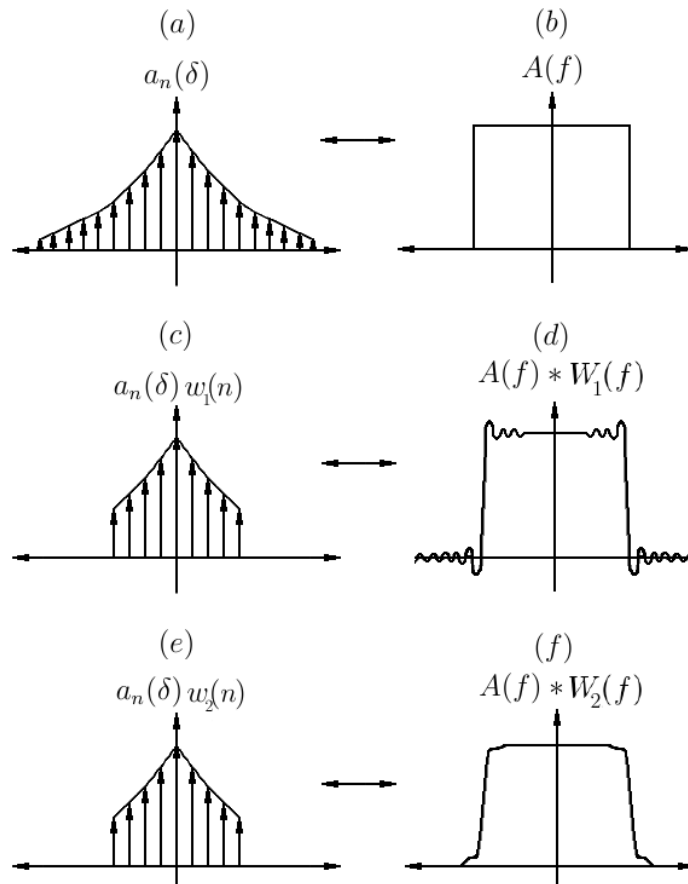


Figure 3.10 – Comparaison de l'influence du modèle rectangulaire et celui de Hamming

La transformée de Fourier d'une séquence infinie $a_n(\delta)$ (Fig. 3.10a) a la forme d'un rectangle (Fig. 3.10b). Lorsque l'on applique la fenêtre rectangulaire à cette séquence (Fig. 3.10c), le résultat est présenté sur la figure 3.10d. Celle-ci présente des oscillations importantes du résultat par rapport à la référence (Fig. 3.10b). Par contre, lorsque l'on applique la fenêtre de Hamming à cette séquence (Fig. 3.10e), le résultat (Fig. 3.10f) est bien meilleur que le précédent (Fig. 3.10d) et proche de la référence (Fig. 3.10b). Cet exemple illustre l'influence importante des lobes secondaires de la fenêtre sur le résultat, tandis que celle de la largeur du lobe principal semble faible. Dès lors, dans ce travail, nous favorisons la condition de faibles lobes secondaires dans le choix de la fenêtre. Parmi celles présentées sur la figure 3.9, nous choisissons la fenêtre de Blackman pour la suite.

3.5.4 Procédures d'estimation du périodogramme - Limitations

Dans les sections précédentes, nous avons construit un estimateur non-biaisé et consistant du périodogramme. La condition de non-biais est satisfaite par le choix de la fenêtre dans l'estimation, tandis que celle de consistance est assurée par la moyenne sur des périodogrammes indépendants. Un tel estimateur du périodogramme peut être calculé à partir de K réalisations $\{\mathcal{X}_j, j = 1, \dots, K\}$ du champ selon trois procédures suivantes :

1. *Procédure 1 :*

- Déterminer une estimation du covariogramme $\hat{C}_j(\delta)$ à partir de la réalisation \mathcal{X}_j .
- Multiplier le covariogramme empirique $\hat{C}_j(\delta)$ par une fenêtre $w(\delta)$ choisie.
- Prendre la transformée de Fourier du produit $w(\delta)\hat{C}_j(\delta)$ pour obtenir le périodogramme empirique $\hat{P}_w^j(f)$.
- Prendre la moyenne des périodogrammes empiriques $\hat{P}_w^j(f)$ pour obtenir le périodogramme moyen final $\hat{P}_w(f)$.

2. *Procédure 2 :*

- Prendre la transformée de Fourier de la réalisation \mathcal{X}_j , notée $\tilde{\mathcal{X}}_j$.
- Prendre le produit de $\tilde{\mathcal{X}}_j$ avec son vecteur conjugué pour obtenir l'estimation du périodogramme $\hat{P}^j(f)$.
- Choisir un modèle de la fenêtre $w(\delta)$ et prendre sa transformée de Fourier $W(f)$.
- Prendre le produit de convolution de $\hat{P}^j(f)$ et de $W(f)$ pour obtenir le périodogramme empirique $\hat{P}_w^j(f)$.
- Prendre la moyenne des périodogrammes empiriques $\hat{P}_w^j(f)$ pour obtenir le périodogramme moyen final $\hat{P}_w(f)$.

3. *Procédure 3 :*

- Prendre la transformée de Fourier de la réalisation \mathcal{X}_j , notée $\tilde{\mathcal{X}}_j$.

- Prendre le produit de $\tilde{\mathcal{X}}_j$ avec son vecteur conjugué pour obtenir l'estimation du périodogramme $\hat{P}^j(f)$.
- Prendre la transformée de Fourier inverse de $\hat{P}^j(f)$ pour obtenir l'estimation du covariogramme $\hat{C}_j(\delta)$.
- Multiplier le covariogramme empirique $\hat{C}_j(\delta)$ par une fenêtre $w(\delta)$ choisie.
- Prendre la transformée de Fourier du produit $w(\delta)\hat{C}_j(\delta)$ pour obtenir le périodogramme empirique $\hat{P}_w^j(f)$.
- Prendre la moyenne des périodogrammes empiriques $\hat{P}_w^j(f)$ pour obtenir le périodogramme moyen final $\hat{P}_w(f)$.

Rappelons que notre objectif est d'identifier le modèle de covariance via l'estimation du périodogramme, tandis les procédures 1 et 3 font l'inverse. Dans la procédure 2, la mise en œuvre de la convolution peut présenter des difficultés et le temps de calcul qui en découle est important. De plus, le passage par la transformée de Fourier et son inverse peut entraîner des erreurs numériques dans l'estimation. Pour contourner ces différentes difficultés, une solution a été proposée par [Welch \(1967\)](#) et est présentée dans la section suivante.

3.5.5 Méthode de moyennage du périodogramme modifié

Comme indiqué dans les sections précédentes, la taille limitée (N points) de la réalisation du champ entraîne la multiplication de l'estimation de la fonction de covariance avec une fenêtre de décalage. Cette réalisation peut être également considérée comme étant le produit d'une réalisation infinie et une fenêtre d'observation rectangulaire. On a vu que la multiplication d'une réalisation infinie du champ avec une fenêtre d'observation correspond à celle de la fonction de covariance avec une fenêtre de décalage.

En modifiant la méthode de Bartlett ([Bartlett, 1948](#)), Welch ([Welch, 1967](#)) a proposé une méthode de *périodogramme modifié moyen* pour estimer le périodogramme. Cette méthode est également présentée dans [Hearn et Metcalfe \(1995\)](#); [Stoica et Moses \(2005\)](#) et [Shumway et Stoffer \(2006\)](#). Il s'agit de multiplier *directement* la fenêtre avec la réalisation du champ avant d'estimer son périodogramme. La fenêtre peut être choisie parmi les modèles présentés dans la section 3.5.3 et n'est pas obligatoirement le modèle rectangulaire.

Considérons maintenant K réalisations $\mathcal{X}_j = \{h_j(x_n), n = 0, \dots, N-1\}$, $j = 1, \dots, K$ supposées indépendantes d'un champ aléatoire $H(x, \omega)$ sur le domaine \mathcal{D} . Pour chaque réalisation \mathcal{X}_j , nous estimons la DSP par le périodogramme modifié :

$$\hat{P}_w^j(f_m) = \frac{1}{U} \left| \sum_{n=0}^{N-1} [w(n)h_j(x_n)] e^{-i2\pi nm/2N} \right|^2 \quad (3.58)$$

où U est l'énergie spectrale de la fenêtre et est calculée par :

$$U = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |w(n)|^2 \quad (3.59)$$

Le périodogramme du processus est calculé par la moyenne de l'ensemble des périodogrammes $\{\hat{P}_w^j(f), j = 1, \dots, K\}$.

$$\hat{P}_w(f) = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^K \hat{P}_w^j(f) \quad (3.60)$$

De la même façon de la méthode de [Bartlett \(1948\)](#), cette estimation est aussi consistante. Notons que le temps de calcul de cette méthode est très faible grâce à un appel unique à l'algorithme FFT. Si nous n'avons qu'une seule longue réalisation du champ aléatoire, [Welch \(1967\)](#) propose également de diviser celle-ci en plusieurs sous-réalisations. Mais dans cette méthode, les sous-réalisations peuvent se recouvrir de 50% l'un sur l'autre.

Remarque : Comme indiqué dans la section 2.5.4 pour la méthode de simulation spectrale, pour assurer la résolution $\Delta f = \frac{1}{2|\mathcal{D}|}$, la transformée de Fourier rapide utilisée pour estimer le périodogramme empirique doit être de taille de $2N$. Dans ce cas, le vecteur \mathcal{X}_j est donc complété par les 0 pour qu'il soit de taille $2N$. Un tel périodogramme correspond à celui utilisé dans la méthode spectrale de simulation.

3.5.6 Résultats

Nous présentons ici une application de la méthode du périodogramme modifié moyen pour identifier le modèle de covariance d'un champ aléatoire gaussien, stationnaire à partir de ses réalisations simulées. Nous simulons 35 réalisations du champ avec la méthode "Circulant Embedding" sur une grille régulière de 256 points dans un domaine 1D de longueur de 200. Le périodogramme empirique est estimé par la méthode de moyennage du périodogramme modifié. Celui-ci est ensuite ajusté à un modèle théorique par l'algorithme des moindres carrés pour retrouver les paramètres de référence. Cette procédure est appliquée pour 5 types différents de fonction d'auto-corrélation du champ sous-jacent. Le tableau 3.8 présente les paramètres de référence dans la simulation et ceux identifiés par la méthode du périodogramme. Les figures 3.11 et 3.12 présentent les réalisations utilisées et les périodogrammes empiriques identifiés avec les modèles de covariance correspondants.

	Modèles	σ	l
Références		10,00	5,00
	Gaussien	10,04	5,02
	Exponentiel	10,18	4,91
Identifiés	Wave	10,20	5,10
	Triangle	10,03	4,97
	Sphérique	9,830	4,95

Tableau 3.8 – Méthode du périodogramme - Tableau des paramètres identifiés

Le tableau 3.8 montre que nous retrouvons bien les paramètres de référence avec la méthode du périodogramme. Notons que les quatre premiers modèles de covariance conduisent à des formules analytiques pour la DSP, tandis que ce n'est pas le cas pour le modèle sphérique. Cependant, la DSP peut être calculée numériquement à partir de la fonction de covariance par la transformée de Fourier discrète sans que cela influe sur le résultat de l'identification. Sur les figures 3.11 et 3.12, nous observons que le périodogramme empirique n'est pas vraiment lisse, mais il semble que 35 réalisations et 256 points soient suffisants pour l'identification des propriétés d'un champ 1D dont la fonction de covariance est l'un des modèles usuels utilisés.

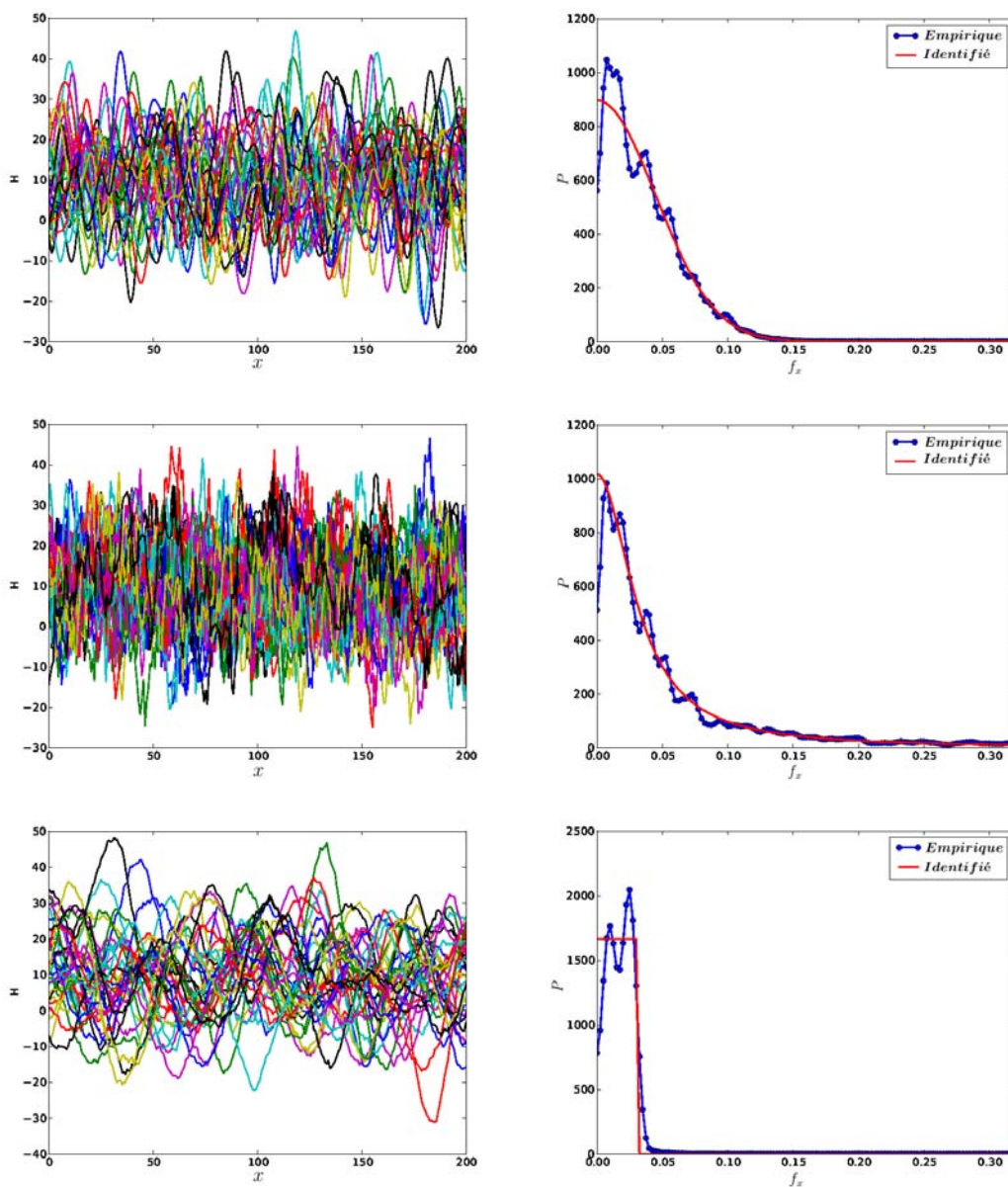


Figure 3.11 – Méthode du périodogramme - Réalisations du champ et identification du périodogramme : Modèle gaussien, exponentiel, sinus cardinal (de haut en bas)

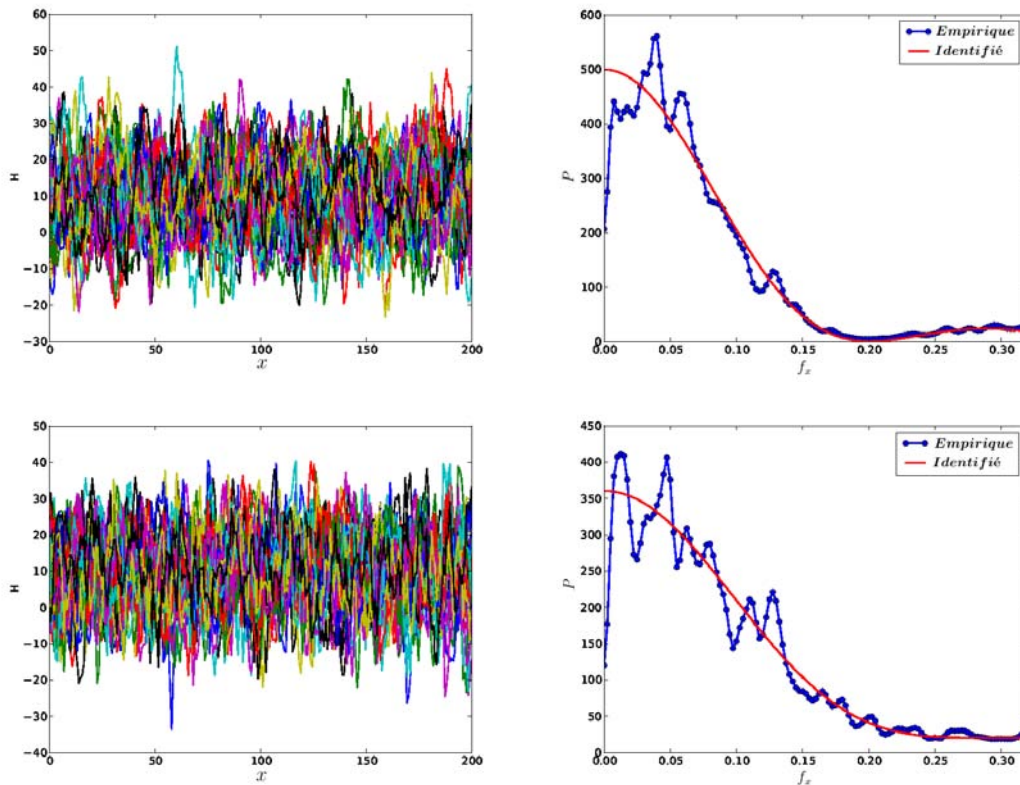


Figure 3.12 – Méthode du périodogramme - Réalisations du champ et identification du périodogramme : Modèles triangle, sphérique (de haut en bas)

3.5.7 Conclusion

Nous avons détaillé dans les sections précédentes la méthode du périodogramme pour estimer la DSP d'un champ aléatoire stationnaire et ergodique. Nous vérifions que l'estimation du périodogramme empirique est non-biaisée et consistante. Le périodogramme empirique est ensuite ajusté à un modèle théorique (Sec. 2.3.2.2) par l'algorithme des moindres carrés. Grâce à l'utilisation de l'algorithme de la transformée de Fourier rapide, le temps de calcul de cette méthode est considérablement réduit. Nous présentons également quelques applications pour valider l'approche. De nombreuses autres études paramétriques d'identification du périodogramme à partir de trajectoires simulées, non présentées dans ce mémoire, ont également été menées. Le périodogramme empirique ou celui identifié avec un modèle théorique sont compatibles à la simulation du champ par la méthode spectrale.

3.6 Validation

Cette section présente la validation des méthodes d'identification, ainsi que les méthodes de simulation. Dans les sections précédentes, nous avons présenté également la validation de chaque méthode d'identification. Dans un premier temps, nous présentons dans cette section la comparaison entre la méthode du variogramme et celle du périodogramme. La précision obtenue sur les paramètres identifiés et le temps de calcul sont les critères d'évaluation. Nous choisissons ensuite la méthode d'identification la plus adaptée pour la suite. Dans un deuxième temps, nous utilisons la méthode d'identification choisie pour valider les méthodes de simulation.

3.6.1 Comparaison des méthodes d'identification

La comparaison est réalisée sur plusieurs modèles de covariance. Les 35 réalisations du champ aléatoire gaussien sont simulées dans un domaine 1D de longueur de 200, sur une grille régulière de 256 points par la méthode "Circulant Embedding". Le tableau 3.9 présente le résultat d'identification par la méthode du variogramme et par celle du périodogramme. On ne considère pas d'effet pépité. Le champ dont on simule les réalisations est gaussien stationnaire d'écart-type $\sigma = 10$. Différents modèles de fonction d'auto-corrélation sont utilisés avec une valeur $l = 5$ de la longueur de corrélation.

	Modèle	Variogramme			Périodogramme		
		σ	l	$T(s)$	σ	l	$T(s)$
Références		10,00	5,00		10,00	5,00	
Identifiés	Gaussien	9,930	5,19	89,78	10,05	5,04	16,94
	Exponentiel	9,790	5,79	102,4	10,12	4,95	18,37
	Sinus cardinal	9,990	5,20	91,24	9,260	5,30	18,67
	Triangle	9,630	6,02	108,2	9,570	4,78	18,42
	Sphérique	10,03	6,64	95,05	9,980	5,11	18,02

Tableau 3.9 – Comparaison des méthodes d'identification - Tableau des paramètres identifiés

Notons ici que le variogramme empirique est également calculé par le moyennage des 35 variogrammes empiriques correspondant à 35 réalisations du champ aléatoire. La figure 3.13 présente un exemple de l'identification du variogramme empirique, ainsi que du périodogramme empirique pour le cas du modèle de covariance exponentiel. On observe bien que le variogramme empirique est bien lissé et que le variogramme théorique approche bien l'empirique.

Cependant, en consultant le tableau 3.9, on voit que la longueur de corrélation identifiée est assez loin de la valeur de référence. Cela montre que l'estimation du variogramme empirique n'est pas satisfaisante dans ce cas. D'autre part, le tableau 3.9 montre également que la méthode du variogramme surestime la longueur de corrélation et que les résultats de la méthode du périodogramme sont plus proches de la valeur théorique. Cependant,

en pratique dans quelques cas, le résultat de la méthode du variogramme est meilleur que celui de l'autre. Dès lors, le seul critère de précision de l'identification ne nous permet pas de comparer ces deux méthodes, puisque selon le type de fonction d'auto-corrélation l'une ou l'autre semble être la plus précise.

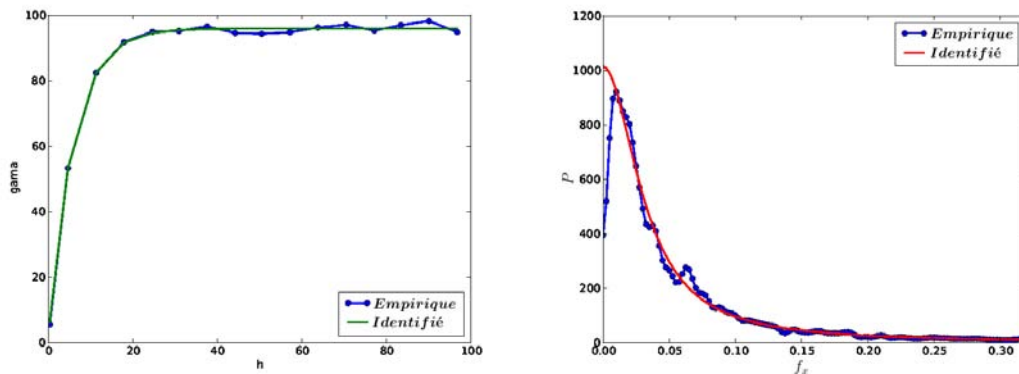


Figure 3.13 – Comparaison des méthodes d'identification- Identification du variogramme à gauche et du périodogramme à droite : Modèle exponentiel

Au niveau de temps de calcul, nous constatons que la méthode du périodogramme est plus rapide que l'autre (environ 6 fois dans ce cas), grâce à l'utilisation de l'algorithme de transformée de Fourier rapide. Notons que dans ce cas, le nombre de valeurs de chaque réalisation est seulement de 256. Si ce nombre augmente (*e.g.* dans le cas 2D), la différence sera beaucoup plus importante. Pour ces différentes raisons, la méthode du périodogramme est choisie pour la suite de notre travail.

3.6.2 Validation des méthodes de simulation

Dans cette section, on cherche à comparer les différentes méthodes de simulation du point de vue de la qualité des réalisations qu'elles produisent, vis-à-vis de l'identification par la méthode du périodogramme. Des trajectoires d'un champ aléatoire gaussien sont simulées par les différentes méthodes (Chap. 2) (*i.e.* méthode de Karhunen-Loève discrète, méthode EOLE, méthode "Circulant Embedding" et méthode spectrale), dans un domaine de taille 200 et sur une grille régulière de 256 points. Comme le champ est gaussien, la validation consiste à ré-identifier le modèle de covariance par la méthode du périodogramme, à partir de 35 réalisations obtenues par l'une ou l'autre des méthodes de simulation. Les résultats sont présentés dans le tableau 3.10.

Le tableau 3.10 montre que la méthode du périodogramme permet bien de retrouver les paramètres de référence pour toutes les méthodes de simulation. Ce résultat confirme que les réalisations du champ simulées par ces méthodes de simulation représentent bien ses propriétés statistiques et que la méthode du périodogramme ne dépend pas de la méthode de simulation. En tenant compte de la comparaison du temps de calcul des

méthodes de simulation (Sec. 2.5.5) et de la compatibilité avec la méthode d'identification du périodogramme choisie, nous choisissons la méthode de simulation spectrale pour la suite de notre travail.

	Méthodes	μ	σ	l
Références		10,00	10,00	5,00
Identifiés	Karhunen-Loève discrète	9,540	9,870	5,15
	EOLE	10,51	10,10	4,93
	Circulant Embedding	10,01	9,810	4,73
	Spectrale	9,740	9,979	5,10

Tableau 3.10 – Effet du choix de la méthode de simulation - Tableau des paramètres identifiés

3.6.3 Validation dans le cas bidimensionnel

Dans cette section, on présente un exemple de validation des méthodes de simulation et d'identification choisies (*i.e.* méthode spectrale et méthode du périodogramme) dans le cas bidimensionnel. Des réalisations d'un champ gaussien sont simulées par la méthode spectrale avec un modèle de covariance donné. Ces réalisations sont ensuite utilisées pour re-identifier le modèle de covariance du champ, *i.e.* trouver les paramètres utilisés pour la simulation des réalisations.

Le modèle de covariance est choisi parmi ceux présentés dans la section 2.2.4.3. Mais dans certains cas, une combinaison de plusieurs d'entre eux dite *modèle mixte* (*e.g.* la somme des deux modèles gaussien et exponentiel) peut être utilisé pour représenter plus précisément la covariance spatiale des champs aléatoires. De plus, en pratiquant la méthode du périodogramme empirique, on constate que dans certains cas, le pic du périodogramme empirique représentant la composante fréquentielle principale du champ se décale par rapport à l'origine ($f_x = 0$, $f_y = 0$). On introduit donc un terme dit de *fréquence principale* dans les modèles théoriques pour mieux ajuster le périodogramme empirique. Ce décalage donne à la fonction de covariance un terme cosinus additionnel représentant une oscillation amortie du covariogramme. Par exemple, on utilise ici le modèle de covariance mixte gaussien-exponentiel avec les termes de fréquence principale dans le cas bidimensionnel ci-dessous :

$$\begin{aligned}
C(x, y) = & v_1 \exp \left[- \left(\frac{h_x^2}{l_{x1}^2} + \frac{h_y^2}{l_{y1}^2} \right) \right] \cos(2\pi f_{x0}^{(1)} h_x) \cos(2\pi f_{y0}^{(1)} h_y) \\
& + v_2 \exp \left[- \left(\frac{|h_x|}{l_{x2}} + \frac{|h_y|}{l_{y2}} \right) \right] \cos(2\pi f_{x0}^{(2)} h_x) \cos(2\pi f_{y0}^{(2)} h_y)
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Le modèle de la densité spectrale de puissance (DSP) correspondante s'écrit :

$$\begin{aligned}
P(f_x, f_y) = & v_1 \pi l_{x1} l_{y1} \exp \left[\pi^2 \left(l_{x1}^2 (f_x - f_{x0}^{(1)})^2 + l_{y1}^2 (f_y - f_{y0}^{(1)})^2 \right) \right] \exp \left[\pi^2 l_{y1}^2 (f_y - f_{y0}^{(1)})^2 \right] \\
& + v_2 \frac{2l_{x2}}{1 + 4\pi^2 l_{x2}^2 (f_x - f_{x2}^{(2)})^2} \frac{2l_{y2}}{1 + 4\pi^2 l_{y2}^2 (f_y - f_{y2}^{(2)})^2}
\end{aligned} \tag{3.62}$$

On simule 35 réalisations du champ avec ce modèle de covariance gaussien-exponentiel, dans un domaine de taille 10000×10000 , sur une grille régulière de 256×256 points. Les paramètres utilisés et ceux identifiés sont présentés dans le tableau 3.11. La figure 3.14 présente la fonction de covariance et la DSP correspondante de ce modèle. La figure 3.15 présente le périodogramme empirique et sa projection sur le plan.

Composante	gaussien						exponentiel				
	μ	σ_1	l_{x1}	l_{y1}	$f_{x0}^{(1)}$	$f_{y0}^{(1)}$	σ_2	l_{x2}	l_{y2}	$f_{x0}^{(2)}$	$f_{y0}^{(2)}$
Références	700	50	180	140	0,002	0	90	70	50	0,005	0
Identifiés	700	51	179	137	0,002	0	91	69	48	0,005	0
Erreur (%)	0,0	2,0	0,6	2,1	0,0	0	1,1	1,4	4,0	0,0	0

Tableau 3.11 – Validation des méthode de simulation et d’identification dans le cas 2D - Tableau des paramètres de référence et identifiés

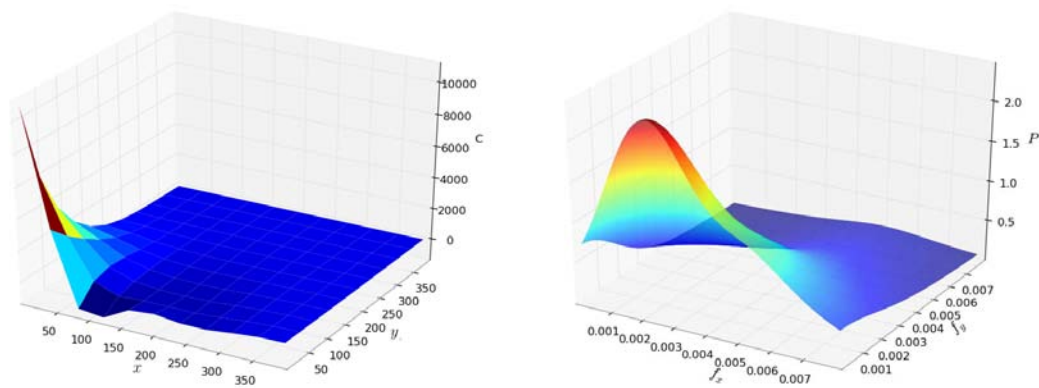


Figure 3.14 – Validation des méthode de simulation et d’identification dans le cas 2D - Modèle de covariance “gaussien-exponentiel” à gauche et périodogramme correspondant à droite

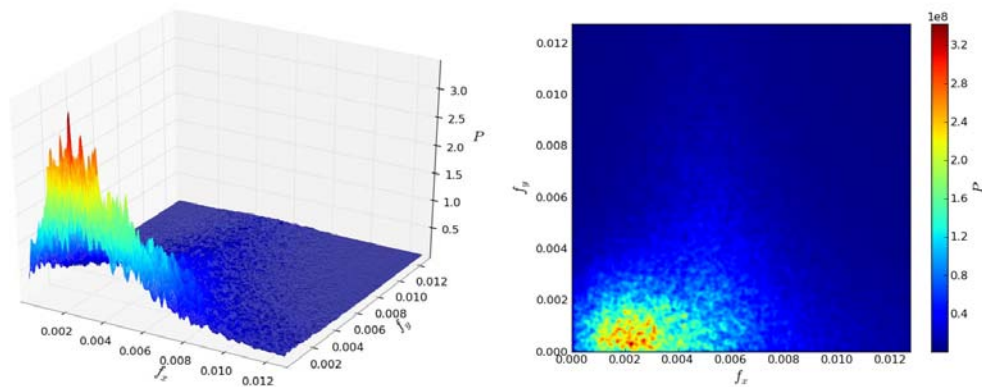


Figure 3.15 – Validation des méthode de simulation et d’identification dans le cas 2D - Périodogramme empirique à gauche et sa projection sur le plan à droite

On observe sur la figure 3.14 que suivant la direction X , il existe une oscillation du covariogramme. Celle-ci est représentée par les termes $f_{x0}^{(1)}$ et $f_{x0}^{(2)}$ du modèle théorique de covariance. Ce phénomène n'est pas observé dans la direction Y , suivant laquelle les termes $f_{y0}^{(1)}$ et $f_{y0}^{(2)}$ sont nulles. La figure 3.15 montre le décalage correspondant du périodogramme empirique. On observe que le pic se situe à la position $f_x = 0,002$ et $f_y = 0$, correspond aux termes $f_{x0}^{(1)}$ et $f_{y0}^{(1)}$ de la composante gaussienne du modèle théorique.

Le tableau 3.11 montre un bon accord entre les paramètres de référence et ceux identifiés. L'erreur maximale des paramètres identifiés par rapport à la référence est de 4%. De plus, les figures 3.14 et 3.15 montrent également l'accord entre le périodogramme empirique et celui théorique. Ce résultat confirme la validation des méthodes de simulation spectrale et d'identification du périodogramme dans le cas 2D, ainsi que la compatibilité entre eux. En conclusion, ces méthodes sont choisies pour l'identification des champs de contraintes dans la suite.

3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté trois méthodes d'identification du modèle de covariance d'un champ aléatoire gaussien, stationnaire et ergodique. Tandis que la méthode du variogramme et celle du périodogramme sont applicables pour la suite de notre travail, nous avons montré que ce n'est pas le cas pour la méthode de maximum de vraisemblance.

Une comparaison entre les deux méthodes (variogramme et périodogramme) dans le cas unidimensionnel a été réalisée sur les deux critères : la précision des paramètres identifiés et le temps de calcul. Le premier critère ne nous donne pas de conclusion claire. Cependant, la différence importante de temps de calcul nous amène à choisir la méthode du périodogramme pour la suite. En appliquant cette méthode d'identification, nous avons également validé les méthodes de simulation présentées au chapitre précédent.

Les méthodes de simulation et d'identification choisies (*i.e.* méthode spectrale et méthode du périodogramme) ont également été validées dans le cas bidimensionnel. On a introduit dans cette étude les notions du *modèle mixte* et de la *fréquence initiale* du modèle théorique de covariance. Cela servira pour l'identification des champs de contraintes dans le chapitre suivant.

En conclusion, jusqu'ici nous avons choisi les outils pour identifier et pour simuler des champs aléatoires gaussiens. Ces outils seront utilisés dans le chapitre suivant pour modéliser le champ de contraintes, résultant d'une modélisation micromécanique du matériau par agrégats polycristallins, par un modèle de champ aléatoire gaussien. Les réalisations d'un tel champ de contraintes (champ aléatoire) proviennent dans ce cas de la variabilité de la microstructure du matériau et les différentes réalisations servant à l'identification correspondent chacune à un calcul aux éléments finis particulier.

Calcul éléments finis - Identification des champs de contraintes

Sommaire

4.1	Introduction	129
4.2	Calcul d'agrégats polycristallins	129
4.2.1	Modélisation d'agrégats	129
4.2.2	Choix des paramètres de l'acier 16MND5	132
4.2.3	Volume élémentaire représentatif	133
4.2.4	Maillage et conditions aux limites	134
4.2.5	Mise en œuvre des calculs - Cas d'étude	135
4.2.6	Résultats des calculs	135
4.2.7	Projection des champs de contraintes	143
4.3	Procédure d'identification	145
4.3.1	Introduction	145
4.3.2	Vérification du caractère gaussien	146
4.3.3	Vérification de la stationnarité	146
4.3.4	Ajustement du périodogramme empirique à un niveau de chargement	147
4.3.5	Influence du nombre de réalisations du champ de contraintes	148
4.3.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	149
4.3.7	Ajustement du périodogramme empirique à tous les niveaux de chargement	149
4.3.8	Conclusion	149
4.4	Identification du champ de contraintes principales maximales	150
4.4.1	Introduction	150
4.4.2	Vérification du caractère gaussien	150
4.4.3	Vérification de la stationnarité	151
4.4.4	Identification à un niveau de chargement	153
4.4.5	Influence du nombre de réalisations	160
4.4.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	162
4.4.7	Identification à tous les niveaux de chargement	164
4.4.8	Conclusion	166
4.5	Identification du champ de contraintes de clivage	167
4.5.1	Introduction	167
4.5.2	Vérification du caractère gaussien	167

4.5.3	Vérification de la stationnarité	168
4.5.4	Identification à un niveau de chargement	170
4.5.5	Influence du nombre de réalisation	176
4.5.6	Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille	177
4.5.7	Identification à tous les niveaux de chargement	180
4.5.8	Conclusion	182
4.6	Comparaison des résultats d'identification	183
4.6.1	Introduction	183
4.6.2	Comparaison des deux champs	183
4.6.3	Conclusion	184
4.7	Simulation du champ de contraintes	184
4.7.1	Introduction	184
4.7.2	Simulation par le périodogramme empirique et théorique	185
4.7.3	Comparaison des courbes de distribution des contraintes	186
4.7.4	Conclusion	189
4.8	Conclusion	189
4.9	Perspectives	189

4.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons présenté la modélisation micromécanique du matériau, ainsi que les méthodes de simulation et d'identification des champs aléatoires gaussiens. Ce chapitre est consacré à la présentation de l'application de celles-ci à notre travail. Nous présentons tout d'abord la mise en œuvre de la modélisation micromécanique d'agrégats polycristallins par calcul aux éléments finis. La procédure d'identification est présentée sur des modélisations dans lesquelles on considère que la géométrie de l'agrégat peut être aléatoire ou non. Les orientations cristallographiques dans les grains sont tirées aléatoirement selon une loi uniforme. Ensuite, dans les deux sections suivantes, nous présentons respectivement les identifications du champ de *contraintes principales maximales* (σ_I) et du champ de *contraintes de clivage* (σ_{cliv}). Puis, une comparaison des résultats d'identification pour les deux cas de géométrie et du champ de contraintes est présentée dans la cinquième section. Enfin, la sixième section présente la simulation de champs de contraintes en utilisant les résultats d'identification et l'évaluation des réalisations simulées.

4.2 Calcul d'agrégats polycristallins

4.2.1 Modélisation d'agrégats

La modélisation de la microstructure se compose généralement de trois étapes principales. La première concerne la construction de la structure de grains (structure d'agrégats). La deuxième consiste à modéliser les orientations cristallographiques dans les grains de l'agrégat. Enfin, la troisième a pour but de prendre en compte l'effet des précipités dans la modélisation. Comme les précipités ne sont pas pris en compte dans notre travail, nous ne présentons dans ce qui suit que les deux premières étapes.

4.2.1.1 Construction de la structure d'agrégats

Pour ce qui est la base de caractérisation et de reproduction des microstructures du matériau, on peut se reporter à [Jeulin et Ostoja-Starzewski \(2001\)](#). On présente ici certaines approches communes souvent utilisées dans la littérature pour construire la structure d'agrégat.

- Utilisation d'une géométrie simplifiée : les grains sont représentés sous forme d'éléments ou d'assemblage d'éléments de formes carrées ou hexagonales.
- Utilisation d'observations expérimentales de la microstructure : les grains, les paquets de lattes et les orientations cristallographiques sont déduites des résultats expérimentaux.
- Utilisation de modèles mathématiques, *e.g.* diagrammes de Voronoï.

La figure 4.1 présente les agrégats générés par ces trois approches.

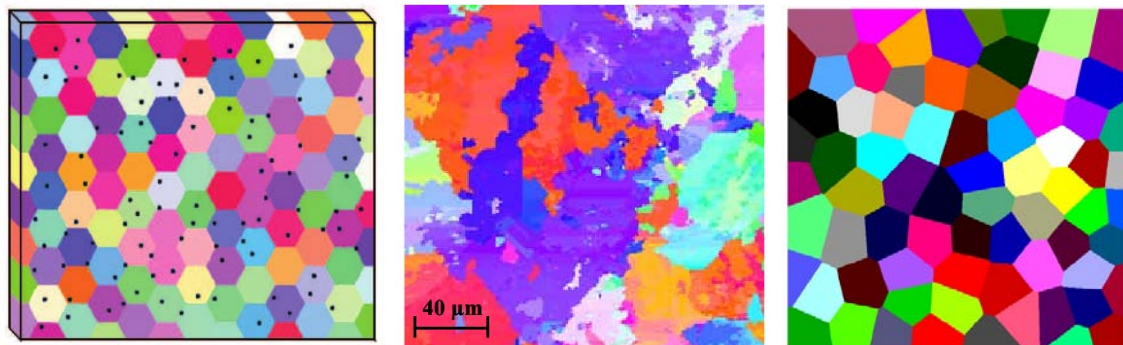


Figure 4.1 – Calcul d’agrégats polycristallins - Modélisation de structure d’agrégat de gauche à droite : géométrie simplifiée (Rezaee, 2011), observation expérimentale (Libert, 2007) et diagramme de Voronoi (Osipov, 2007)

La première approche est utilisée dans plusieurs travaux. Barbe et al. (2001) et Mathieu et al. (2010) créent ab initio un maillage d’éléments carrés. Ensuite, ils associent à chaque élément le numéro de grains auquel il appartient. Dès lors, les grains sont représentés sous forme d’assemblage d’éléments carrés. De son côté, Rezaee (2011) modélise la microstructure avec des grains hexagonaux. L’avantage de cette approche est la génération simplifiée du maillage. Le nombre d’éléments ne dépend pas de la microstructure. Cette approche, comme le montre Barbe et al. (2001) est satisfaisante pour l’identification de la loi de comportement globale de l’agrégat. Mais elle présente des faiblesses dans la prédiction de l’hétérogénéité intra-granulaire.

Libert (2007); Libert et al. (2011) utilisent dans leurs travaux les observations EBSD pour modéliser la microstructure de l’acier 16MND5. Cette approche nécessite un logiciel de traitement des images d’observation pour récupérer les coordonnées des points, ainsi que les orientations cristallographiques. La modélisation est proche la réalité. Mais des difficultés apparaissent dans la modélisation 3D et dans le cas où l’on veut générer un certain nombre de microstructures aléatoires.

Osipov (2007) utilise dans son travail la troisième approche en se référant à des observations expérimentales. Il utilise la méthode d’analyse de la microstructure par la covariance (Jeulin et Ostojca-Starzewski, 2001) pour calculer des caractéristiques de la morphologie de l’agrégat simulé. L’agrégat final est créé en s’accordant à la référence par un algorithme itératif. Cette méthode présente une certaine facilité de mise en œuvre grâce à l’utilisation des outils numériques disponibles sans perdre les caractéristiques de la microstructure observée.

Kouchmeshky et Zabararas (2010); Li et al. (2010) dans leurs travaux récents, proposent une technique de réduction de dimension pour construire la microstructure aléatoire d’agrégats polycristallins. Il s’agit de reconstruire la microstructure du matériau à partir d’un tirage de la distribution des tailles de grains et d’un tirage des orientations cristallographiques. La taille des grains est tirée selon la densité de probabilité estimée à partir des observations expérimentales, tandis que les orientations cristallographiques sont modélisées par un développement en série de Karhunen-Loève. Cette méthode présente

l'avantage de bien représenter les propriétés statistiques observées de la microstructure du matériau. Cependant, la mise en œuvre de celle-ci est difficile à cause de l'utilisation d'outils mathématiques complexe pour la réduction de dimension.

Dans notre travail, l'objectif est de modéliser le comportement local du matériau pour mettre en œuvre l'Approche Locale de la rupture. Dès lors, l'utilisation d'un agrégat simplifié n'est pas convenable. D'autre part, l'utilisation directe des observations expérimentales ne nous permet de créer qu'un seul agrégat pour chaque observation, tandis que nous voudrions modéliser la variabilité de la microstructure, *i.e.* au moins une trentaine d'agrégats différents. Aussi dans ce travail, le modèle de polyèdre de Voronoï (Gilbert, 1962) est utilisé pour la construction des agrégats avec l'aide de l'algorithme Quickhull (Bradford Barber et al., 1996).

Il est clair que l'agrégat simulé doit bien représenter les caractéristiques observées de la microstructure du matériau et qu'un algorithme itératif comme celui présenté dans Osipov (2007) est nécessaire pour chaque simulation de l'agrégat. Dans le cas où l'on considère l'agrégat simulé comme étant représentatif d'un échantillon observé de matériau, un tel algorithme semble indispensable. Cependant dans notre cas, la microstructure est considérée comme aléatoire. La construction des agrégats avec une seule observation expérimentale serait arbitraire. Un certain nombre d'observations expérimentales de la microstructure serait alors nécessaire pour estimer ses propriétés statistiques représentatives, ce qui serait très coûteux.

Dès lors, dans ce travail, nous supposons que l'agrégat du matériau est complètement aléatoire. Nous générons tout d'abord une distribution aléatoire de centres des grains. Ensuite l'agrégat est simulé par l'algorithme Quickhull en prenant les centres des grains comme étant les données. Aucune contrainte n'intervient dans cette simulation. Les agrégats sont évalués via les observations du comportement (*i.e.* relation contrainte-déformation) moyen déterminé pour tout l'éprouvette et pour chaque grain. Les agrégats dont le comportement est fortement différent par rapport aux autres sont éliminés de l'analyse. La figure 4.2 présente un agrégat de 100 grains en 2D.

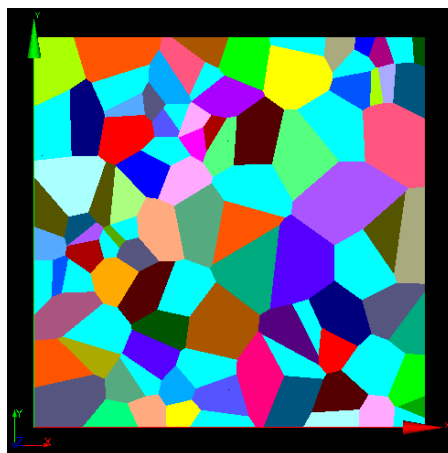


Figure 4.2 – Calcul d'agrégats polycristallins - Modélisation de structure d'agrégat de l'acier 16MND5 en 2D (taille : 1000×1000 , nombre de grains : 100)

4.2.1.2 Orientations cristallographiques

Les orientations cristallographiques sont considérées constantes dans chaque grain et varient aléatoirement d'un grain à l'autre. Dans la modélisation numérique, celles-ci sont représentées par les angles d'Euler $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ (Fig. 4.3) constituant une texture isotrope. Afin d'être isotrope, les angles d'Euler sont tirés selon des lois uniformes avec les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned}\varphi_1 &\sim \mathcal{U}(0, 360) \\ \varphi_2 &\sim \mathcal{U}(0, 360) \\ \cos \Phi &\sim \mathcal{U}(-1, 1)\end{aligned}\tag{4.1}$$

Ces angles sont assignés à chaque point d'intégration du grain correspondant. Sur la figure 4.2, les différentes couleurs des grains représentent leurs différentes orientations cristallographiques.

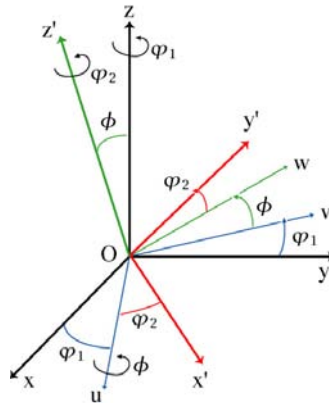


Figure 4.3 – Calcul d'agrégats polycristallins - Angles d'Euler

4.2.2 Choix des paramètres de l'acier 16MND5

Les paramètres du matériau sont pris dans la littérature (Pesci, 2004; Diard, 2005) et sont supposés déterministes. Le comportement élastique cubique est représenté par trois coefficients C_{11} , C_{12} , C_{44} . Le comportement viscoplastique est représenté par deux coefficients K , n . Mais nous rappelons que cette formule du comportement viscoplastique n'a aucun sens physique de viscosité. Elle n'est utilisée que pour le choix automatique des systèmes de glissement actifs au cours de la déformation plastique du matériau. L'érouissage cinématique est négligé en choisissant les coefficients nuls. L'érouissage isotrope du matériau est représenté par les coefficients τ_{c0} , Q , b , h_1 , h_2 , h_3 , h_4 . Pour ce qui est du sens physique des paramètres, le lecteur peut se référer à la section 1.5.3. Les paramètres de la loi de comportement de l'acier 16MND5 sont résumés dans le tableau 4.1.

Élasticité cubique			Viscoplasticité			Écrouissage isotrope					
C_{11}	C_{12}	C_{44}	K	n	τ_{c0}	Q	b	h_1	h_2	h_3	h_4
(GPa)	(GPa)	(GPa)	(MPa.s ^{1/n})		(MPa)	(MPa)					
237,4	134,7	116,4	15	12	173	60	10	1	1	1	1

Tableau 4.1 – Calcul d'agrégats polycristallins - Paramètres de l'acier 16MND5 (Pesci, 2004; Diard, 2005)

4.2.3 Volume élémentaire représentatif

Le choix du Volume Élémentaire Représentatif (VER) doit toujours être fait avec précaution lorsque l'on réalise une modélisation micromécanique du matériau. L'objectif est de choisir un VER suffisamment grand pour qu'il soit représentatif du matériau, *i.e.* il comprend toutes les hétérogénéités possibles du matériau; mais aussi suffisamment petit pour qu'il soit considéré comme un volume élémentaire en mécanique des milieux continus. Par conséquent, le comportement d'un tel VER doit être indépendant du type de conditions aux limites (Sab, 1992).

Barbe (2000) montre dans ses travaux de thèse que pour un matériau polycristallin, le VER (en 3D) doit se composer d'au moins de 200 grains. En se référant aux conclusions de Barbe, Mathieu (2006) propose un VER de 1000 grains pour l'identification de la loi de comportement de l'acier 16MND5 et un autre VER de 200 grains (en 3D) pour les études sur l'hétérogénéité locale des champs. Osipov (2007) montre dans ses travaux de thèse que l'utilisation des éléments carrés comme dans Barbe (2000); Mathieu (2006) ne représente pas bien l'hétérogénéité locale des champs aux joints de grains. Il prend un VER contenant seulement 50 grains, mais tient compte de la structure bainitique, *i.e.* 245 paquets de lattes. De son côté, Diard et al. (2002) choisissent un VER de 100 grains (en 2D et 3D) dans leur étude sur l'hétérogénéité intergranulaire et intragranulaire des champs de contraintes et de déformations du matériau polycristallin Zy-4. Notons que dans ces travaux, le VER est estimé avec une seule microstructure représentative du matériau.

En analysant la covariance de la microstructure du matériau, Jeulin et Ostoja-Starzewski (2001) introduisent la notion de *portée intégrale* définissant un domaine statistiquement représentatif du matériau, *i.e.* VER. Cette nouvelle définition donne au VER une plus petite taille que l'ancienne. Suite à cette idée, Kanit et al. (2003) et Pelissou et al. (2009) montrent que lorsque l'on a un certain nombre de réalisations de la microstructure, la taille du VER peut être réduite sans perdre de précision dans l'estimation des propriétés effectives du matériau. Les auteurs construisent une relation entre la taille du VER, le nombre de réalisations et la précision de l'estimation pour les matériaux composites, quasi-fragiles dans le cas non-linéaire. Pelissou et al. (2009) concluent que la taille du VER d'un matériau composite quasi-fragile dans le cas non-linéaire est de 8 à 10 fois celle du cas linéaire.

Par ailleurs, Nygard (2003) étudie le nombre de grains nécessaire du VER des matériaux de structure cubique symétrique pour l'estimation des propriétés élastiques. Il prend 20 réalisations pour chaque éprouvette de 5 à 500 grains (en 2D et 3D). Il arrive à construire

une relation entre le nombre de grains et l'erreur de l'estimation.

$$N_g = \frac{k}{\epsilon^2}(A - 1) \quad (4.2)$$

où N_g est le nombre de grains, ϵ est l'erreur de l'estimation souhaité, k est une constante dépendant de la dimension (2D ou 3D) et du type de chargement et est présenté dans le tableau 4.2, A est l'indice anisotrope du matériau définie par :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (4.3)$$

Chargement	k_{3D}	k_{2D}
Biaxiale	0,025	0,007
Uniaxiale	0,003	0,026
Cisaillement	0,053	0,032

Tableau 4.2 – Calcul d'agrégats polycristallins - Constante k pour différents types de chargement dans les cas 2D et 3D (Nygards, 2003)

Dans notre travail, le matériau (acier 16MND5 de structure cristalline BCC) est considéré comme quasi-fragile après avoir été irradié. Dès lors, nous essayons de prendre en compte les résultats ci-dessus pour déterminer le VER. Avec une modélisation en 2D, pour des conditions aux limites en traction uniaxiale (Sec. 4.2.5) et une erreur $\epsilon = 0,05$, nous obtenons : $A = 2,27$, $N_g \approx 13$ pour le cas linéaire et $N_g = 104$ pour le cas non-linéaire.

En se basant sur ces études bibliographiques et en tenant compte du temps de calcul, nous prenons finalement dans ce travail un VER de 100 grains (Fig. 4.1). Pour l'instant, les dimensions correspondantes du VER sont supposées de 1000×1000 sans unité. Nous montrons dans la suite que cette taille du VER est raisonnable.

4.2.4 Maillage et conditions aux limites

Le maillage est généré par l'algorithme BLSURF (Laug et Borouchaki, 1999) du logiciel Salome (<http://www.salome-platform.org>). Les éléments sont choisis de type triangle quadratique avec 6 nœuds et 3 points d'intégration. Le maillage comprend 5548 éléments, 11295 nœuds et donc 33885 degrés de liberté. Ces trois derniers paramètres peuvent être changés avec la géométrie aléatoire, mais dans notre travail, ils sont choisis de ne pas être significativement différents.

Pour les conditions aux limites, nous nous limitons dans le cadre de ce travail à l'essai de traction simple comme l'indique la figure 4.4. La surface inférieure est bloquée suivant la direction Y . L'origine O est bloquée suivant deux directions X et Y . Sur la surface supérieure, nous appliquons un déplacement homogène suivant la direction Y jusqu'à la déformation macroscopique de 3,5%. Le calcul aux éléments finis est réalisé avec 41 niveaux de déformation dont chacun est repéré par un pseudo-instant. Le maillage et le schéma des conditions aux limites sont présentés sur la figure 4.4.

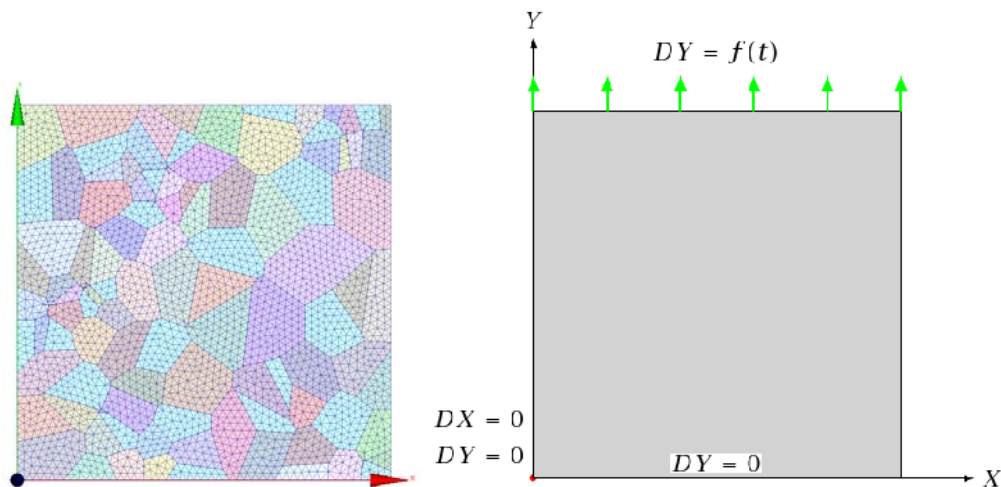


Figure 4.4 – Calcul d'agrégats polycristallins - Maillage à gauche et schéma des conditions aux limites à droite

4.2.5 Mise en œuvre des calculs - Cas d'étude

Les calculs aux éléments finis sont mis en œuvre à l'aide du code aux éléments finis Code-Aster, version 10.7.0 (<http://www.code-aster.org>). Le VER comprend 100 grains et il est de taille 1000×1000 . L'essai est réalisé en traction uniaxiale, en déformation plane. On étudie dans ce travail deux types de géométrie des éprouvettes :

- *Géométrie fixe* (GF) : Une même structure de grains est utilisée pour tous les calculs. L'ensemble des orientations cristallographiques est différent d'un calcul à l'autre.
- *Géométrie aléatoire* (GA) : Une structure de grains aléatoire est utilisée pour chaque calcul. L'ensemble des orientations cristallographiques est également différent d'un calcul à l'autre.

Pour chacun des cas, 40 calculs sont réalisés. Les champs de contraintes résultant de ces calculs sont les données du problème d'identification présenté dans les sections 4.3 et 4.4 suivantes. Dans ce qui suit, ces deux cas sont appelés *cas GF* et *cas GA*.

4.2.6 Résultats des calculs

Dans cette section, nous présentons dans un premier temps les cartographies des champs de déplacements, de déformations et de contraintes dans l'agrégat. Ensuite, les observations multi-échelles du comportement polycristallin sont présentées pour montrer l'hétérogénéité à différentes échelles du matériau. Ces observations sont réalisées sur le résultat d'un seul calcul. Dans un deuxième temps, nous analysons les résultats des 40 calculs pour chacun des cas GF et GA afin de filtrer les données pour l'identification.

4.2.6.1 Cartographies des champs dans l'agrégat

La figure 4.5 présente les cartographies des champs de déplacements DY (déplacement dans le sens de la traction) et DX (déplacement dans le sens transverse) sur la géométrie déformée, ainsi que les champs de déformations ε_{yy} et ε_{xx} à 3,5% de déformation macroscopique (pseudo-instant N°20 dans le trajet de chargement).

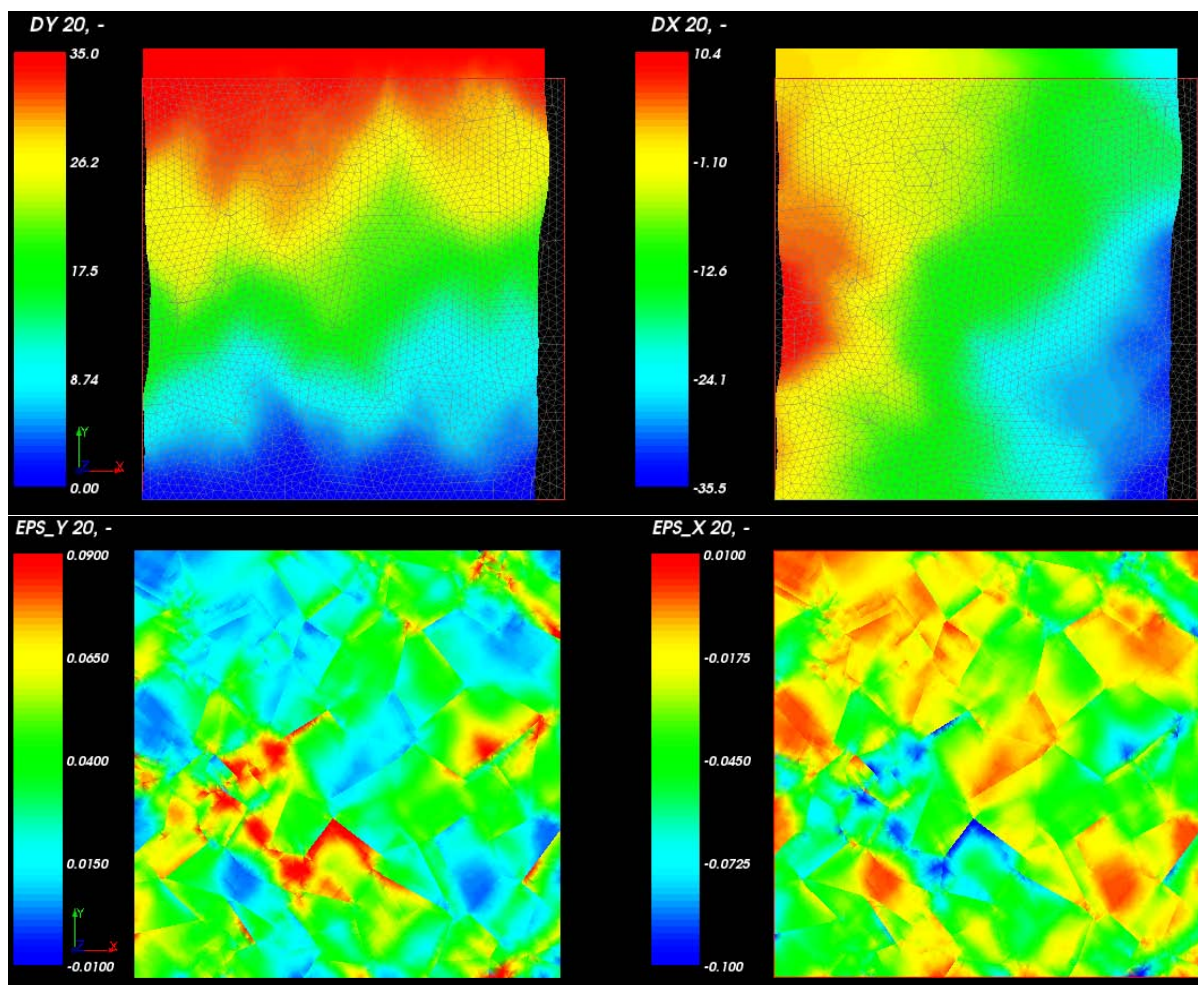


Figure 4.5 – Calcul d'agrégats polycristallins - Cartographies des champs de déplacements DY (en haut à gauche), DX (en haut à droite) et de déformations ε_{yy} (en bas à gauche), ε_{xx} (en bas à droite), au niveau de déformation macroscopique de 3,5%

Nous observons bien que comme la taille de l'éprouvette est de 1000×1000 , le niveau de déplacement suivant la direction Y est de 35 correspondant au niveau de déformation macroscopique de 3,5%. De plus, comme l'origine O est fixée, le déplacement DX du côté gauche est plus faible que celui du côté droit. Cette forme déformée de l'éprouvette correspond bien aux conditions aux limites présentées à la section 4.2.4.

Cette figure montre également l'hétérogénéité des champs de déformations. Malgré la déformation macroscopique de 3,5%, il existe des zones rouges du champ ε_{yy} de l'ordre de 9%, ainsi que des zones bleues de l'ordre de -1% . Le champ ε_{xx} présente les mêmes phénomènes que le champ ε_{yy} . Cette hétérogénéité des champs de déformations est due aux différentes orientations cristallographiques des grains.

Nous présentons sur la figure 4.6, les cartographies des champs de contraintes σ_{yy} et σ_{xx} . Cette figure montre également que les champs de contraintes ne sont pas homogènes. Nous observons bien les traits de joints de grains où la couleur change brusquement. Ce changement est dû aux différentes orientations cristallographiques des grains et représente l'hétérogénéité du champ. Nous observons également que les zones de fortes contraintes ne sont pas nécessairement celles de fortes déformations. Cela signifie que si les orientations cristallographiques favorisent la déformation plastique, le matériau peut se déformer dès un faible niveau de contrainte.

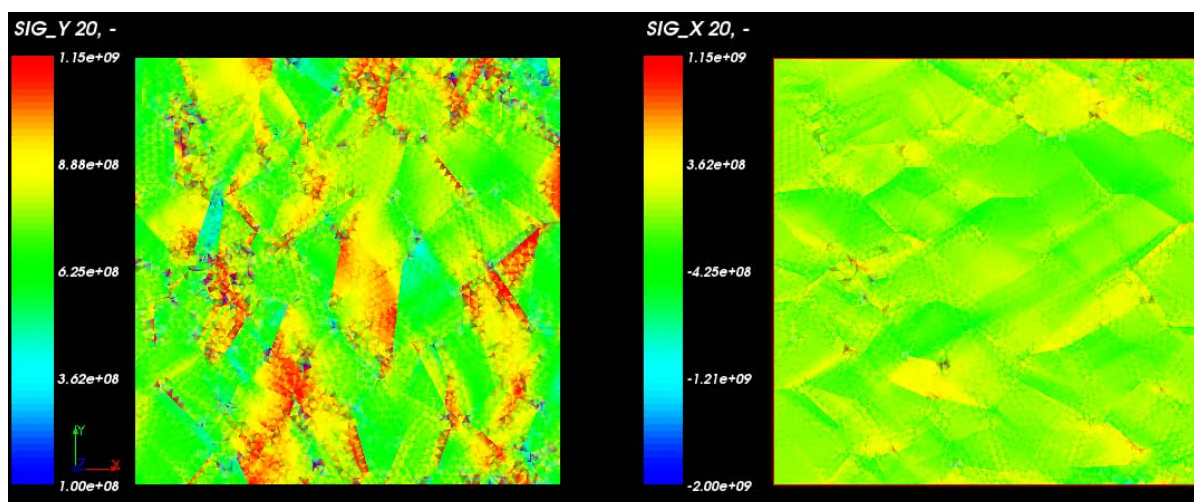


Figure 4.6 – Calcul d'agrégats polycristallins - Cartographies des champs de contraintes σ_{yy} suivant la direction Y (à gauche) et σ_{xx} suivant la direction X (à droite) au niveau de déformation macroscopique de 3,5%

Nous observons sur la figure 4.8, les champs de déformation ε_{yy} et de contraintes σ_{yy} dans les grains N°51, N°44, N°54 dont les positions sont indiquées sur la figure 4.7. Cette figure montre également que même dans un grain, les champs de déformations et de contraintes ne sont pas homogènes. Malgré les orientations cristallographiques homogènes dans chaque grain, l'interaction entre les grains entraîne l'hétérogénéité des champs dans les grains. Ce phénomène sera retrouvé à la section suivante par les observations multi-échelles du comportement polycristallin.

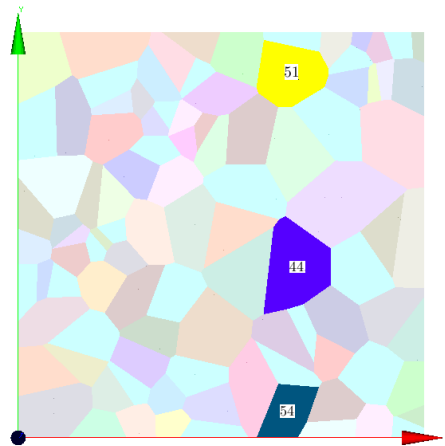


Figure 4.7 – Calcul d'agrégats polycristallins - Positions des grains $N^{\circ}51$, $N^{\circ}44$, $N^{\circ}54$ dans l'agrégat

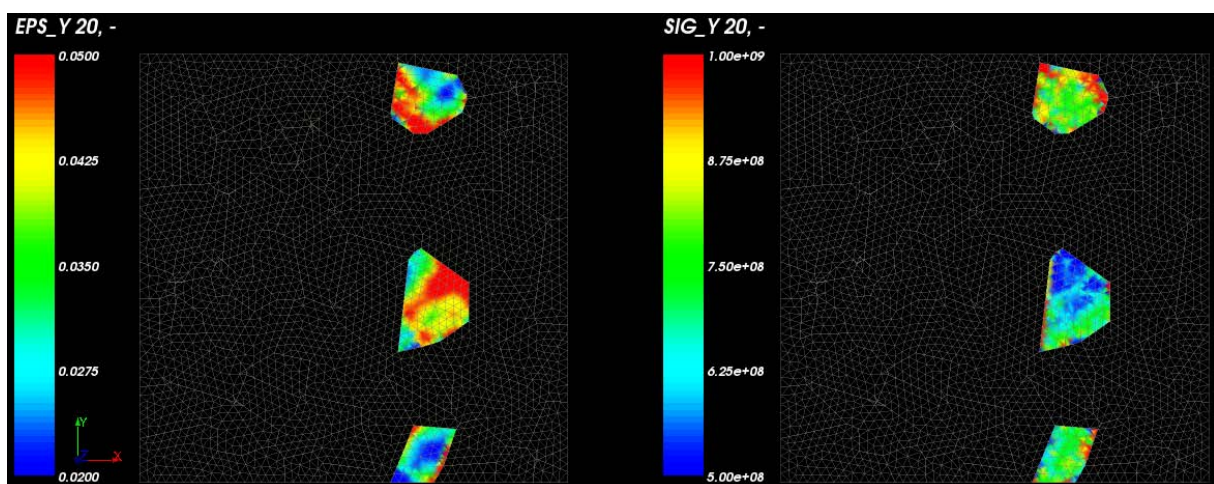


Figure 4.8 – Calcul d'agrégats polycristallins - Cartographies des champs de déformation ε_{yy} suivant la direction Y (à gauche) et de contraintes σ_{yy} suivant les directions Y (à droite) dans les grains $N^{\circ}51$, $N^{\circ}44$, $N^{\circ}54$ au niveau de déformation macroscopique de 3,5%

4.2.6.2 Observations multi-échelles du comportement polycristallin

Pour analyser les observations, nous définissons le tenseur de contraintes moyennes $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$ et le tenseur de déformations moyennes $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ calculé dans un volume V par :

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma} dV \quad (4.4)$$

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\varepsilon} dV \quad (4.5)$$

A l'échelle macroscopique, le comportement moyen du matériau est représenté par la relation entre la déformation moyenne $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$, notée \mathbf{E} et la contrainte moyenne $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$, notée $\boldsymbol{\Sigma}$, déterminées sur tout agrégat V , *i.e.* la courbe $(\mathbf{E}, \boldsymbol{\Sigma})$. La figure 4.9 présente les comportements moyens macroscopiques suivant deux directions X et Y . Nous observons bien que la contrainte moyenne Σ_{xx} suivant la direction X est nulle. Cela correspond aux conditions aux limites de traction uniaxiale utilisées.

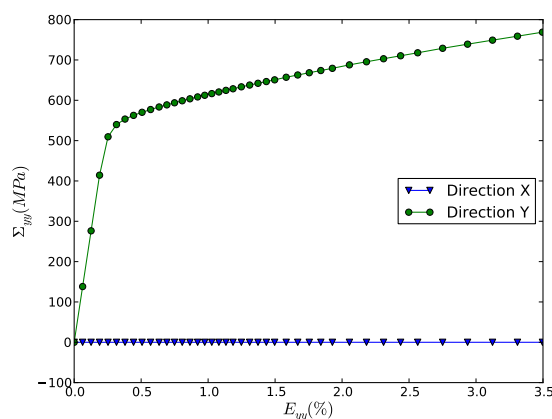


Figure 4.9 – Calcul d'agrégats polycristallins - Comportement moyen sur l'agrégat suivant deux directions X et Y : (E_{yy}, Σ_{xx}) et (E_{yy}, Σ_{yy})

A l'échelle mésoscopique, *i.e.* au niveau des grains, le comportement moyen est représenté par la relation entre la déformation moyenne $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ et la contrainte moyenne $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$, déterminées sur chaque grain, *i.e.* la courbe $(\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle, \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle)$. La figure 4.10 présente le comportement moyen de chaque grain de l'agrégat.

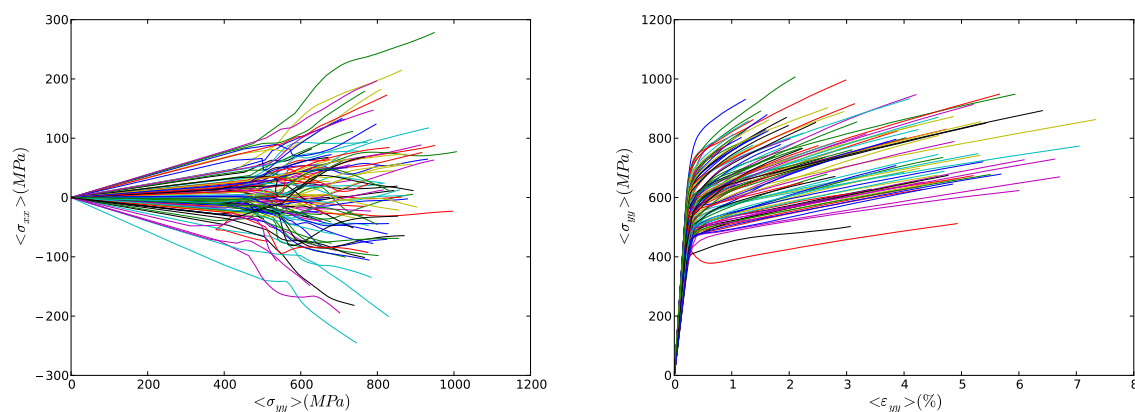


Figure 4.10 – Calcul d'agrégats polycristallins - Comportement moyen de chaque grain suivant la directions X à gauche et suivant la direction Y à droite : $(\langle \sigma_{yy} \rangle, \langle \sigma_{xx} \rangle)$ et $(\langle \varepsilon_{yy} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle)$

Nous observons bien que le comportement dans les grains diffère tant dans le domaine élastique que dans le domaine plastique. Cette différence est causée par la différence d'orientations cristallographiques entre les grains. La dispersion du comportement dans les grains augmente avec le niveau de déformation macroscopique. D'autre part, tandis que la contrainte moyenne Σ_{xx} calculée sur tout l'agrégat est nulle, ce n'est pas le cas pour celles calculées sur chaque grain $\langle \sigma_{xx} \rangle$. Mais comme Σ_{xx} est nulle, la dispersion de $\langle \sigma_{xx} \rangle$ est symétrique par rapport à l'axe X . Cette observation représente la première échelle d'hétérogénéité du matériau.

A l'échelle microscopique, *i.e.* au niveau de chaque point dans l'agrégat, la relation $(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma})$ représente l'hétérogénéité du champ de contraintes dans un grain, *e.g.* grain $N^{\circ}44$ dont la position est présentée sur la figure 4.11. La figure 4.12 présente les valeurs de contraintes σ_{xx} et σ_{yy} en tous les nœuds du grain, pour différents niveaux de déformation macroscopique $E_{yy} = \{0, 12\%; 0, 63\%; 1, 18\%; 1, 92\%; 3, 49\%\}$.

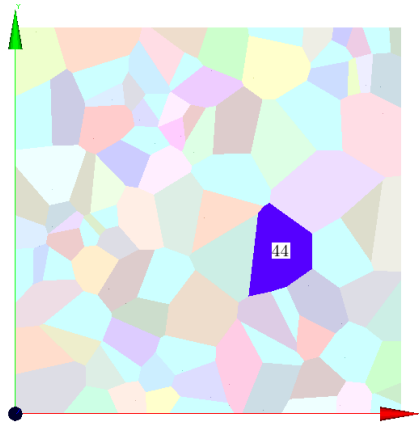


Figure 4.11 – Calcul d'agrégats polycristallins - Position du grain $N^{\circ}44$ dans l'agrégat

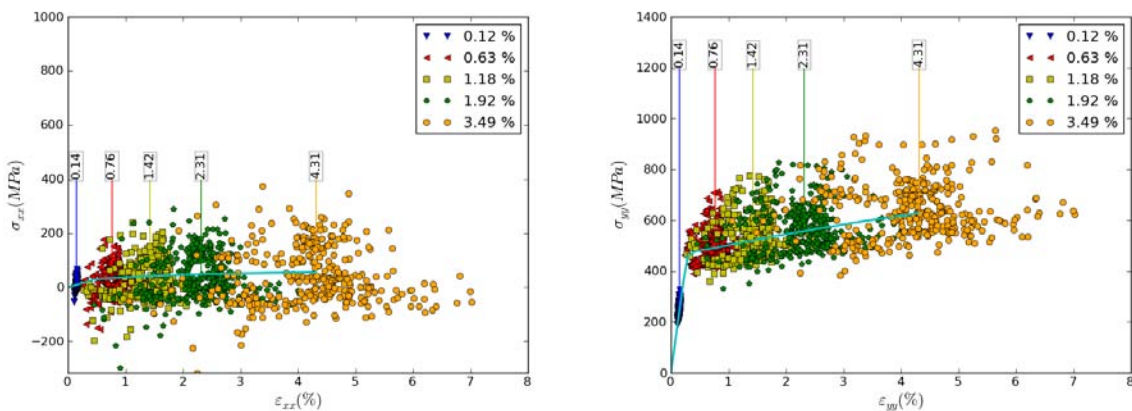


Figure 4.12 – Calcul d'agrégats polycristallins - Hétérogénéité des champs à l'intérieur du grain $N^{\circ}44$ pour différents niveaux de déformation macroscopique $E_{yy} = \{0, 12\%; 0, 63\%; 1, 18\%; 1, 92\%; 3, 49\%\}$: $(\varepsilon_{xx}, \sigma_{xx})$ à gauche et $(\varepsilon_{yy}, \sigma_{yy})$ à droite

Sur la figure 4.12, les différents niveaux de déformation macroscopique sont présentés dans la légende. Les traits verticaux présentent les niveaux de déformation moyenne $\langle \varepsilon_{yy} \rangle \equiv E_{yy}$ calculée sur le grain. On observe que pour chaque niveau de déformation, le nuage de points est bien réparti autour de la courbe moyenne. La dispersion du nuage augmente avec le niveau de déformation. De plus, au niveau de 0,12% de déformation macroscopique (dans le domaine d'élasticité), les valeurs des contraintes en tous les points sont peu dispersées du fait du comportement élastique cubique du matériau (si l'on avait choisi un comportement élastique isotrope, il n'y aurait aucune dispersion dans cette zone de la courbe).

La figure 4.12 montre également deux échelles d'hétérogénéité du matériau polycristallin. Par exemple, au niveau de 0,63% de déformation macroscopique E_{yy} , tandis que la déformation moyenne $\langle \varepsilon_{yy} \rangle$ dans le grain N°44 porte la valeur de 0,76%, la déformation ε_{yy} en un point de ce grain peut atteindre une valeur d'environ 1%. Nous observons le même phénomène pour les autres niveaux de E_{yy} , pour le champ de contraintes ainsi que dans la direction X . La différence entre ces valeurs augmente avec le niveau de déformation macroscopique E_{yy} .

4.2.6.3 Évaluation des résultats

Comme la microstructure du matériau dans notre travail est construite de façon complètement aléatoire, cette étape d'évaluation des résultats a pour but d'éliminer les calculs dont le comportement est particulièrement différent par rapport aux autres. Nous proposons une évaluation à l'échelle mésoscopique, *i.e.* sur le comportement moyen dans chaque grain.

Pour chaque calcul, nous calculons les contraintes et les déformations moyennes $\langle \sigma_{yy} \rangle_i$ et $\langle \varepsilon_{yy} \rangle_i$ ($i = 1, \dots, 100$) des 100 grains au niveau de déformation macroscopique $E_{yy} = 3,5\%$. Parmi celles-ci, nous trouvons la contrainte moyenne maximale $\langle \sigma_{yy} \rangle_{max}$ et minimale $\langle \sigma_{yy} \rangle_{min}$, ainsi que la déformation maximale $\langle \varepsilon_{yy} \rangle_{max}$ et minimale $\langle \varepsilon_{yy} \rangle_{min}$. Nous calculons ensuite les différences $\Delta\sigma_{yy} = \langle \sigma_{yy} \rangle_{max} - \langle \sigma_{yy} \rangle_{min}$ et $\Delta\varepsilon_{yy} = \langle \varepsilon_{yy} \rangle_{max} - \langle \varepsilon_{yy} \rangle_{min}$ et les traçons en fonction du numéro de calculs. La figure 4.13 présente ces courbes de dispersion de contrainte et de déformation des calculs pour les deux cas GF et GA.

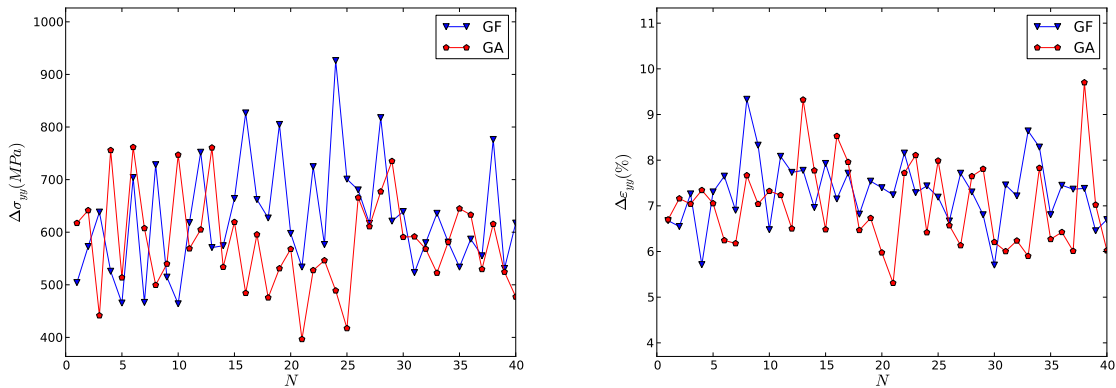


Figure 4.13 – Calcul d'agrégats polycristallins - Dispersion de contrainte (à gauche) et de déformation (à droite) des calculs

Cette observation est un moyen simple pour évaluer les résultats des calculs polycristallins. Comme les agrégats sont générés aléatoirement, il peut exister des grains particuliers dont le comportement moyen est singulier par rapport aux autres à cause de leur taille ou de leur orientation cristallographique particulière. Cette observation nous permet de repérer des tels calculs. Par exemple, sur la figure 4.13, nous observons bien que tandis que la dispersion de déformation n'a rien de particulier, le calcul numéro 24 du cas GF présente un pic particulier.

La figure 4.14 présente les comportements moyens dans tous les grains de ce calcul. Nous observons bien un comportement moyen particulier d'un grain par rapport aux autres. Dans ce cas, la géométrie est fixée, mais seul le comportement moyen dans ce grain du calcul numéro 24 est particulier, tandis que ce n'est pas le cas pour les autres. Dès lors, ce comportement particulier est clairement dû aux orientations cristallographiques qui favorisent la déformation plastique. Un tel comportement peut exister en réalité. Nous gardons donc ce résultat pour la suite.

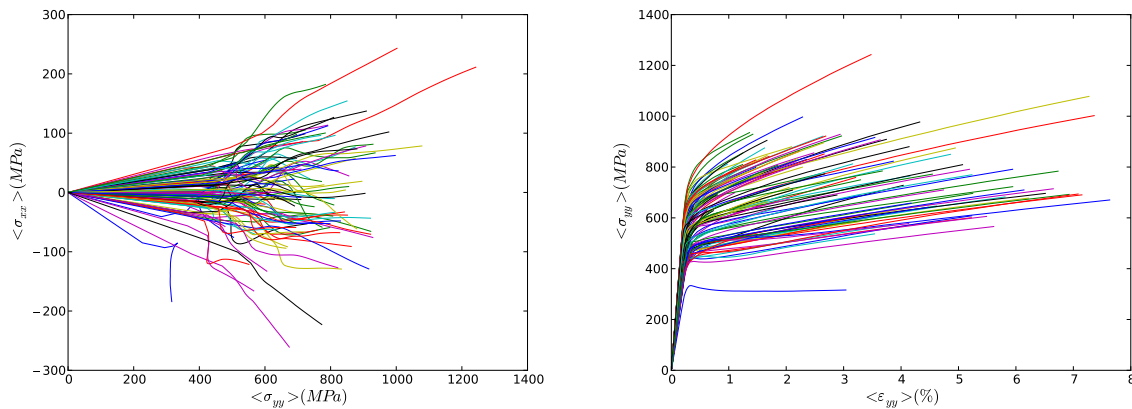


Figure 4.14 – Calcul d'agrégats polycristallins - Comportement moyen des grains du calcul N°24 du cas de géométrie fixe

La figure 4.15 présente les comportements moyens déterminés pour chacun des 40 calculs polycristallins dans les deux cas GF et GA. Nous observons bien que les parties élastiques sont superposées. Cela signifie que le VER est suffisamment représentatif pour l'élasticité cubique. Cependant, les parties plastiques sont encore dispersées. L'écart maximale des contraintes moyennes est de l'ordre de 10% par rapport à la contrainte moyenne maximale.

Mais comme nous avons à disposition 40 calculs pour chacun des cas GF et GA, nous pouvons estimer la moyenne de ceux-ci. La courbe moyenne (E_{yy}, Σ) avec $\Sigma = (\Sigma_1 + \dots + \Sigma_{40})/40$, ainsi que l'intervalle de confiance à 95% de cette estimation définie par $\Sigma \pm 1,96\sigma_\Sigma$ sont présentées sur la figure 4.16 (où σ_Σ est l'écart-type des 40 valeurs Σ_i). Celle-ci montre bien une bonne estimation avec un faible intervalle de confiance. Cela signifie que malgré la dispersion des comportements moyens, avec 40 calculs polycristallins, la taille du VER de 100 grains est suffisante, au moins pour le cas 2D.

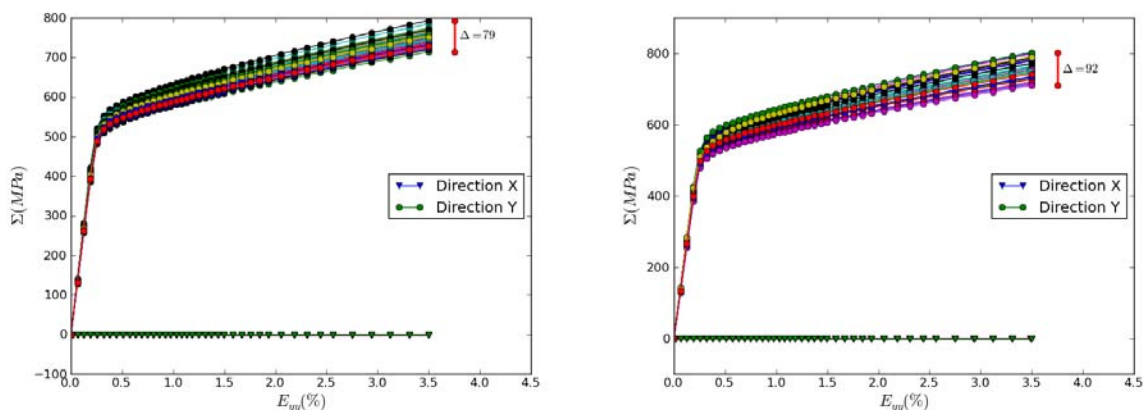


Figure 4.15 – Calcul d'agrégats polycristallins - 40 comportements moyens du cas GF à gauche et du cas GA à droite

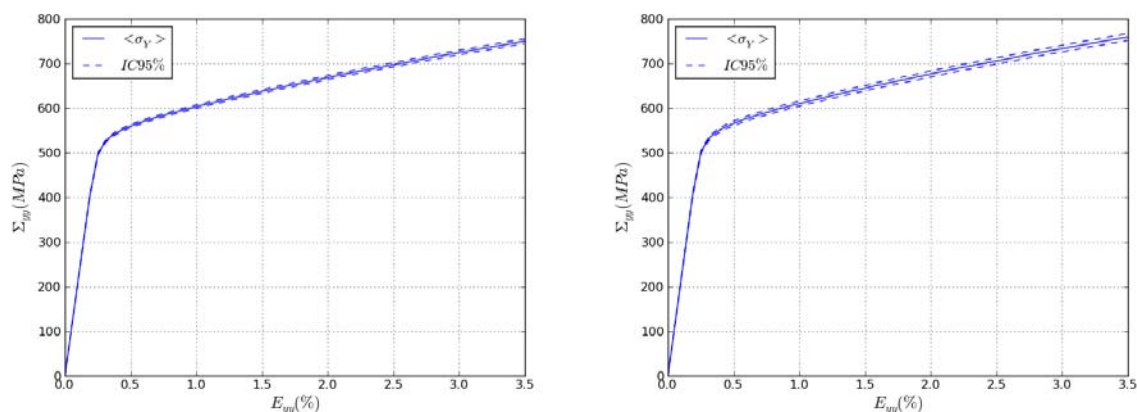


Figure 4.16 – Calcul d'agrégats polycristallins - Estimation du comportement moyen à partir des 40 calculs et l'intervalle de confiance correspondant : cas GF à gauche et cas GA à droite

4.2.7 Projection des champs de contraintes

La méthode d'identification du périodogramme nécessite d'avoir les réalisations du champ aléatoire sur une grille régulière. Dès lors, dans les calculs aux éléments finis, nous devons projeter les champs de contraintes sur une telle grille. Le nombre de points de la grille doit être choisi de forme 2^n pour que l'algorithme FFT utilisé dans la méthode du périodogramme soit efficace. Nous choisissons alors une grille de 256×256 points. La figure 4.17 présente la position de la grille sur l'agrégat. Nous observons environ 5 points de la grille sur chaque côté d'un élément du maillage qui comprend 3 nœuds.

La grille est définie dans un domaine 800×800 au centre de l'agrégat. Nous enlevons sur chaque côté une bande de 100 de largeur (10%) pour éviter l'effet de bord sur la réalisation du champ de contraintes projeté.

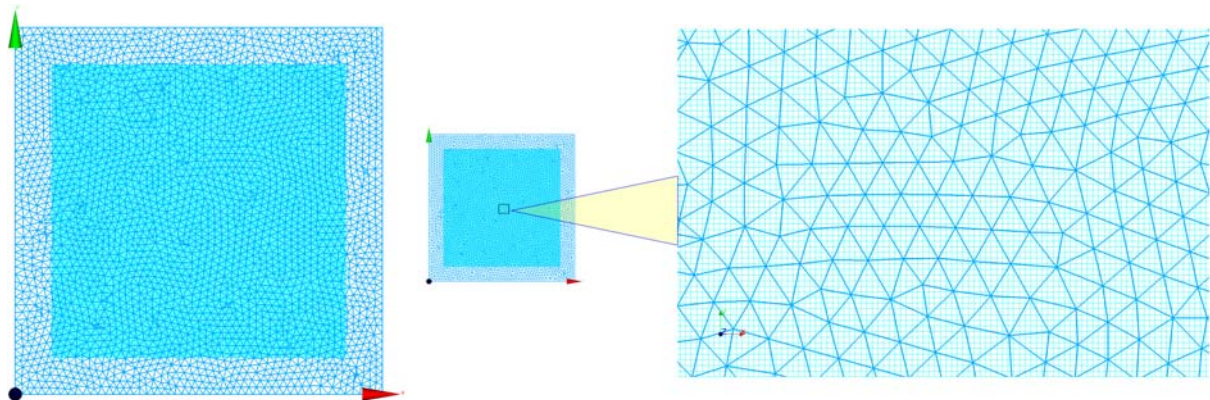


Figure 4.17 – Calcul d'agrégats polycristallins - Position de la grille de projection des champs de contraintes par rapport au maillage à gauche et le zoom sur la grille à droite (256×256 points, domaine : 800×800)

Le champ est tout d'abord calculé sur les nœuds du maillage. Il est ensuite projeté sur les nœuds de la grille. Par exemple, pour calculer la valeur du champ en un point P quelconque de la grille, on cherche dans quel élément du maillage il se trouve, *e.g.* élément M . Ensuite, la valeur du champ au point P est calculée par l'interpolation des valeurs aux nœuds de l'élément M avec ses fonctions de forme. Dans ce travail, nous nous intéressons au champ de contraintes principales maximales σ_I et à celui de clivage σ_{cliv} . Les figures 4.18 et 4.19 représentent respectivement le champ de contraintes principales maximales et celui des contraintes de clivage récupérés sur la grille de 256×256 points.

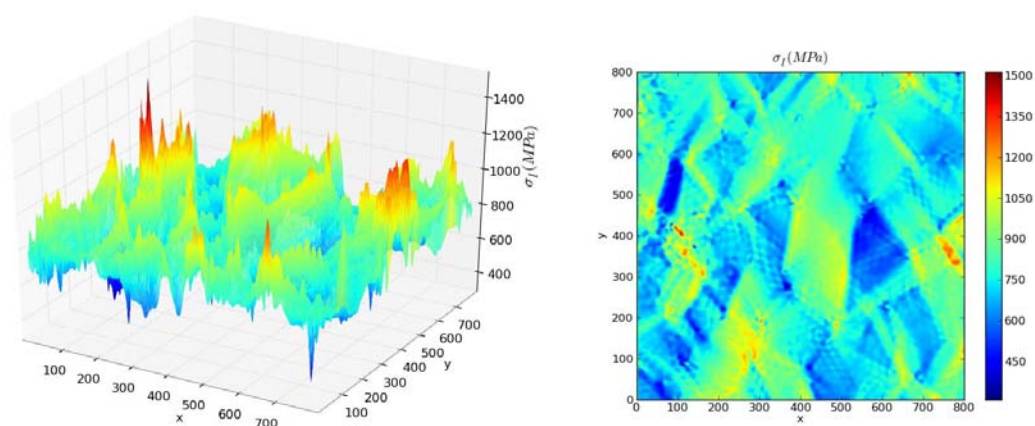


Figure 4.18 – Calcul d'agrégats polycristallins - Champ de contraintes principales maximales projeté sur une grille de 256×256 points dans un domaine de 800×800

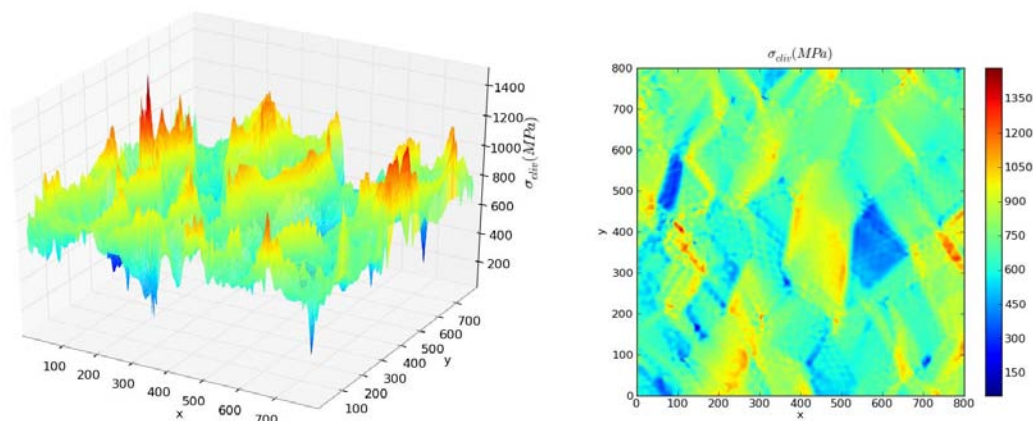


Figure 4.19 – Calcul d'agrégats polycristallins - Champ de contraintes de clivage projeté sur une grille de 256×256 points dans un domaine de 800×800

4.3 Procédure d'identification

4.3.1 Introduction

L'identification des champs de contraintes est réalisée par la méthode du périodogramme en supposant qu'ils sont gaussiens, stationnaires et ergodiques. Il s'agit d'identifier les propriétés statistiques d'ordre 2 du champ, *i.e.* la moyenne μ_σ et le modèle de covariance $C(\delta)$ à partir de 40 réalisations du champ $\{\mathcal{X}_k = \sigma_k^{ij} ; k = 1, \dots, 40 ; i, j = 1, \dots, 256\}$. La moyenne μ_σ est estimée par la moyenne empirique des réalisations en utilisant les équations (4.8) et (4.10) ci-dessous. Alors, la procédure d'identification se compose des étapes suivantes (Dang et al., 2011a) :

- Étape 1 : Vérifier le caractère gaussien du champ.
- Étape 2 : Vérifier la stationnarité du champ.
- Étape 3 : Identifier le champ de contraintes à un niveau de chargement.
- Étape 4 : Étudier l'influence du nombre de réalisations du champ.
- Étape 5 : Étudier l'influence de la fenêtre et de la finesse de la grille.
- Étape 6 : Identifier le champ de contraintes à tous les niveaux de chargement.

Cette section est organisée selon la procédure précédente. Nous commençons par la vérification du caractère gaussien du champ dans la section 4.3.2. Ensuite la section 4.3.3 présente la vérification de la stationnarité du champ. Puis, dans la section 4.3.4, nous présentons l'ajustement du périodogramme empirique à un niveau de chargement.

Les études paramétriques sont présentées dans les sections 4.3.5 et 4.3.6. Enfin, la section 4.3.7 présente l'identification des champs de contraintes à tous les niveaux de chargement.

4.3.2 Vérification du caractère gaussien

Comme nous ne savons pas si les champs de contraintes sont gaussiens, une vérification de ce caractère est alors nécessaire. A partir de 40 réalisations du champ, nous avons 40 réalisations indépendantes $\{\sigma_i, i = 1, \dots, 40\}$ pour chacune des variables. Des tests d'adéquation pourraient être utilisés pour cette vérification, mais 40 réalisations des variables ne suffit pas. Dès lors, pour chacune des variables, nous estimons la fonction de densité de probabilité par l'histogramme et par l'estimation non paramétrique par noyau gaussien :

$$\hat{f}_{\Sigma}(\sigma, h) = \frac{1}{Nh} \sum_{i=1}^N \varphi\left(\frac{\sigma - \sigma_i}{h}\right) \quad (4.6)$$

où $N = 40$, h est un paramètre appelé *largeur de bande* et $\varphi(x)$ est la fonction de densité de probabilité de la loi normale définie par :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (4.7)$$

Cette hypothèse est vérifiée pour les variables en un certain nombre de points de la grille régulière (*e.g.* 1024) avec l'aide du logiciel Openturns, version 1.0 (<http://www.openturns.org>). Cependant, cette vérification n'a pour but que de connaître si cette hypothèse est acceptable. Le cas contraire, *i.e.* le cas non-gaussien, n'est pas traité dans le cadre de cette thèse mais constitue une perspective pour la suite.

4.3.3 Vérification de la stationnarité

La vérification de l'hypothèse de stationnarité joue un rôle très important dans la procédure d'identification. Si celle-ci n'est pas acceptable, il est nécessaire de normaliser les réalisations avant d'estimer le périodogramme empirique. A partir de 40 réalisations du champ, nous calculons les moments d'ensemble statistiques d'ordre 1 et 2 (*i.e.* la moyenne et la variance) empiriques du champ par :

$$\mu_{\sigma K}^{ij} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \sigma_k^{ij} \quad (4.8)$$

$$v_{\sigma K}^{ij} = \frac{1}{K-1} \sum_{k=1}^K \left(\sigma_k^{ij} - \mu_{\sigma K}^{ij}\right)^2 \quad (4.9)$$

Avec $K_0 \leq K \leq 40$, nous obtenons différentes évaluations du champ de moyenne empirique $\{\mu_{\sigma K}^{ij}, K = K_0, \dots, 40\}$ et du champ de variance empirique $\{v_{\sigma K}^{ij}, K = K_0, \dots, 40\}$.

Nous définissons également les moments spatiaux d'ordre 1 et 2 empiriques (*i.e.* moyenne spatiale et variance spatiale) d'un champ aléatoire $H(x, \omega)$ à partir d'une réalisation

$\{\mathcal{X} = h^{ij} ; i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, M\}$ du champ par :

$$\bar{\mu}_H = \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M h^{ij} \quad (4.10)$$

$$\bar{v}_H = \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (h^{ij} - \bar{\mu}_H)^2 \quad (4.11)$$

Le coefficient de variation CV est défini par :

$$CV = \frac{\sqrt{\bar{v}_H}}{\bar{\mu}_H} \quad (4.12)$$

Appliquons maintenant les équations (4.10), (4.11) et (4.12) au champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma K}^{ij}$ et celui de variance empirique $v_{\sigma K}^{ij}$. Nous obtenons pour chacun de ces champs les valeurs du coefficient de variation en fonction du nombre de réalisations utilisés $K : \{CV_{\mu}^K, K = K_0, \dots, 40\}$ et $\{CV_v^K, K = K_0, \dots, 40\}$. En traçant ces coefficients en fonction du nombre de réalisations K , nous pouvons observer leurs évolutions lorsque le nombre de données augmente. Si ceux-ci tendent vers zéro lorsque le nombre de données augmente, cela signifie que le champ de moyenne empirique et celui de variance empirique tendent vers des constantes avec l'augmentation du nombre de données. Sinon, les réalisations des champs doivent être normalisées selon l'équation (4.13) avant d'estimer le périodogramme empirique.

$$\bar{\sigma}^{ij} = \frac{1}{\sqrt{v_{\sigma K}^{ij}}} (\sigma^{ij} - \mu_{\sigma K}^{ij}) \quad (4.13)$$

Avec $K_0 \leq K \leq 40$, nous calculons respectivement les périodogrammes empiriques correspondant au nombre de réalisations utilisées K .

En pratique, nous utiliserons $K_0 = 10$, considérant que les analyses statistiques se sont pas réalisables lorsque l'on dispose de moins de 10 réalisation des quantités étudiées.

4.3.4 Ajustement du périodogramme empirique à un niveau de chargement

Le périodogramme empirique est ajusté par l'algorithme des moindres carrés avec des modèles théoriques. Les modèles théoriques du périodogramme peuvent être ceux présentés dans la section 2.3.2.2 ou leurs combinaisons. De plus, dans certains cas, la composante fréquentielle principale du champ n'est pas celle à fréquence 0 (la moyenne du champ), le pic du périodogramme ne se trouve pas à l'origine ($f_x = 0, f_y = 0$), mais se décale par rapport à l'origine. Nous introduisons le terme "*fréquence principale*" f_0 dans le modèle théorique pour bien ajuster le pic du périodogramme empirique. Celui-ci donnera à la covariance correspondante un terme cosinus additionné qui représente une oscillation amortie du covariogramme. Par exemple le modèle mixte "gaussien-exponentiel" avec la

fréquence principale a la forme :

$$P(f_x, f_y) = v_1 \pi l_{x1} l_{y1} \exp \left[\pi^2 \left(l_{x1}^2 (f_x - f_{x0}^{(1)})^2 + l_{y1}^2 (f_y - f_{y0}^{(1)})^2 \right) \right] + v_2 \frac{2l_{x2}}{1 + 4\pi^2 l_{x2}^2 (f_x - f_{x2}^{(2)})^2} \frac{2l_{y2}}{1 + 4\pi^2 l_{y2}^2 (f_y - f_{y2}^{(2)})^2} \quad (4.14)$$

Le modèle de covariance correspondant s'écrit :

$$C(x, y) = v_1 \exp \left[- \left(\frac{h_x^2}{l_{x1}^2} + \frac{h_y^2}{l_{y1}^2} \right) \right] \cos(2\pi f_{x0}^{(1)} h_x) \cos(2\pi f_{y0}^{(1)} h_y) + v_2 \exp \left[- \left(\frac{|h_x|}{l_{x2}} + \frac{|h_y|}{l_{y2}} \right) \right] \cos(2\pi f_{x0}^{(2)} h_x) \cos(2\pi f_{y0}^{(2)} h_y) \quad (4.15)$$

L'ajustement du périodogramme empirique est réalisé en utilisant le package "scipy.optimize", version 0.7.0 en Python. Nous introduisons les notions du résidu relatif des moindres carrés Δ et du résidu relatif moyen $\bar{\Delta}$ respectivement définis par (4.16) et (4.17) comme étant les critères de choix du meilleur résultat.

$$\Delta_{ij} = \frac{\hat{P}(f_{xi}, f_{yj}) - P^{the}(f_{xi}, f_{yj})}{\max(\hat{P})} \quad (4.16)$$

$$\bar{\Delta} = \sqrt{\frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \Delta_{ij}^2} \quad (4.17)$$

où $\hat{P}(f_{xi}, f_{yj})$ est le périodogramme *empirique* et $P^{the}(f_{xi}, f_{yj})$ est le modèle *théorique* du périodogramme choisi. L'histogramme des valeurs Δ_{ij} est ensuite tracé pour observer leur distribution. Cette observation est un autre critère pour évaluer l'ajustement du périodogramme empirique.

Pour commenter les résultats d'identification, nous introduisons la notion de *taille moyenne de grains* D_g qui est définie comme étant le diamètre d'un cercle dont l'aire est égale à l'aire moyenne de chaque grain A_g . On obtient :

$$D_g = \sqrt{\frac{4A_g}{\pi}} = \sqrt{\frac{4 \times 1000 \times 1000}{100 \times \pi}} = 112,8 \quad (4.18)$$

Pour comparer les résultats d'identification des deux cas GF et GA, nous définissons la différence relative ϵ d'un paramètre θ quelconque par :

$$\epsilon_\theta = \frac{|\theta_{GA} - \theta_{GF}|}{\theta_{GF}} \times 100 (\%) \quad (4.19)$$

4.3.5 Influence du nombre de réalisations du champ de contraintes

Cette étude a pour but d'observer la convergence des paramètres identifiés avec l'augmentation du nombre de réalisations du champ. Le périodogramme empirique

$\hat{P}_K(f_x, f_y)$ est calculé avec $K = 10, \dots, 40$. Nous appliquons les étapes précédentes pour identifier les paramètres du modèle théorique en ajustant les périodogrammes empiriques $\hat{P}_K(f_x, f_y)$. L'évolution de ces paramètres en fonction de K montrera la convergence des paramètres identifiés.

4.3.6 Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille

Comme indiqué au chapitre 3, l'estimation du périodogramme empirique dépend du modèle de la fenêtre d'observation et de la finesse de la grille de projection des champs de contraintes principales maximales et de clivage. Cette étape consiste à étudier l'influence de ces facteurs sur le résultat d'identification. Nous identifions des paramètres avec différents modèles de fenêtre (Sec. 3.5.3) et avec différentes finesses de la grille, *i.e.* avec des grilles de 32×32 points, 64×64 points, 128×128 points et 256×256 points. Nous les traçons ensuite en fonction du modèle de la fenêtre et en fonction de la finesse de la grille. Cette observation montrera l'influence de ces facteurs sur les paramètres identifiés.

4.3.7 Ajustement du périodogramme empirique à tous les niveaux de chargement

Les étapes d'identification présentées ci-dessus sont appliquées pour chaque niveau de chargement (déformation macroscopique E_{yy}). Nous traçons ensuite l'évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de chargement. L'évolution des paramètres identifiés représentera l'évolution du champ (*i.e.* sa dispersion et sa structure spatiale) au cours de la déformation de l'éprouvette. Rappelons que la *dispersion* du champ est représentée par la valeur de la variance, tandis que la *structure spatiale* ou l'hétérogénéité du champ est représentée par les valeurs des longueurs de corrélation.

4.3.8 Conclusion

Dans cette section, nous avons construit une procédure pour identifier les champs de contraintes en les supposant gaussiens. On commence par une vérification des hypothèses, *i.e.* gaussien et stationnaire. Ensuite, on identifie les champs à chaque niveau de déformation macroscopique en faisant les études paramétriques. On termine par l'identification des champs à tous les niveaux de déformation. Le résultat de cette dernière étape servira à la simulation des champs dans la section 4.7. Cette procédure sera appliquée pour identifier le champ de contraintes principales maximales σ_I et le champ de contraintes de clivage σ_{cliv} dans les sections 4.4 et 4.5 suivantes.

4.4 Identification du champ de contraintes principales maximales

4.4.1 Introduction

Cette section présente les résultats de l'identification du champ de contraintes principales maximales σ_I . La procédure présentée dans la section précédente est appliquée pour chaque cas GF et GA à chaque niveau de chargement. Nous reprenons tout d'abord en détail chaque étape d'identification tant au niveau des analyses qualitatives qu'au niveau des analyses quantitatives pour un seul niveau de chargement (*e.g.* $E_{yy} = 3,5\%$). Ensuite, la procédure est appliquée pour tous les niveaux de chargement avec le même modèle théorique de covariance et nous ne présentons que les paramètres identifiés. Les résultats des deux cas (GF et GA) sont présentés face à face pour les comparer et pour observer l'influence de la structure de grains sur le champ.

4.4.2 Vérification du caractère gaussien

Les figures 4.20 et 4.21 présentent l'estimation de la densité de probabilité d'une variable en un point particulier de la grille de post-traitement par l'histogramme et par le lissage à noyau, ainsi que la densité de probabilité en chacun de 32×32 points, respectivement pour le cas GF et pour le cas GA. Visuellement, nous constatons qu'en général, les variables semblent gaussiennes et que le cas GA est "plus" gaussien que le cas GF. De plus, les courbes ne sont pas trop dispersées. Cela montre de façon heuristique que le champ semble stationnaire, surtout dans le cas GA.

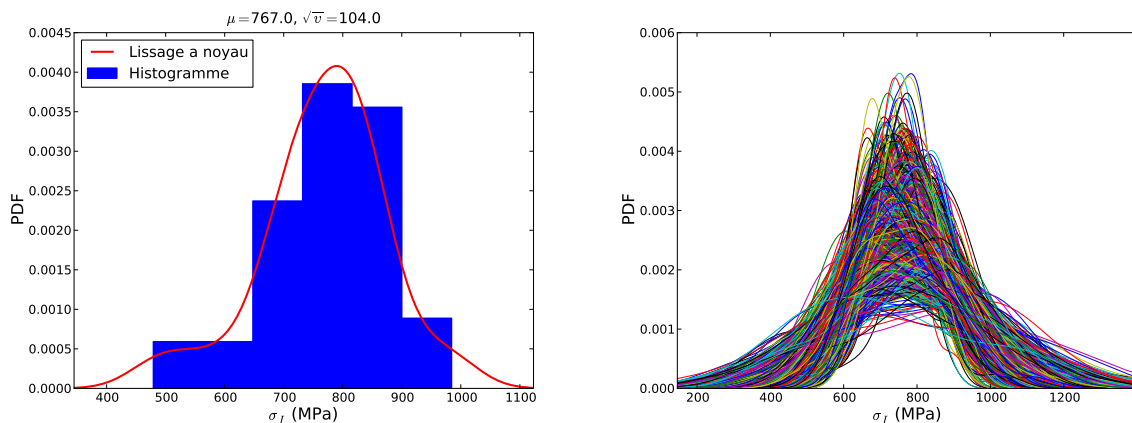


Figure 4.20 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Estimation de la densité de probabilité de 40 valeurs de contraintes aléatoires par histogramme et par lissage à noyau gaussien en un point de la grille à gauche ; aux 32×32 points de la grille à droite

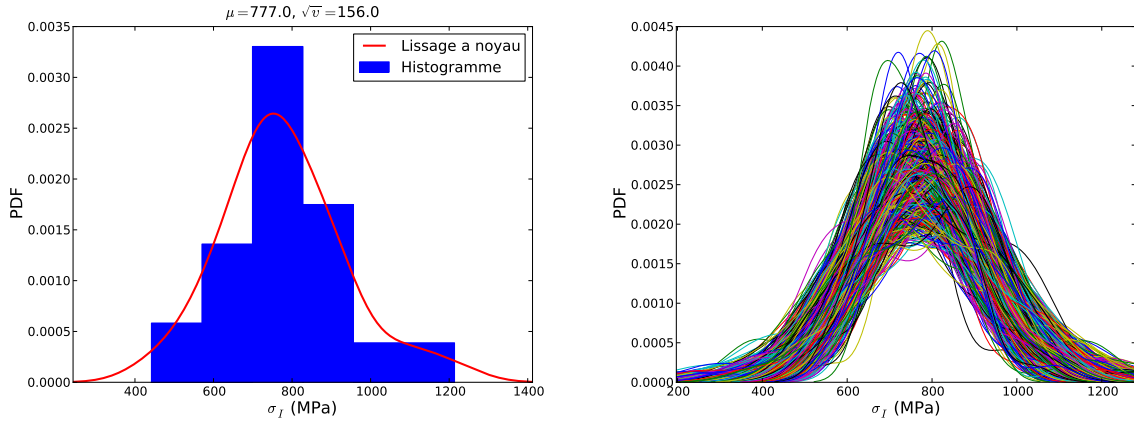


Figure 4.21 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Estimation de la densité de probabilité de 40 valeurs de contraintes aléatoires par histogramme et par lissage à noyau gaussien en un point de la grille à gauche ; aux 32×32 points de la grille à droite

Cependant, en observant en détail les courbes, il est clair qu'il existe des variables non-gaussiennes. Par ailleurs, notons que comme le tenseur de contraintes est défini positif, la contrainte σ_I est aussi positive. Dès lors, la modélisation de celle-ci par une variable aléatoire gaussienne est une approximation. Mais rappelons également que nous n'avons que 40 réalisations des variables et que les courbes ne dévient pas fortement par rapport au cas gaussien. De plus, le coefficient de variation des variables est de l'ordre de 0,15 à 0,2 ce qui assure une probabilité d'avoir des contraintes négatives presque nul. Nous considérons donc l'hypothèse du caractère gaussien du champ de contraintes σ_I comme acceptable.

4.4.3 Vérification de la stationnarité

Les figures 4.22 et 4.23 présentent les champs de moyenne empirique $\mu_{\sigma_I}^{ij}$ et de variance empirique $v_{\sigma_I}^{ij}$ du champ σ_I au niveau de déformation macroscopique de 3,5%, respectivement pour le cas GF et pour le cas GA (Eq. (4.8), (4.9)). Nous observons bien que ces champs ne sont pas constants. Surtout dans le cas GF, à cause de la superposition des joints de grains où se concentre le champ de contraintes, nous observons des pics importants sur ces deux champs. Il est clair que ces champs ne sont pas constants puisqu'ils ne sont estimés qu'à partir de 40 réalisations du champ de contraintes. Dès lors, pour vérifier leur stationnarité, nous observons l'évolution de leurs coefficients de variation CV_μ et CV_v en fonction du nombre de réalisations du champ.

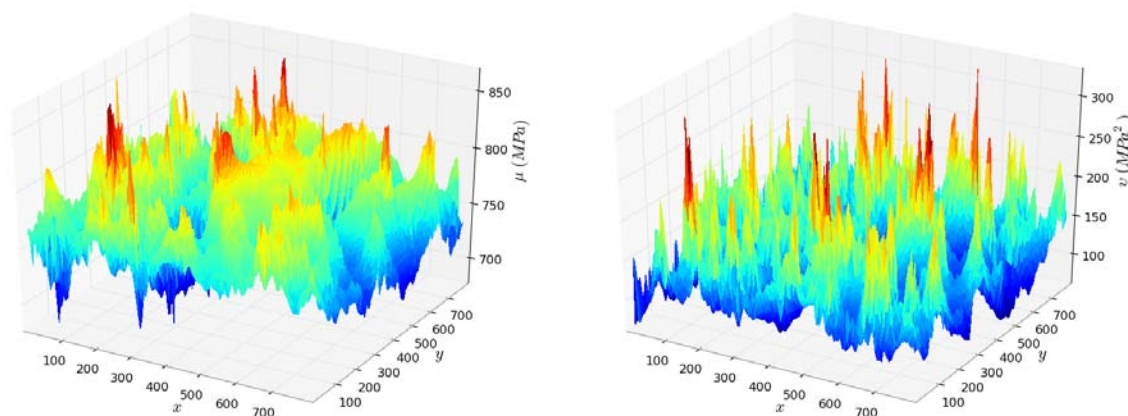


Figure 4.22 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma_I}^{ij}$ (à gauche) et champ de variance empirique $v_{\sigma_I}^{ij}$ (à droite) de 40 réalisations du champ

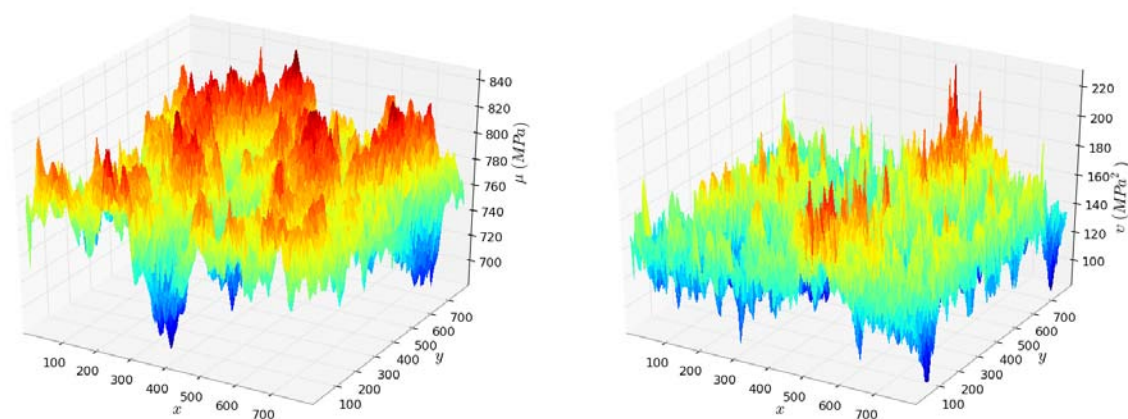


Figure 4.23 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma_I}^{ij}$ (à gauche) et champ de variance empirique $v_{\sigma_I}^{ij}$ (à droite) de 40 réalisations du champ

Les figures 4.24 et 4.25 présentent l'évolution de CV_μ et de CV_v en fonction du nombre de réalisations pour les deux cas GF et GA. Ces figures montrent bien que ces coefficients diminuent avec l'augmentation du nombre de réalisations. Les valeurs minimales de CV_μ et de CV_v correspondantes à 40 réalisations sont respectivement de l'ordre de 0,03 et 0,15. Ces valeurs sont déjà assez petites et pourraient être diminuées lorsque l'on augmente le nombre de réalisations. La vitesse de convergence des coefficients dans le cas GA est plus rapide que dans l'autre cas à cause de la non superposition des joints de grains. Cela nous permet de conclure que l'hypothèse de stationnarité est acceptable et qu'elle est mieux satisfaite dans le cas GA que dans le cas GF.

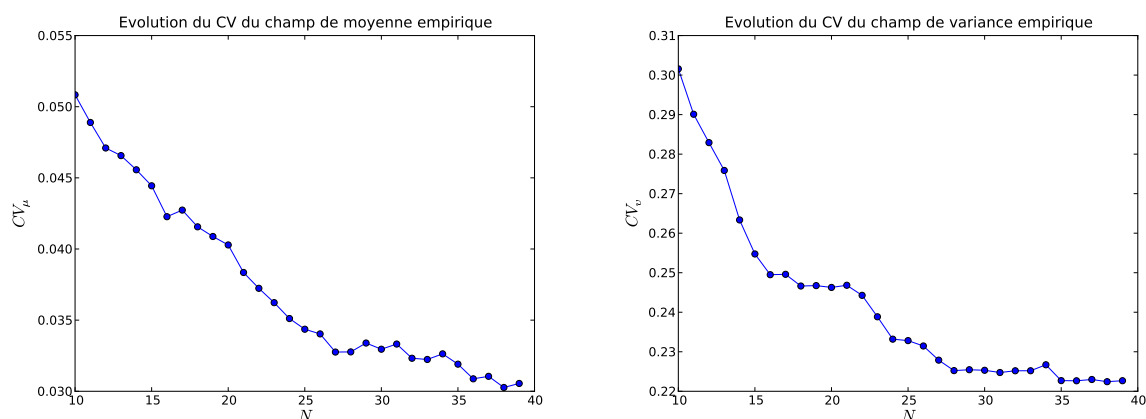


Figure 4.24 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution du coefficient de variation empirique du champ de moyenne empirique CV_μ à gauche et du champ de variance empirique CV_v à droite

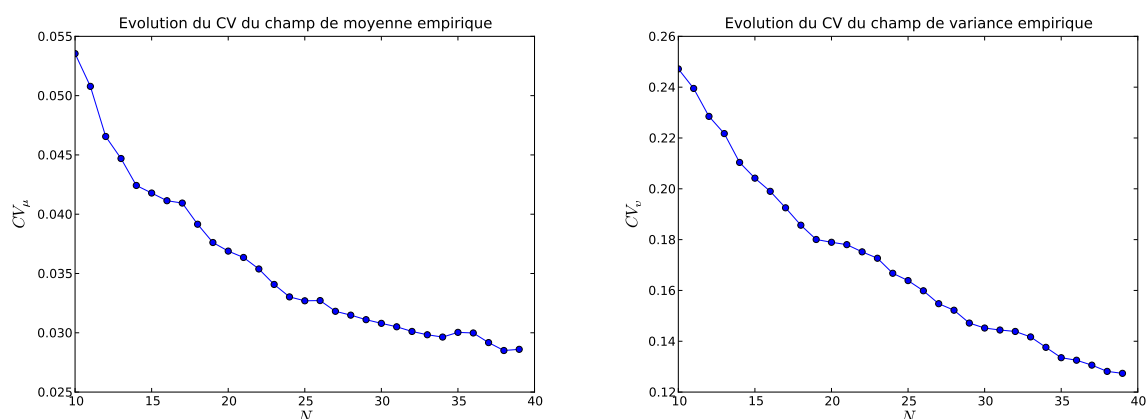


Figure 4.25 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution du coefficient de variation empirique du champ de moyenne empirique CV_μ à gauche et du champ de variance empirique CV_v à droite

4.4.4 Identification à un niveau de chargement

Dans cette étape, nous présentons en détail l'identification du champ de contraintes au niveau de déformation macroscopique $E_{yy} = 3,5\%$. Le périodogramme empirique est calculé à partir de 40 réalisations du champ et est ajusté avec trois modèles théoriques : gaussien, exponentiel, gaussien-exponentiel ("mixte"). Les valeurs des paramètres identifiés, ainsi que la valeur du résidu relatif moyen $\bar{\Delta}$ sont présentées dans le tableau 4.3.

Nous observons bien que l'ajustement du périodogramme empirique avec le modèle "mixte" donne la valeur minimale de $\bar{\Delta}$. Cela montre que le modèle "mixte" est la meilleure représentation de la corrélation spatiale du champ. Si l'on ajuste le périodogramme empirique avec une des deux composantes du modèle "mixte", on perd alors de l'information du périodogramme empirique.

Partie	Cas	GF			GA			
		Modèle	gaussien	exponentiel	mixte	gaussien	exponentiel	mixte
	$\bar{\Delta}$		0,004	0,004	0,002	0,004	0,004	0,002
gaussienne	$\sqrt{v_1}$		79,69	×	52,54	78,29	×	49,10
	l_{x1}		83,64	×	174,0	99,28	×	186,2
	l_{y1}		96,32	×	120,1	98,46	×	127,6
	$f_{x0}^{(1)}$		0,003	×	0,002	0,003	×	0,002
	$f_{y0}^{(1)}$		0,000	×	0,000	0,000	×	0,000
exponentielle	$\sqrt{v_2}$		×	103,3	80,14	×	103,4	83,87
	l_{x2}		×	63,24	69,29	×	68,89	69,87
	l_{y2}		×	71,49	44,51	×	74,63	50,75
	$f_{x0}^{(2)}$		×	0,003	0,005	×	0,003	0,005
	$f_{y0}^{(2)}$		×	0,000	0,000	×	0,000	0,000

Tableau 4.3 – Cas GF et GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Paramètres identifiés et le résidu relatif moyen du périodogramme empirique avec trois modèles théoriques : gaussien, exponentiel et gaussien-exponentiel ("mixte")

Les figures 4.26 et 4.27 présentent les périodogrammes empiriques et ceux identifiés avec le modèle "mixte" pour les deux cas GF et GA. Visuellement, on constate que les périodogrammes empiriques (à gauche) ont la même forme dans les deux cas et que les périodogrammes identifiés représentent bien la forme des périodogrammes empiriques. L'histogramme des résidus relatifs (Fig. 4.28) et les coupes des périodogrammes (Fig. 4.29, Fig. 4.30) renforcent cette constatation.

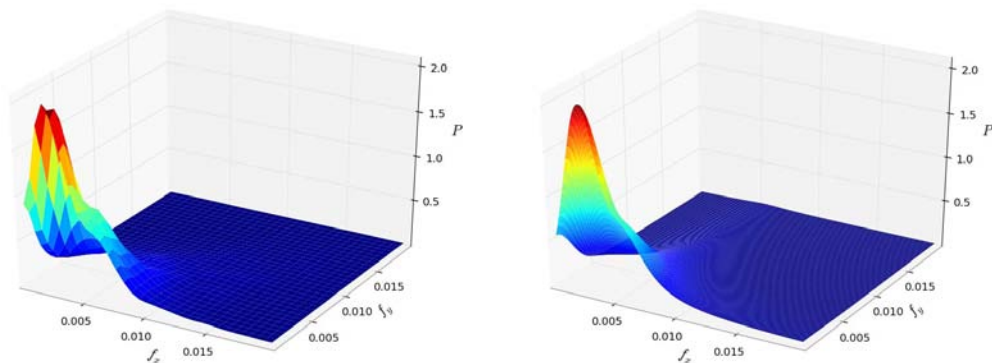


Figure 4.26 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Périodogramme empirique à gauche et périodogramme identifié à droite

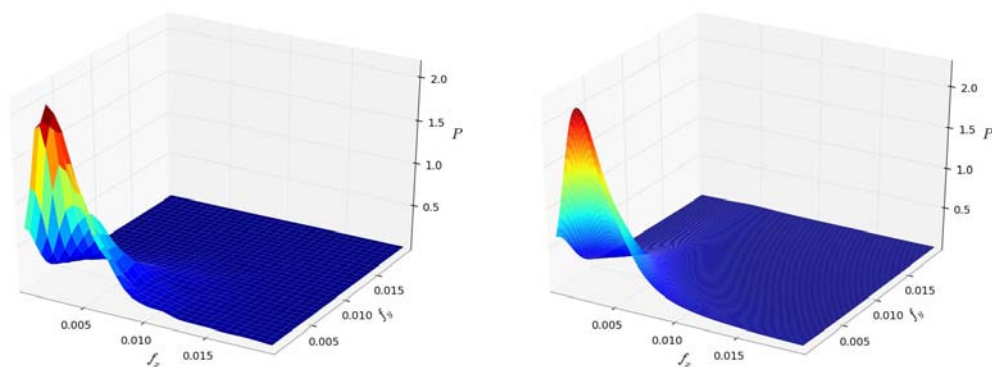


Figure 4.27 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Périodogramme empirique à gauche et périodogramme identifié à droite

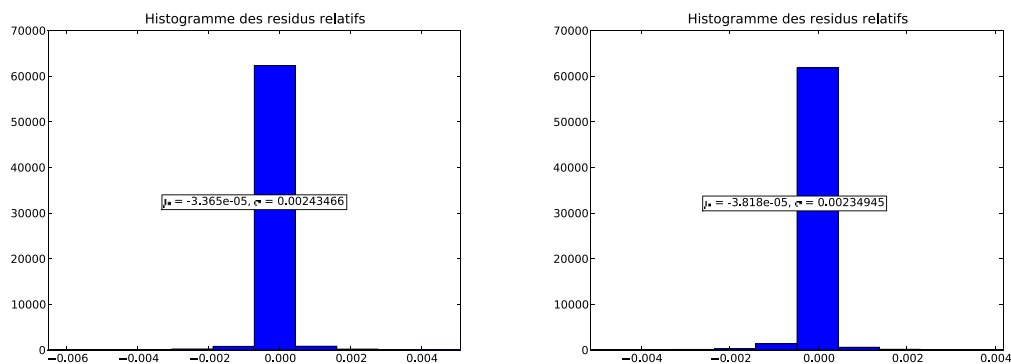


Figure 4.28 – Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Histogramme des résidus relatifs Δ_{ij} : cas GF à gauche et cas GA à droite

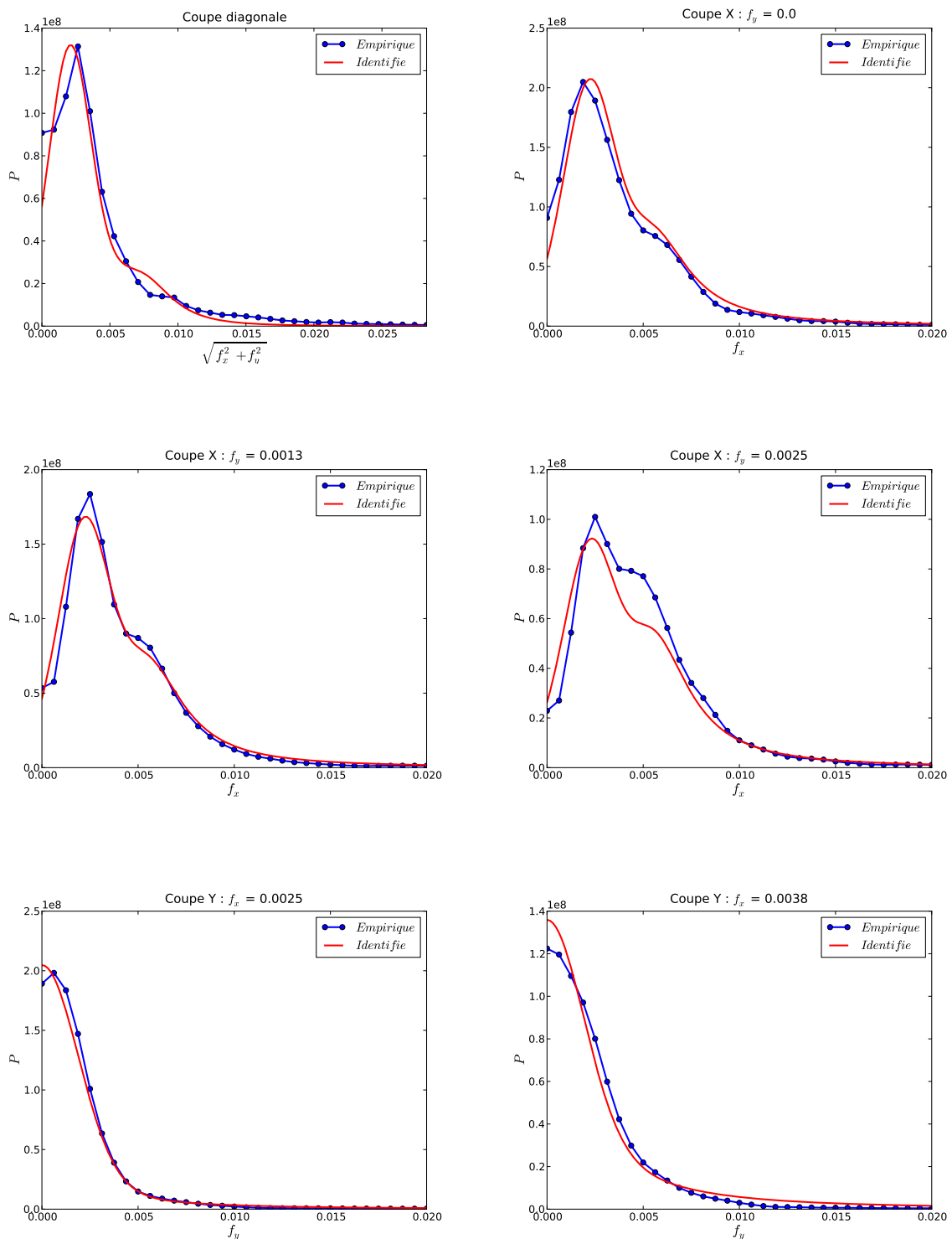


Figure 4.29 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Coupes des périodogrammes empirique et identifié : suivant la direction diagonale ($f_x = f_y$), suivant la direction X ($f_y = 0$, $f_y = 0.0013$, $f_y = 0.0025$) et suivant la direction Y ($f_x = 0.0025$, $f_y = 0.0038$)

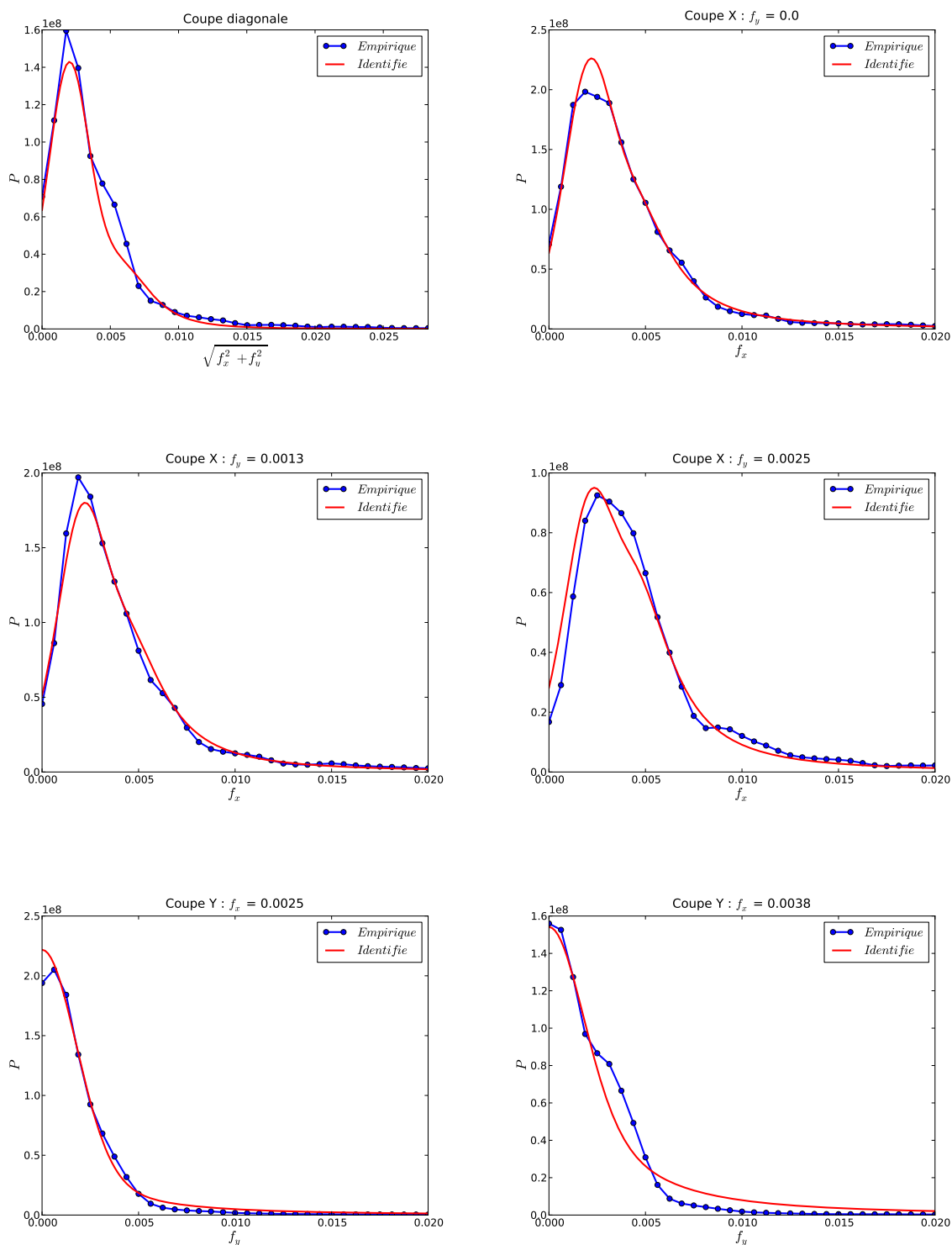


Figure 4.30 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Coupes des périodogrammes empirique et identifié : suivant la direction diagonale ($f_x = f_y$), suivant la direction X ($f_y = 0$, $f_y = 0.0013$, $f_y = 0.0025$) et suivant la direction Y ($f_x = 0.0025$, $f_y = 0.0038$)

Pour comparer quantitativement les deux cas GF et GA, on calcule les paramètres correspondants. La variance correspondante du champ est calculée par $v = v_1 + v_2$ et les échelles de fluctuation correspondantes sont calculées selon l'équation (3.12) et le tableau 3.1. Les résultats sont présentés dans le tableau 4.4.

Partie	Paramètres identifiés			Paramètres correspondants			ϵ (%)
	Paramètres	GF	GA	Paramètres	GF	GA	
				$\sqrt{v} = \sqrt{v_1 + v_2}$	95,82	97,18	1,42
gaussienne	$\sqrt{v_1}$	52,54	49,10				
	l_{x1}	174,0	186,2	$\vartheta_{x1} = \sqrt{\pi}l_{x1}$	308,4	330,0	7,00
	l_{y1}	120,1	127,6	$\vartheta_{y1} = \sqrt{\pi}l_{y1}$	212,9	226,2	6,25
	$f_{x0}^{(1)}$	0,002	0,002	$f_{x0}^{(1)}$	0,002	0,002	0,00
	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	0,000	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	0,000	0,00
exponentielle	$\sqrt{v_2}$	80,14	83,87				
	l_{x2}	69,29	69,87	$\vartheta_{x2} = 2l_{x2}$	138,6	139,7	0,80
	l_{y2}	44,51	50,75	$\vartheta_{y2} = 2l_{y2}$	89,02	101,1	13,6
	$f_{x0}^{(2)}$	0,005	0,005	$f_{x0}^{(2)}$	0,005	0,005	0,00
	$f_{y0}^{(2)}$	0,000	0,000	$f_{y0}^{(2)}$	0,000	0,000	0,00

Tableau 4.4 – Cas GF et GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Paramètres identifiés et paramètres correspondants du modèle de covariance mixte : gaussien-exponentiel

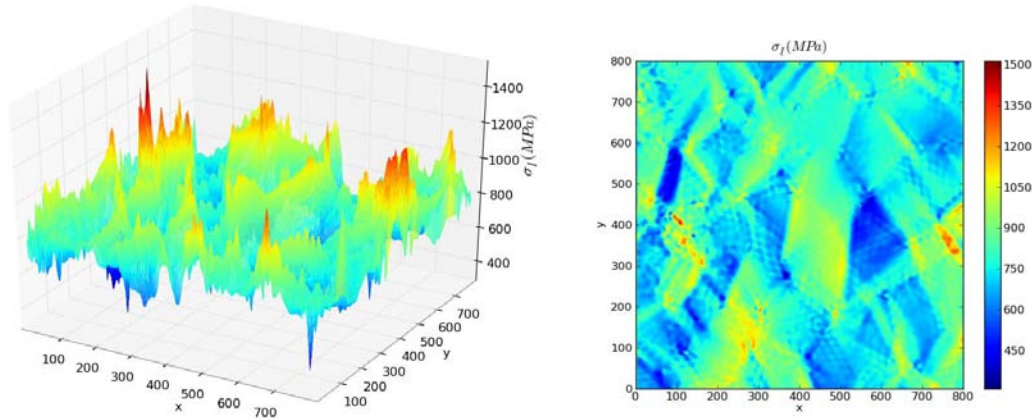


Figure 4.31 – Cas GF - Champ de contraintes principales maximales σ_I à 3,5% de déformation macroscopique

En observant l'image du champ de contraintes σ_I (Fig. 4.31), on constate qu'un tel champ se compose de deux parties. La première partie se situant aux joints de grains est représentée par les pics importants. Cette partie est très dispersée et varie rapidement. La deuxième se situant dans les grains, est moins dispersée et varie plus lentement. La structure de covariance spatiale de ces deux parties semblent donc respectivement représentées par la composante exponentielle et celle gaussienne du modèle de covariance mixte.

On observe bien dans le tableau 4.4 que la variance de la composante exponentielle est plus grande que celle de la composante gaussienne, reps.(80, 14 ; 83, 87) contre (52, 54 ; 49, 10) ; tandis que les échelles de fluctuation sont plus petites, reps.(138, 6 ; 139, 7 ; 89, 02 ; 101, 1) contre (308, 4 ; 330, 0 ; 212, 9 ; 226, 2). Cela montre que la partie du champ correspondant à la composante exponentielle du modèle de covariance est plus dispersée et qu'elle varie plus rapidement que l'autre.

De plus, le champ σ_I varie plus rapidement dans la direction du chargement (Y) que dans l'autre direction car les échelles de fluctuation associées à chaque composante du modèle de covariance sont plus petites, reps.(212, 9, 226, 2, 89, 02, 101, 1) contre (308, 4, 330, 0, 138, 6, 139, 7).

Les figures 4.32 et 4.33 présentent la contribution de chaque composante (gaussienne et exponentielle) au modèle mixte suivant chaque direction.

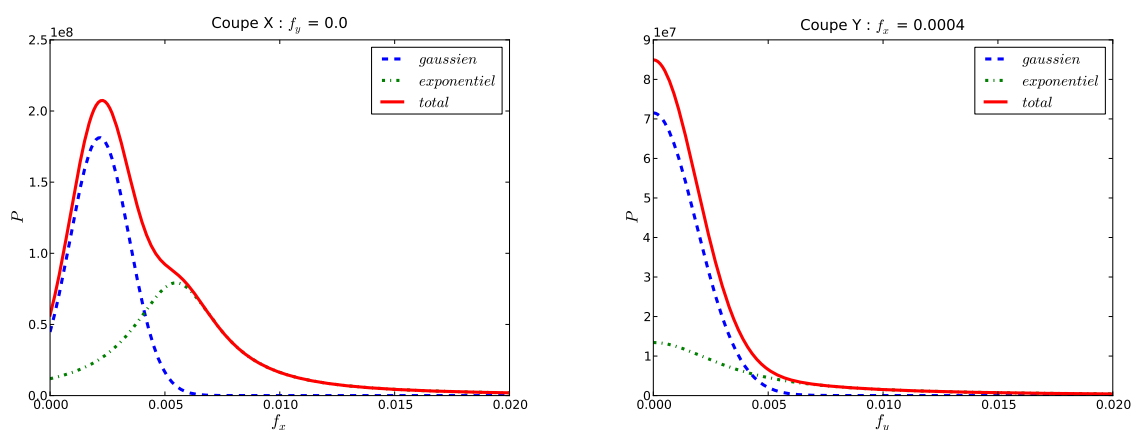


Figure 4.32 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Modèle mixte et ses composantes : Coupes suivant la direction X à gauche et suivant la direction Y à droite

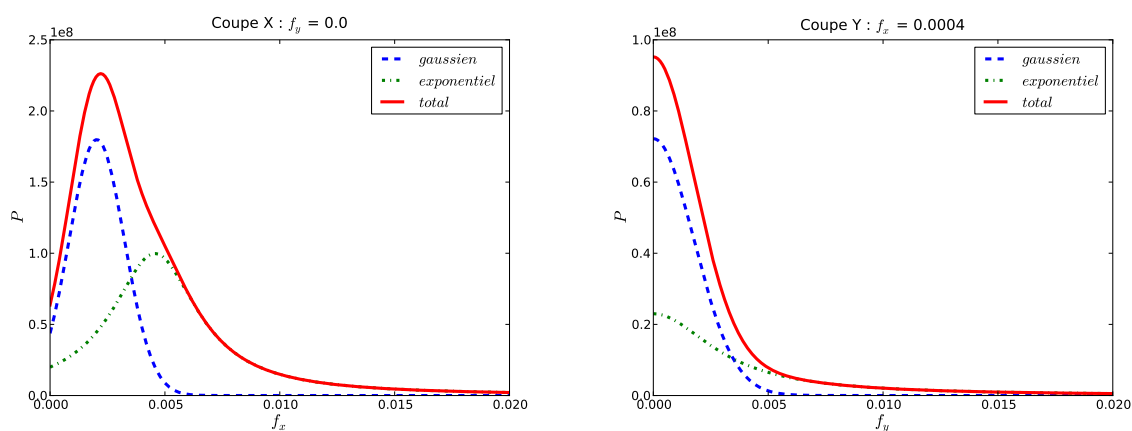


Figure 4.33 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Modèle mixte et ses composantes : Coupes suivant la direction X à gauche et suivant la direction Y à droite

Les valeurs non nulles des termes de fréquence principale $f_{x0}^{(1)}$ et $f_{x0}^{(1)}$ montrent que tandis que suivant la direction Y, la composante fréquentielle principale du champ σ_I est sa moyenne, ce n'est pas le cas suivant la direction X. Ce décalage de la fréquence principale par rapport à l'origine entraîne une oscillation suivant la direction X dans le covariogramme du champ.

Si l'on prend le rapport entre les échelles de fluctuation correspondant aux deux composantes (gaussienne et exponentielle) du modèle de covariance dans chaque cas de géométrie, on obtient $\vartheta_{x1}^{fixe}/\vartheta_{x2}^{fixe} = \vartheta_{y1}^{fixe}/\vartheta_{y2}^{fixe} = \vartheta_{x1}^{vari}/\vartheta_{x2}^{vari} = \vartheta_{y1}^{vari}/\vartheta_{y2}^{vari} \approx 2,3$. Cela signifie que la structure spatiale relative entre les deux composantes du modèle de covariance est *constante* quand la structure de grains varie.

Comme indiqué dans la section 4.2.6, l'interaction des grains cause l'hétérogénéité du champ de contraintes dans chaque grain. En comparant la taille moyenne de grains (D_g) avec les échelles de fluctuation correspondantes, on observe que les échelles de fluctuation pour la composante gaussienne sont de l'ordre de 2 à 3 fois D_g , tandis qu'elles valent de 0,79 à 1,23 D_g pour la composante exponentielle. Ces rapports montrent que l'interaction des grains est limitée à 2 ou 3 grains voisins et que la longueur de corrélation de la partie du champ de contraintes relative aux joints de grains est liée à la taille moyenne de grains. De plus, comme la taille de l'éprouvette est de l'ordre de 3 fois la longueur de corrélation maximale, la taille du VER choisie est alors suffisante.

D'autre part, en observant les paramètres correspondants, on montre que les valeurs de la variance du champ σ_I dans les deux cas de géométrie sont presque égales (95,82 MPa² et 97,18 MPa²). Cela signifie que la dispersion de ce champ est identique dans les deux cas. Les longueurs de corrélation dans le cas GA sont plus grandes que celle dans l'autre cas. Précisément, $\epsilon_{l_{x1}}$, $\epsilon_{l_{x2}}$, $\epsilon_{l_{y1}}$, $\epsilon_{l_{y2}}$ sont respectivement égales à 7,0%, 6,25%, 0,8% et 13,6%. Cela montre que le champ σ_I dans le cas GA est plus homogène que dans le cas GF.

4.4.5 Influence du nombre de réalisations

Les figures 4.34 et 4.35 présentent l'évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ de contraintes utilisé dans l'identification pour les deux cas GF et GA. Ces figures montrent qu'on obtient une convergence des paramètres dès 25 réalisations.

Cependant, tandis que les autres paramètres présentent de très bonnes convergences, ce n'est pas le cas pour la longueur de corrélation de la partie gaussienne l_{y1} (courbe en bas à droite sur les figures 4.34 et 4.35). Comme indiqué dans la section 4.4.4, la variation du champ de contraintes suivant la direction de chargement est plus rapide que suivant l'autre direction, la convergence lente de l_{y1} est donc compréhensible. De plus, notons que nous n'avons que 40 réalisations du champ et qu'il faut également prendre en compte l'erreur numérique de l'ajustement du périodogramme empirique. Compte tenu de ces réserves, le résultat de l'identification semble acceptable.

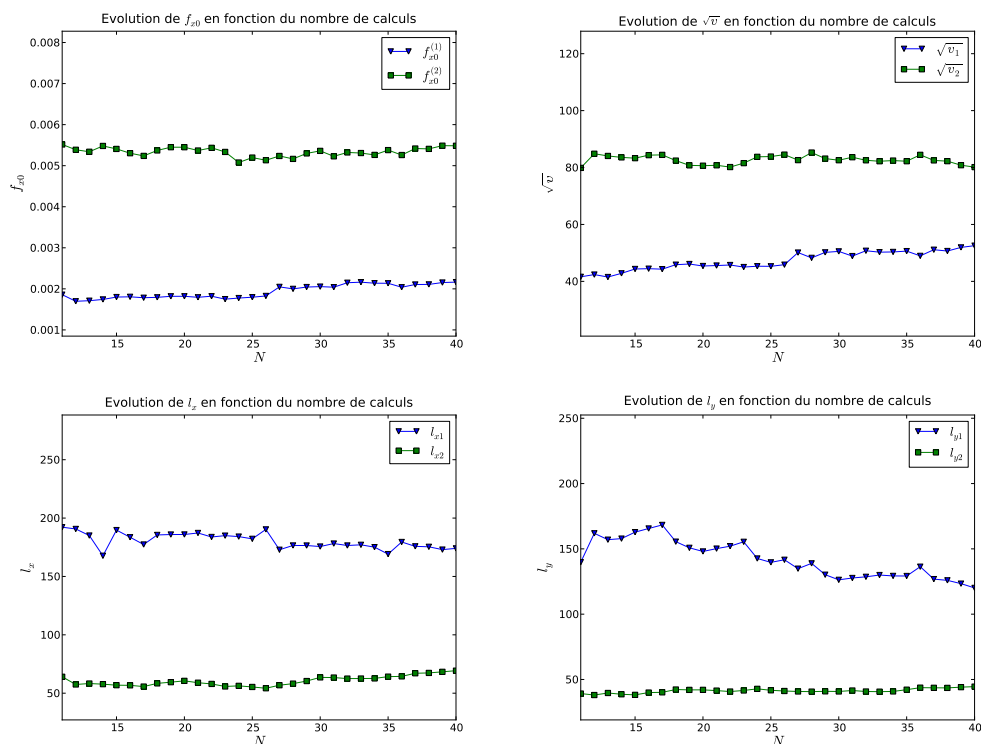


Figure 4.34 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ

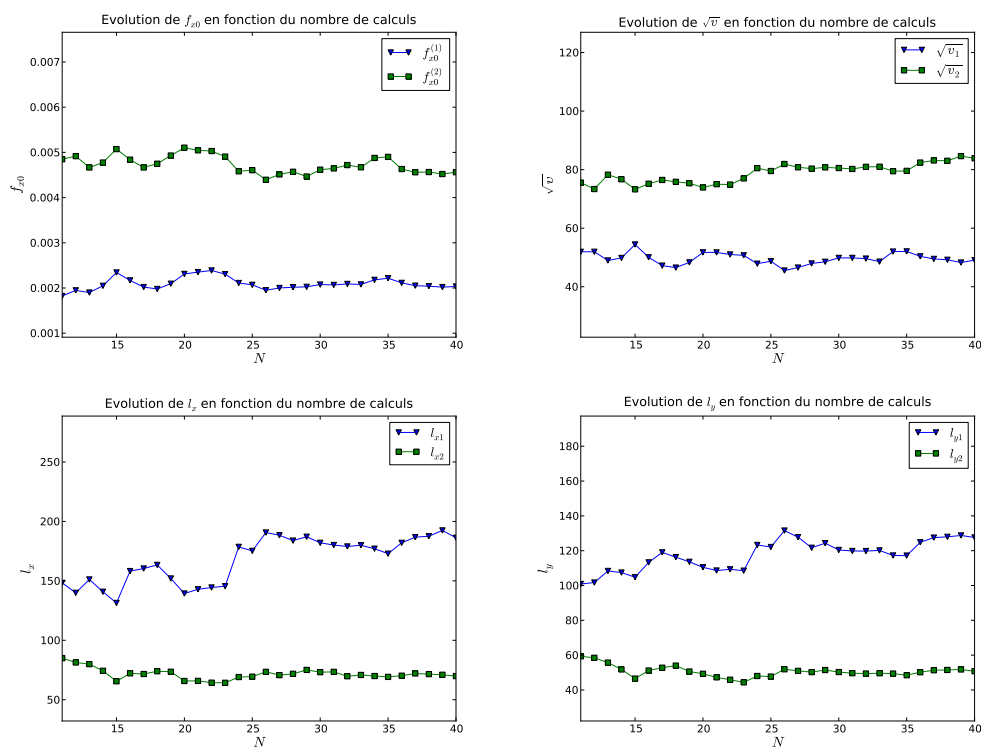


Figure 4.35 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ

4.4.6 Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille

Les figures 4.36 et 4.37 présentent les valeurs des paramètres du champ de contraintes σ_I à 3,5% de déformation macroscopique, identifiés avec différents modèles de la fenêtre d'observation pour les deux cas GF et GA. Elles montrent que les fenêtres donnent presque toutes les mêmes résultats sauf la fenêtre rectangulaire et celle de Bartlett. Il existe une petite dispersion sur les paramètres l_{x1} et l_{y1} , mais elle n'est pas trop importante, notamment si l'on a à l'esprit l'erreur numérique de l'ajustement. On conclut que l'utilisation de la fenêtre de Blackman dans ce travail, la plus communément utilisée, est satisfaisante.

Les figures 4.38 et 4.39 présentent les valeurs des paramètres du même champ, identifiés avec différentes grilles (32×32 , 64×64 , 128×128 , 256×256 points). On observe que les paramètres convergent dès la grille de 64×64 points. Cela nous permet de conclure que la grille de 256×256 points utilisée pour la projection du champ de contraintes est suffisamment fine pour représenter le champ. C'est celle-ci qui sera utilisée par la suite systématiquement.

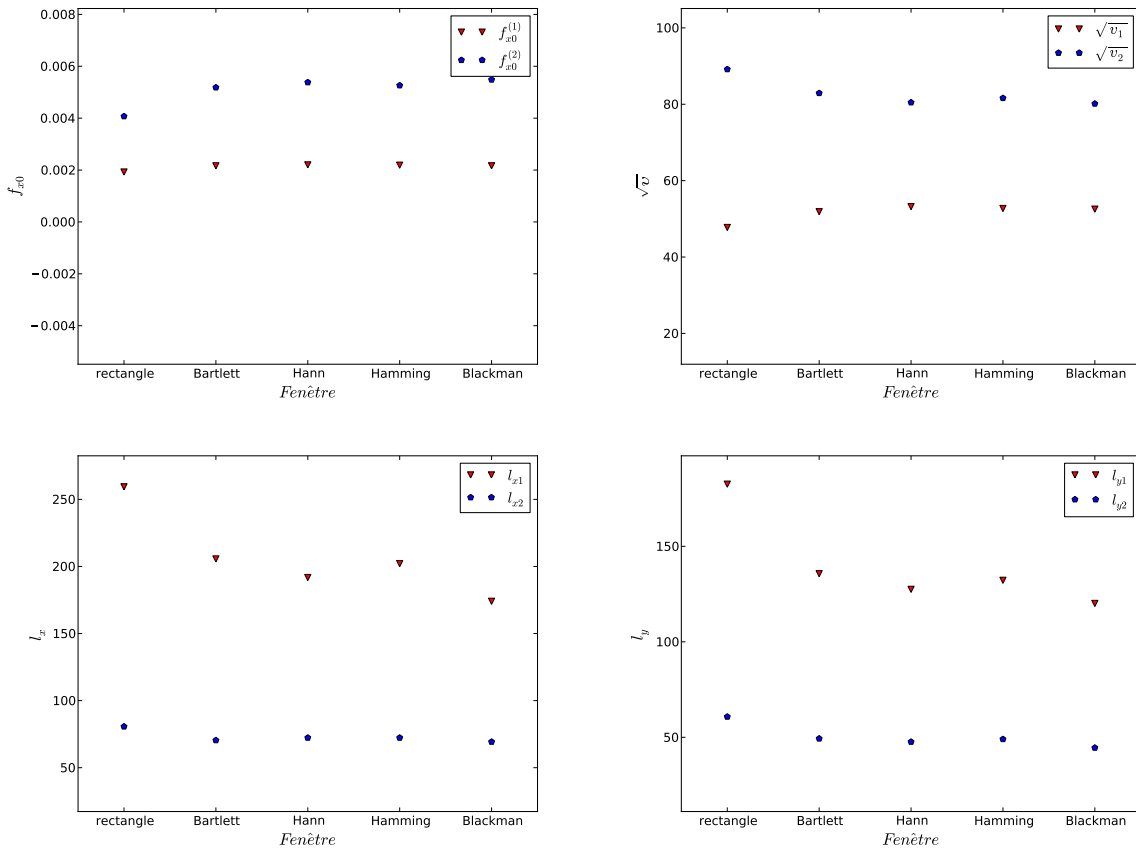


Figure 4.36 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la fenêtre d'observation sur les paramètres identifiés

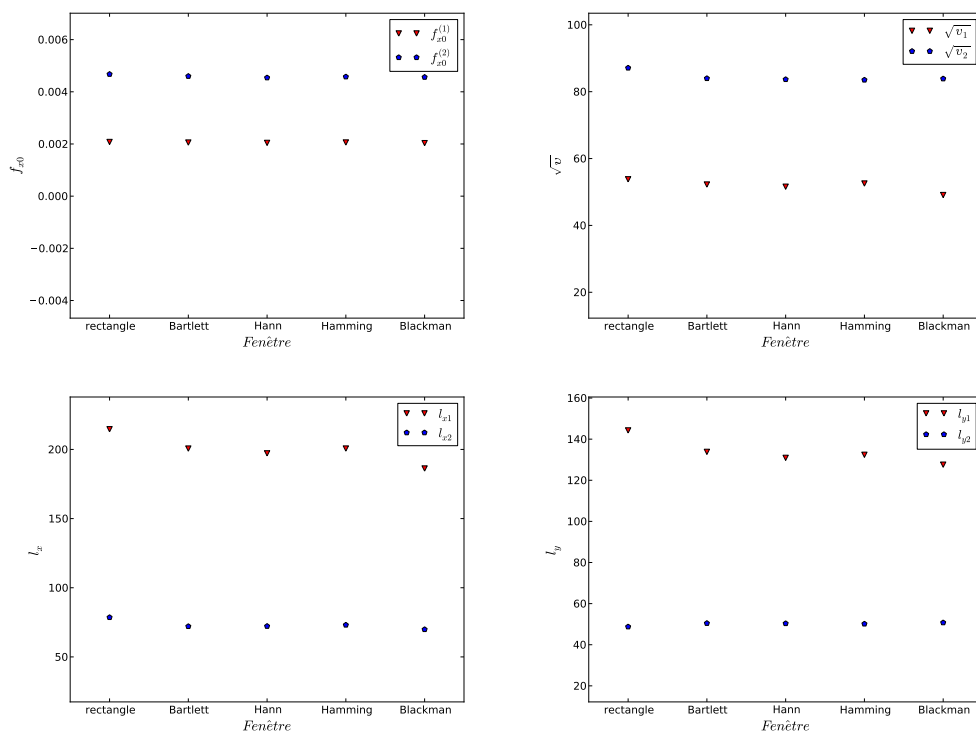


Figure 4.37 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la fenêtre d'observation sur les paramètres identifiés

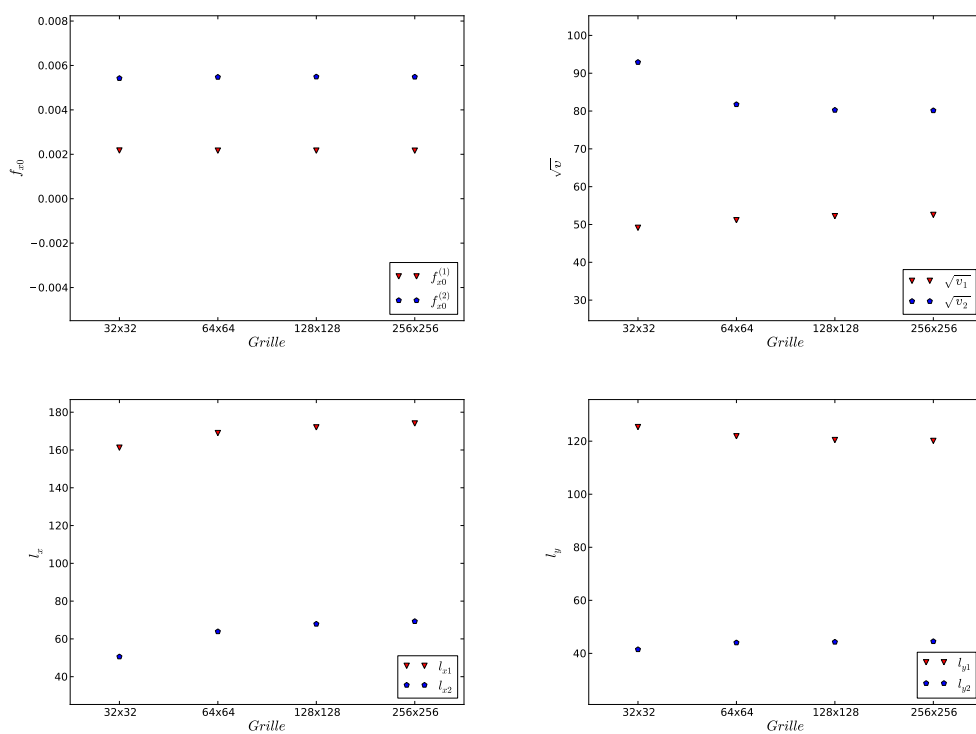


Figure 4.38 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la finesse de la grille sur les paramètres identifiés

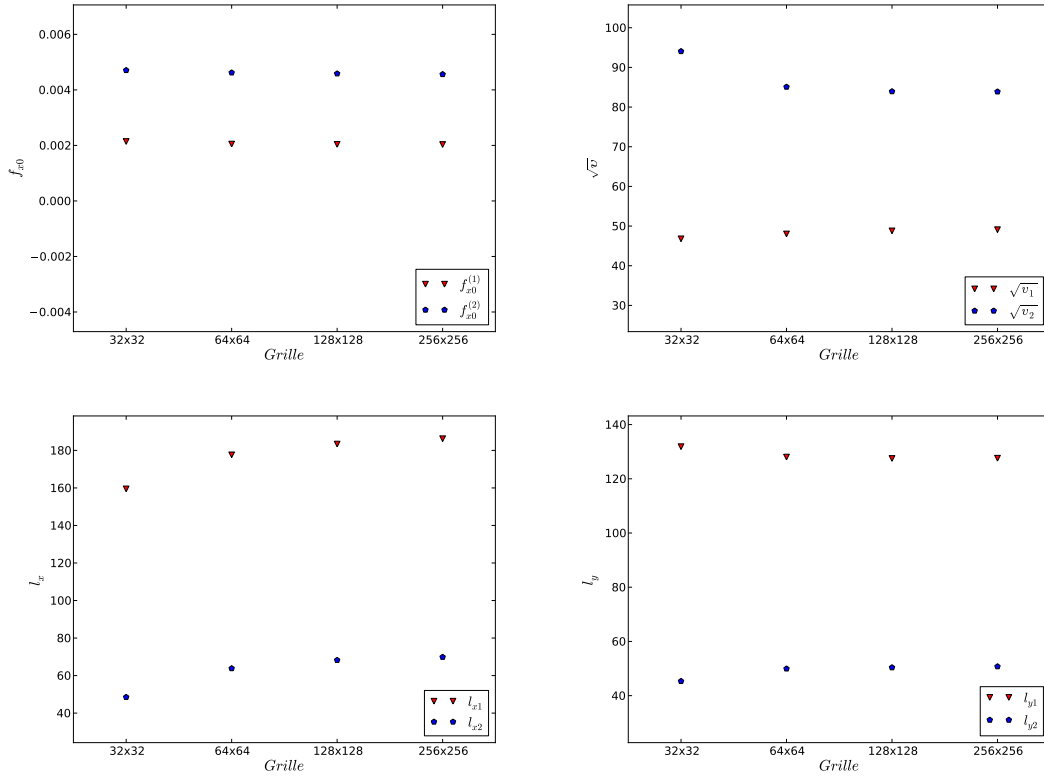


Figure 4.39 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la finesse de la grille sur les paramètres identifiés

4.4.7 Identification à tous les niveaux de chargement

Les figures 4.40 et 4.41 présentent l'évolution des paramètres identifiés du champ σ_I en fonction du niveau de déformation macroscopique (E_{yy}) pour les deux cas GF et GA. Sur les figures relatives aux longueurs de corrélation, on observe bien trois phases d'évolution.

- La première phase ($E_Y = 0\% - 0,2\%$) représente le domaine élastique : les longueurs de corrélation sont stables.
- la deuxième phase ($E_Y = 0,2\% - 0,5\%$) représente le domaine de transition (élasticité-plasticité) : l'évolution des longueurs de corrélation est non-linéaire.
- La dernière phase ($E_Y > 0,5\%$) représente le domaine plastique : les longueurs de corrélation sont stables. La variance du champ évolue quant à elle non-linéairement avec l'augmentation du niveau de déformation.

Rappelons ici que le comportement élastique du matériau est à symétrie cubique. Dès lors, dès le domaine élastique, le champ de contraintes est déjà hétérogène. Les valeurs des paramètres identifiés sont alors non-nulles. Dans le cas du comportement élastique isotrope, le champ de contraintes dans le domaine élastique est parfaitement homogène et non aléatoire. En comparant les figures 4.40 et 4.41, nous observons également que les champs de contraintes σ_I dans les deux cas GF et GA présentent une structure de covariance spatiale similaire.

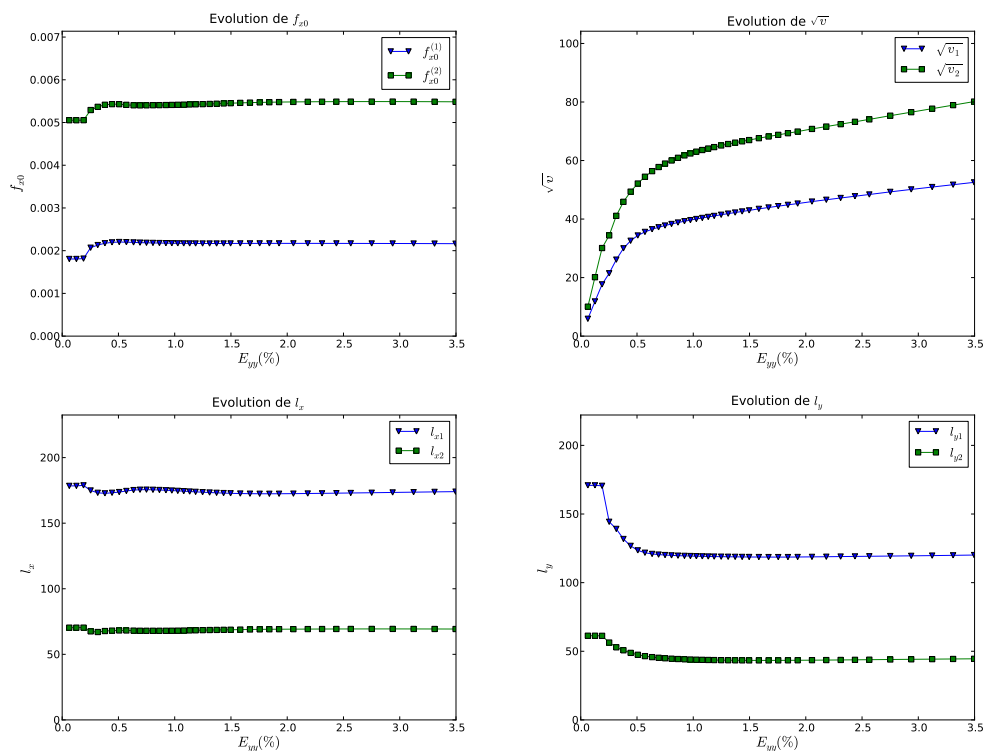


Figure 4.40 – Cas GF - Champ σ_I - Évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique

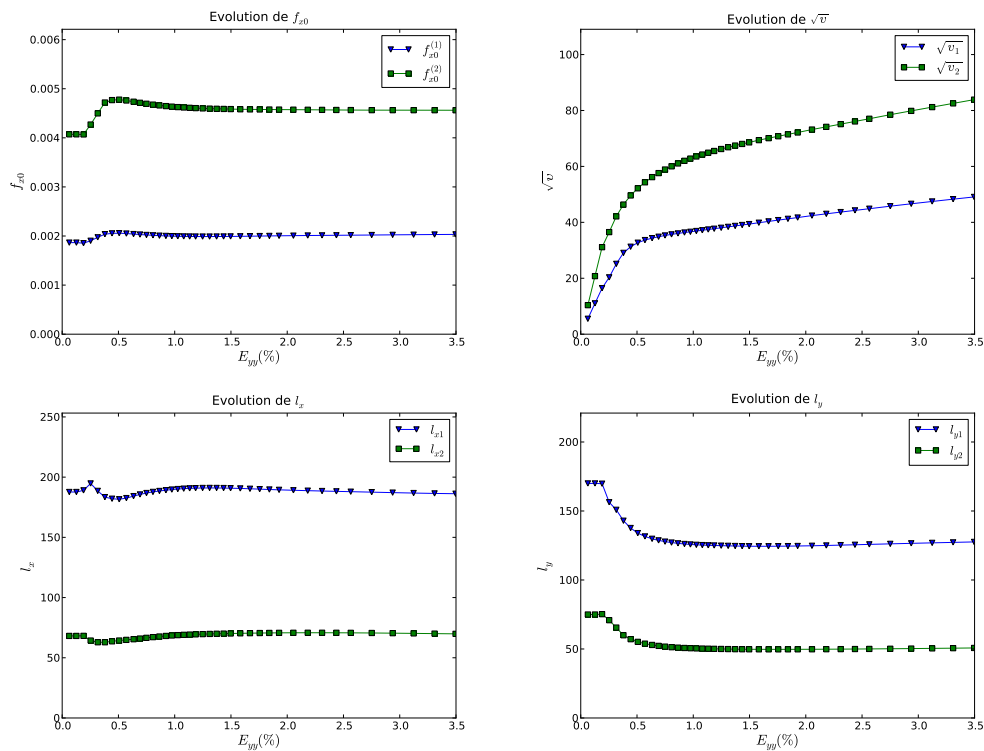


Figure 4.41 – Cas GA - Champ σ_I - Évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique

4.4.8 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté l'identification des propriétés du champ aléatoire de contrainte principale maximale σ_I dans un agrégat polycristallin représentant un VER d'acier 16MND5. Nous avons tout d'abord détaillé la procédure pour un niveau de chargement particulier, dans les deux cas d'agrégats à géométrie fixe (GF) et aléatoire (GA). L'hypothèse de modélisation par un champ *gaussien stationnaire* apparaît raisonnable au vu des différentes vérifications.

Nous avons comparé trois modèles de covariance, respectivement gaussien, exponentiel et mixte. Dans les deux configurations GF et GA, le modèle mixte permet de reproduire au mieux le périodogramme empirique. Pour effectuer l'identification du périodogramme, le choix de la fenêtre d'observation influe peu sur le résultat. La fenêtre de Blackman est retenue pour la suite.

La convergence de la procédure avec le nombre de calculs d'agrégats semble atteint dès 25 calculs. Les résultats finaux utilisant les 40 calculs disponibles sont donc dignes de confiance. De même, la convergence en fonction de la finesse de la grille utilisée est atteinte dès 64×64 points, ce qui valide notre choix de 256×256 points.

Lorsqu'on regarde de près les paramètres identifiés, on peut tirer les conclusions suivantes :

- la variance du champ est quasiment identique pour les cas GF et GA ;
- les échelles de fluctuation associées aux deux composantes du modèle de covariance sont respectivement $2 - 3 D_g$ (composante gaussien) et $0,8 - 1,3 D_g$ (composante exponentielle).

L'interprétation proposée est que la composante gaussienne représente l'interaction entre les grains (un grain influe sur ces 2 - 3 plus proches voisins uniquement) tandis que la composante exponentielle représente le passage des différentes orientations cristallographiques d'un grain à l'autre. La dispersion de la composante exponentielle représentée par l'écart-type $\sqrt{v_2}$ est environ 2 fois plus grande que la dispersion de la composante gaussienne représentée par $\sqrt{v_1}$ (Tab. 4.4).

Enfin, l'application de la méthodologie pour différents niveaux de chargement montre que les longueurs de corrélation identifiées ainsi que les décalages fréquentiels f_0 sont indépendants de la déformation macroscopique une fois la plasticité installée ($E_{yy} > 0,5\%$). Cela signifie qu'on pourrait se limiter à *une seule* identification pour *e.g.* $E_{yy} = 3,5\%$ au lieu de la faire à chaque niveau de chargement.

La même procédure est maintenant déroulée pour le champ de contraintes de clivage.

4.5 Identification du champ de contraintes de clivage

4.5.1 Introduction

L'identification des propriétés du champ aléatoire de contraintes de clivage est réalisée suivant la procédure présentée dans la section 4.3. Dans cette section, nous ne présentons que les différences significatives par rapport à l'identification du champ de contraintes principales maximales (Sec. 4.4).

4.5.2 Vérification du caractère gaussien

Les figures 4.42 et 4.43 présentent l'estimation de la densité de probabilité par histogramme et par lissage à noyau gaussien des contraintes de clivage à partir de 40 réalisations du champ (en un point particulier et en 32×32 points) au niveau de déformation macroscopique $E_{yy} = 3,5\%$.

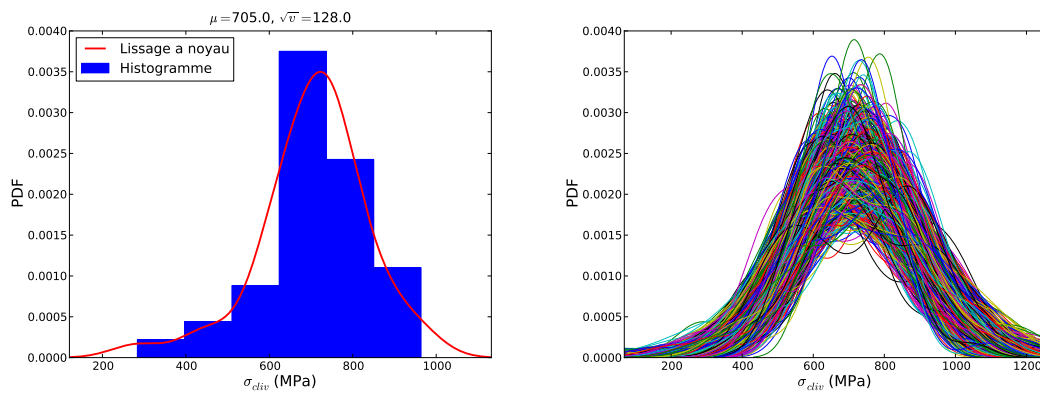


Figure 4.42 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Estimation de la densité de probabilité de 40 valeurs de contraintes aléatoires par histogramme et par lissage à noyau gaussien en un point de la grille à gauche ; aux 32×32 points de la grille à droite

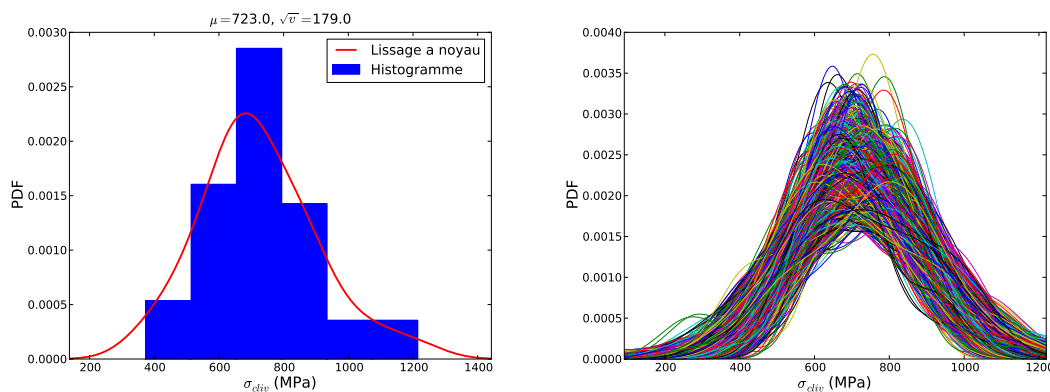


Figure 4.43 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Estimation de la densité de probabilité de 40 valeurs de contraintes aléatoires par histogramme et par lissage à noyau gaussien en un point de la grille à gauche ; aux 32×32 points de la grille à droite

Nous observons sur ces figures que les variables semblent gaussiennes. Cela nous permet de conclure que l'hypothèse de champ gaussien est acceptable pour le champ de contraintes de clivage. La comparaison visuelle avec les figures 4.20 et 4.21 indique que l'hypothèse gaussienne semble encore plus pertinente pour le champ de contraintes de clivage.

4.5.3 Vérification de la stationnarité

Les figures 4.44 et 4.45 montrent le champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ et celui de variance empirique $v_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ estimés à partir de 40 réalisations du champ σ_{cliv} pour les deux cas GF et GA (Eq. (4.8), (4.9)).

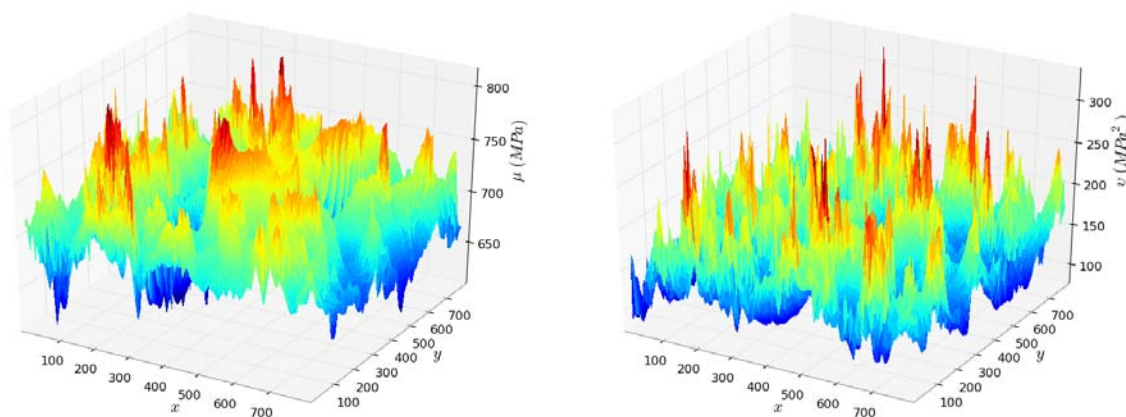


Figure 4.44 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ (à gauche) et champ de variance empirique $v_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ (à droite) de 40 réalisations du champ

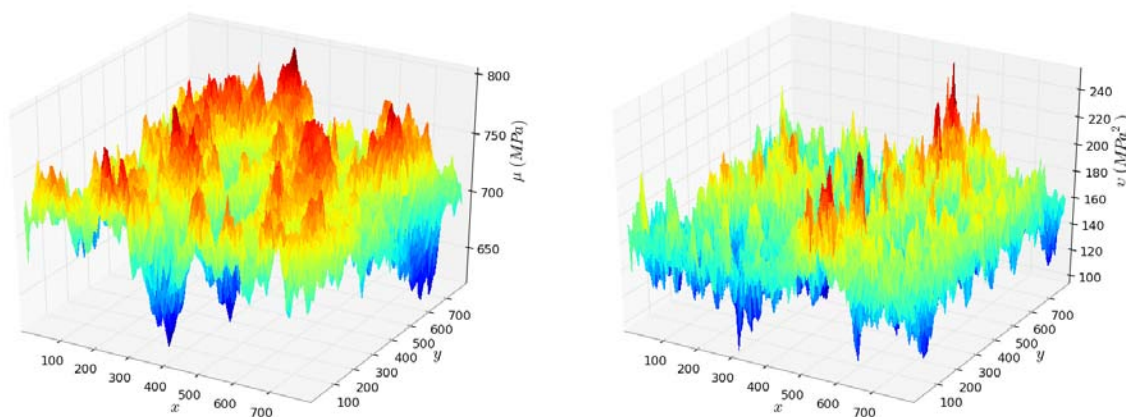


Figure 4.45 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Champ de moyenne empirique $\mu_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ (à gauche) et champ de variance empirique $v_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ (à droite) de 40 réalisations du champ

Nous observons sur ces figures les mêmes phénomènes que pour le champ σ_I . Cela ne nous permet pas de conclure sur la stationnarité du champ. Dès lors, nous calculons les coefficients de variation empiriques pour chacun des champs $\mu_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ et $v_{\sigma_{cliv}}^{ij}$ (Eq. (4.10)-(4.12)). L'évolution de ces coefficients en fonction du nombre de réalisations du champ (Fig. 4.46, Fig. 4.47) montre bien qu'ils tendent vers zéro lorsque le nombre de réalisations augmente et que le cas GA converge plus rapidement que l'autre. L'hypothèse de stationnarité est alors acceptable.

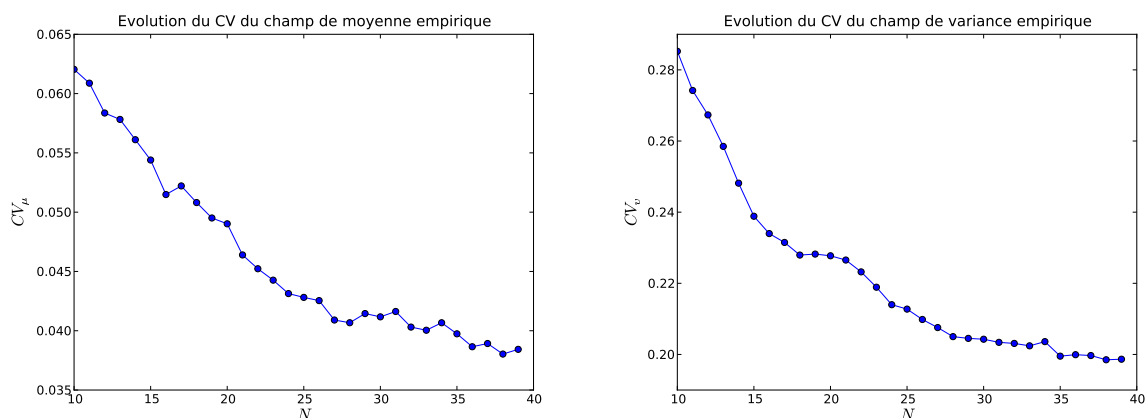


Figure 4.46 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution du coefficient de variation empirique du champ de moyenne empirique CV_μ à gauche et du champ de variance empirique CV_v à droite

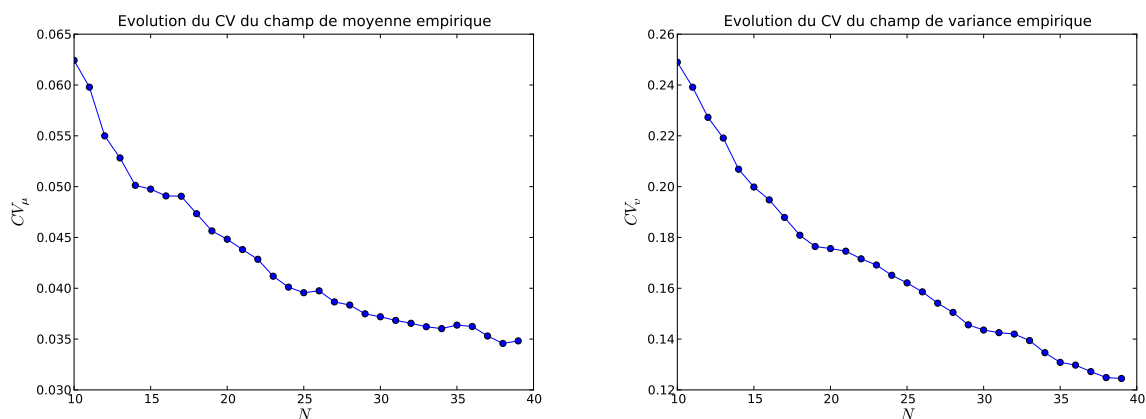


Figure 4.47 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution du coefficient de variation empirique du champ de moyenne empirique CV_μ à gauche et du champ de variance empirique CV_v à droite

4.5.4 Identification à un niveau de chargement

Nous identifions les propriétés du champ de contraintes de clivage à 3,5% de déformation macroscopique. Le périodogramme empirique est calculé à partir de 40 réalisations du champ et est ajusté avec trois modèles de covariance théorique : gaussien, exponentiel et gaussien-exponentiel (“mixte”). Les paramètres identifiés, ainsi que le résidu relatif moyen sont présentés dans le tableau 4.5. La valeur du résidu relatif moyen est le critère d'évaluation quantitative des résultats d'ajustement. Nous observons de nouveau que le modèle “mixte” présente le meilleur accord avec le périodogramme empirique. Cependant, une telle évaluation quantitative ne suffit pas pour évaluer les résultats. Dès lors, des observations qualitatives sont présentées ci-dessous pour confirmer le choix du modèle “mixte”.

Les figures 4.48, 4.49, 4.51 et 4.52 présentent les périodogrammes empiriques et ceux identifiés avec le modèle “mixte”, ainsi que les coupes suivant différentes directions pour les deux cas GF et GA. On observe sur les figures 4.48, 4.49 qu'en général les périodogrammes identifiés représentent bien les périodogrammes empiriques tant au niveau des pics qu'au niveau des longueurs de corrélation suivant les axes. Les coupes (Fig. 4.51, Fig. 4.52) montrent un très bon accord. De plus, les histogrammes des résidus relatifs (Fig. 4.50) montrent que les écarts entre les périodogrammes empirique et identifié sont très petits par rapport à la valeur maximale du périodogramme et que ces écarts se concentrent bien autour de 0.

Partie	Cas Modèle	GF			GA		
		gaussien	exponentiel	mixte	gaussien	exponentiel	mixte
	$\bar{\Delta}$	0,004	0,004	0,002	0,004	0,004	0,002
gaussienne	$\sqrt{v_1}$	91,38	×	59,45	88,25	×	54,93
	l_{x1}	78,92	×	162,6	95,00	×	171,6
	l_{y1}	103,6	×	133,1	105,1	×	138,6
	$f_{x0}^{(1)}$	0,003	×	0,002	0,003	×	0,002
	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	×	0,000	0,000	×	0,000
exponentielle	$\sqrt{v_2}$	×	118,8	91,39	×	116,7	95,31
	l_{x2}	×	58,49	71,02	×	65,69	65,97
	l_{y2}	×	76,91	46,63	×	79,45	53,35
	$f_{x0}^{(2)}$	×	0,003	0,005	×	0,003	0,005
	$f_{y0}^{(2)}$	×	0,000	0,000	×	0,000	0,000

Tableau 4.5 – Cas GF et GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Paramètres identifiés et résidu relatif moyen du périodogramme empirique avec trois modèles théoriques : gaussien, exponentiel et gaussien-exponentiel (“mixte”)

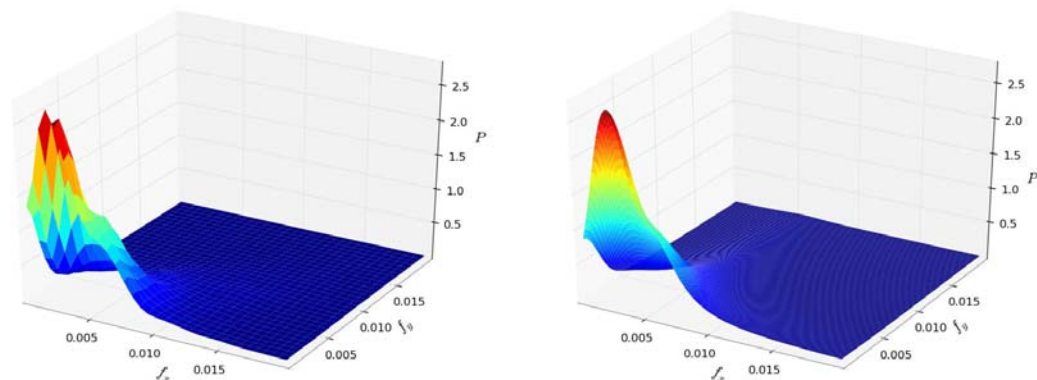


Figure 4.48 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Périodogramme empirique à gauche et périodogramme identifié à droite

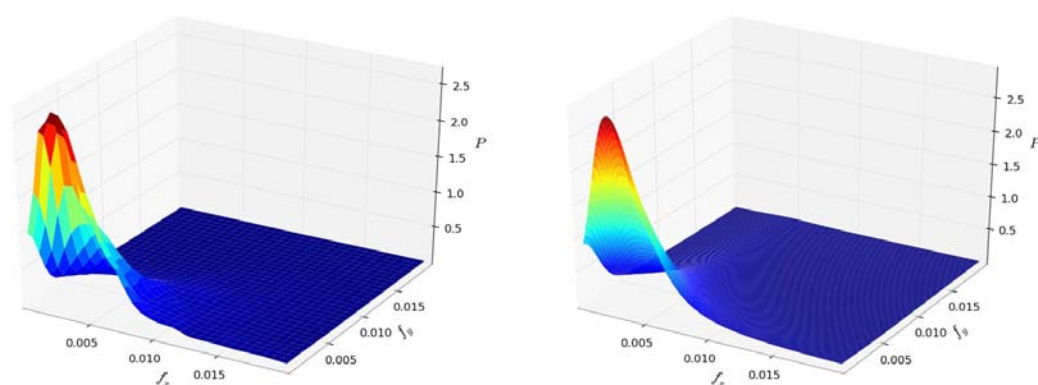


Figure 4.49 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Périodogramme empirique à gauche et périodogramme identifié à droite

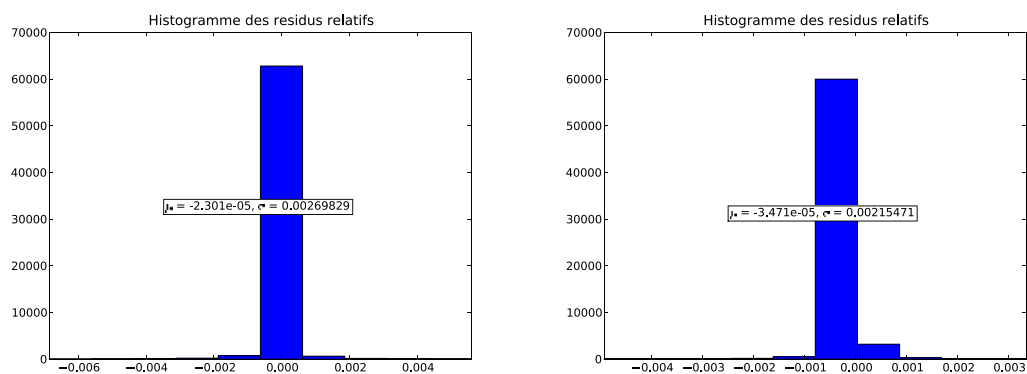


Figure 4.50 – Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Histogramme des résidus relatifs Δ_{ij} : cas GF à gauche et cas GA à droite

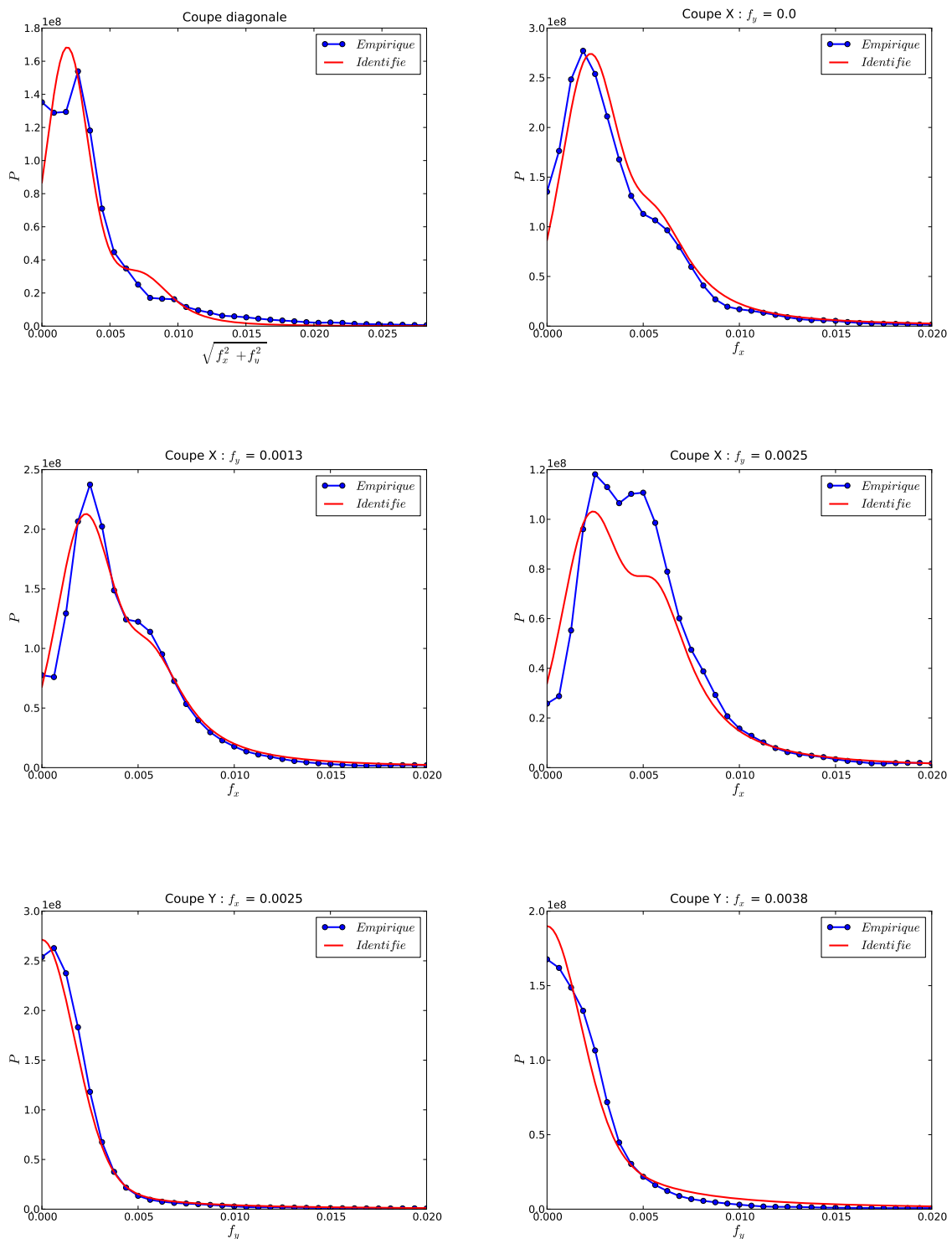


Figure 4.51 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Coupes des périodogrammes empirique et identifié : suivant la direction diagonale ($f_x = f_y$), suivant la direction X ($f_y = 0$, $f_y = 0.0013$, $f_y = 0.0025$) et suivant la direction Y ($f_x = 0.0025$, $f_y = 0.0038$)

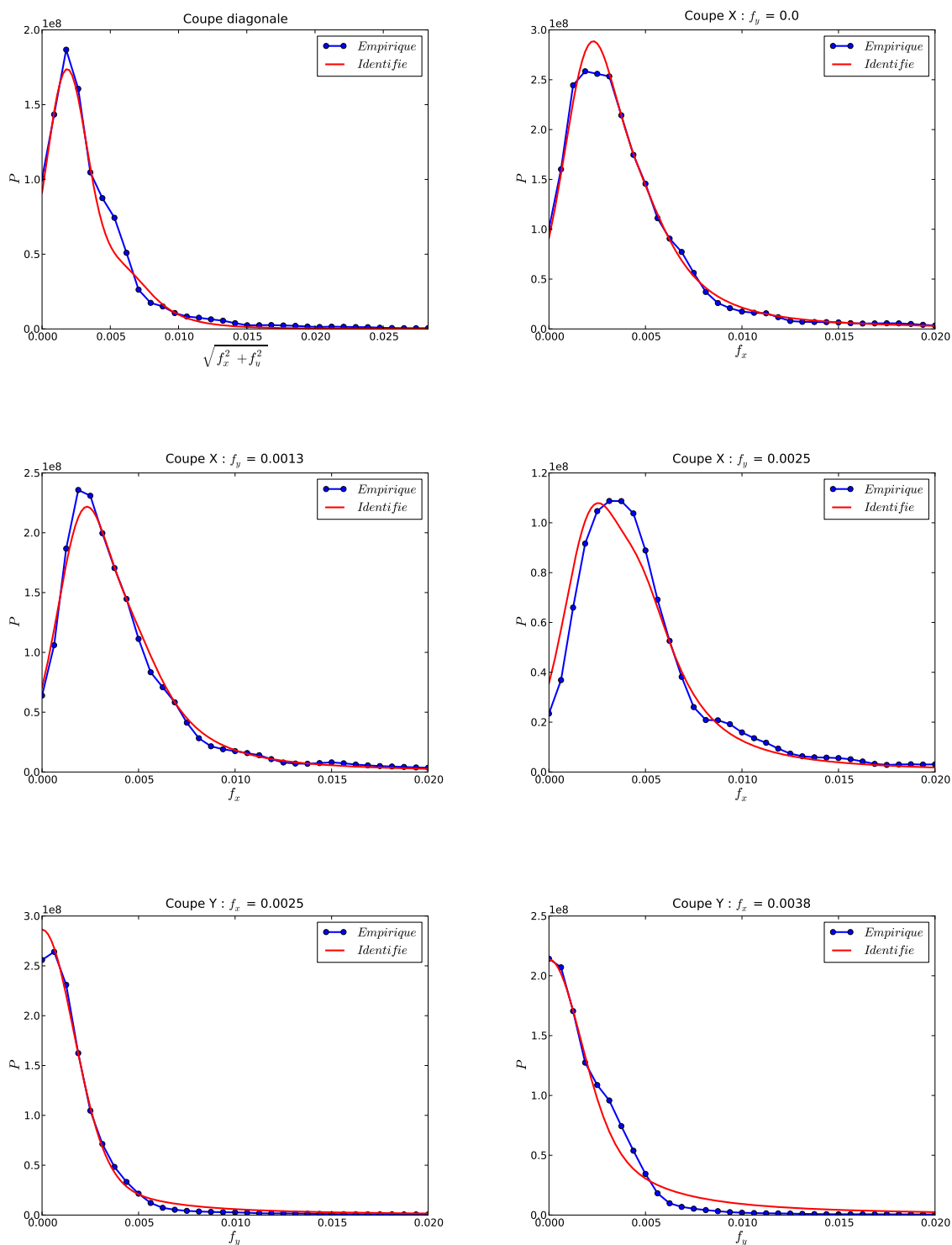


Figure 4.52 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Coupes des périodogrammes empirique et identifié : suivant la direction diagonale ($f_x = f_y$), suivant la direction X ($f_y = 0$, $f_y = 0.0013$, $f_y = 0.0025$) et suivant la direction Y ($f_x = 0.0025$, $f_y = 0.0038$)

Nous calculons dans le tableau 4.6 les paramètres correspondants du champ σ_{cliv} , ainsi que la différence relative de ceux-ci dans les deux cas GF et GA . Rappelons que la variance correspondant du champ est calculée par $v = v_1 + v_2$ et les échelles de fluctuation correspondantes sont calculées selon l'équation (3.12) et le tableau 3.1.

Partie	Paramètres identifiés			Paramètres correspondants			ϵ (%)
	Paramètres	GF	GA	Paramètres	GF	GA	
				$\sqrt{v} = \sqrt{v_1 + v_2}$	109,0	110,0	0,92
gaussienne	$\sqrt{v_1}$	59,45	54,93				
	l_{x1}	162,6	171,6	$\vartheta_{x1} = \sqrt{\pi}l_{x1}$	288,2	304,1	5,52
	l_{y1}	133,1	138,6	$\vartheta_{y1} = \sqrt{\pi}l_{y1}$	235,9	245,7	4,15
	$f_{x0}^{(1)}$	0,002	0,002	$f_{x0}^{(1)}$	0,002	0,002	0,00
	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	0,000	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	0,000	0,00
exponentielle	$\sqrt{v_2}$	91,39	95,31				
	l_{x2}	71,02	65,97	$\vartheta_{x2} = 2l_{x2}$	142,0	131,9	7,11
	l_{y2}	46,63	53,35	$\vartheta_{y2} = 2l_{y2}$	93,30	106,7	14,36
	$f_{x0}^{(2)}$	0,005	0,005	$f_{x0}^{(2)}$	0,005	0,005	0,00
	$f_{y0}^{(2)}$	0,000	0,000	$f_{y0}^{(2)}$	0,000	0,000	0,00

Tableau 4.6 – Cas GF et GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Paramètres identifiés et paramètres correspondants du modèle de covariance mixte : gaussien-exponentiel

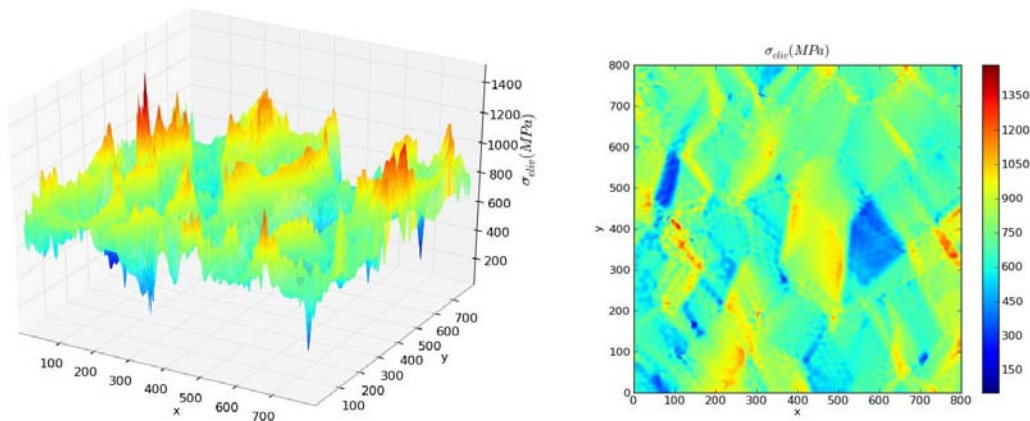


Figure 4.53 – Cas GF - Champ de contraintes de clivage σ_{cliv} à 3,5% de déformation macroscopique

En réalisant les mêmes analyses que pour le champ σ_I (Sec. 4.4.4), nous tirons les mêmes conclusions.

- La fluctuation du champ de contraintes σ_{cliv} se compose de deux parties, *i.e.* une partie dans les grains et une autre aux joints de grains. Celles-ci sont respectivement représentées par la composante gaussienne et la composante exponentielle du modèle de covariance identifié. La deuxième partie est environ 2 fois plus dispersée et varie plus rapidement que la première. Cela est représentée par la plus grande valeur de variance ($\sqrt{v_2} \approx 2\sqrt{v_1}$) et les valeurs plus petites de longueurs de corrélation de la composante exponentielle ($l_{x2} < l_{x1}$ et $l_{y2} < l_{y1}$).
- Suivant la direction Y, la composante fréquentielle principale est la moyenne du champ; tandis que suivant la direction X, ces composantes principales associent aux fréquences $f_{x0}^{(1)} = 0,002$ et $f_{x0}^{(2)} = 0,005$.
- Le rapport relatif des paramètres de la structure spatiale du champ est la même dans les cas GF et GA. Cela est montré par les rapports identiques des longueurs de corrélation correspondantes dans les deux cas, *i.e.* $\vartheta_{x1}^{fixe} / \vartheta_{x2}^{fixe} \approx \vartheta_{y1}^{fixe} / \vartheta_{y2}^{fixe} \approx \vartheta_{x1}^{vari} / \vartheta_{x2}^{vari} \approx \vartheta_{y1}^{vari} / \vartheta_{y2}^{vari} \approx 2,3$.
- Les longueurs de corrélation de la composante gaussienne (de l'ordre de 2 à 3 fois la taille moyenne de grains D_g) représentent la limite de l'interaction entre les 2 ou 3 grains voisins, tandis que celles de la composante exponentielle correspondent à $1 - 1,2 D_g$.
- Les valeurs de l'écart relative ϵ des paramètres entre les cas GF et GA montrent une faible influence de la structure d'agrégats sur la variance (*i.e.* la dispersion) du champ, tandis que l'influence sur les longueurs de corrélation (*i.e.* l'homogénéité) du champ est assez importante (de l'ordre de 14%).

Les figures 4.54 et 4.55 présentent la contribution de chaque partie (gaussienne et exponentielle) au modèle mixte.

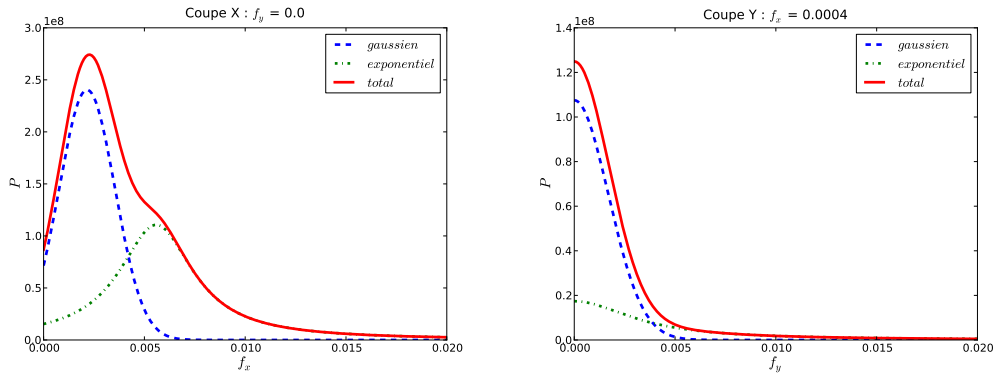


Figure 4.54 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Modèle mixte et ses composantes : Coupes suivant la direction X à gauche et suivant la direction Y à droite

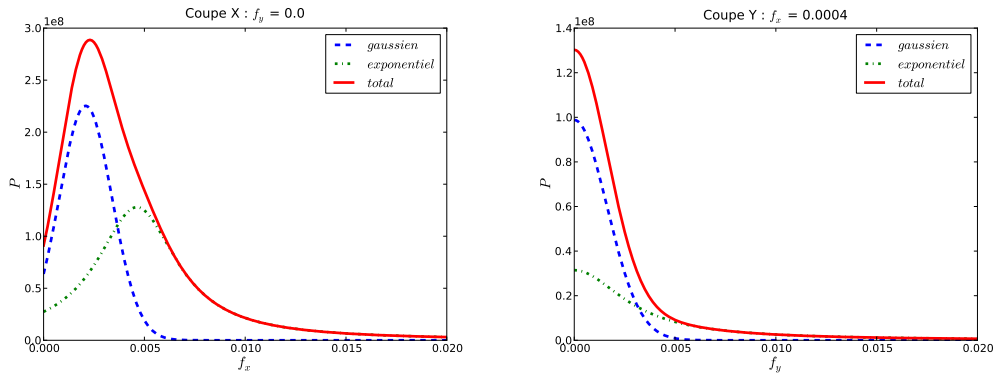


Figure 4.55 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Modèle mixte et ses composantes : Coupes suivant la direction X à gauche et suivant la direction Y à droite

4.5.5 Influence du nombre de réalisation

Les figures 4.56 et 4.57 montrent l'évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ σ_{cliv} , pour les deux cas GF et GA. On observe bien la convergence des paramètres à partir de 25 réalisations. Il existe un ou deux points particuliers, mais ils n'influencent pas le résultat final. Seule la longueur de corrélation l_{y1} semble décroître avec le nombre de réalisations utilisées. Il serait intéressant d'ajouter des calculs pour vérifier sa valeur asymptotique.

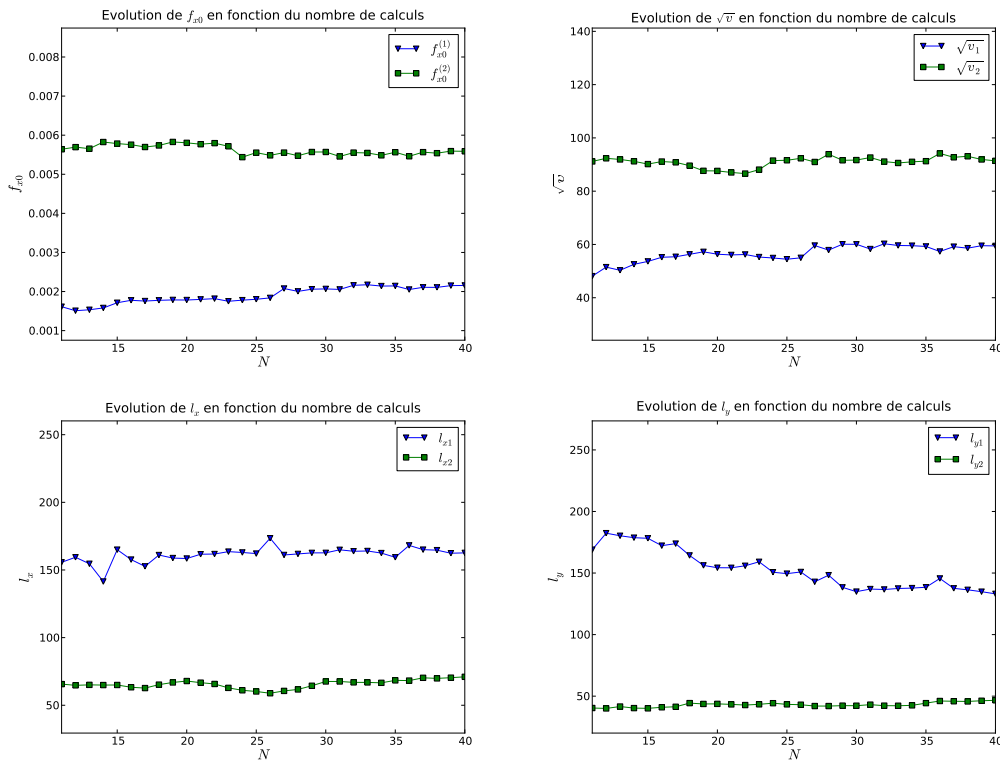


Figure 4.56 – Cas GF - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ

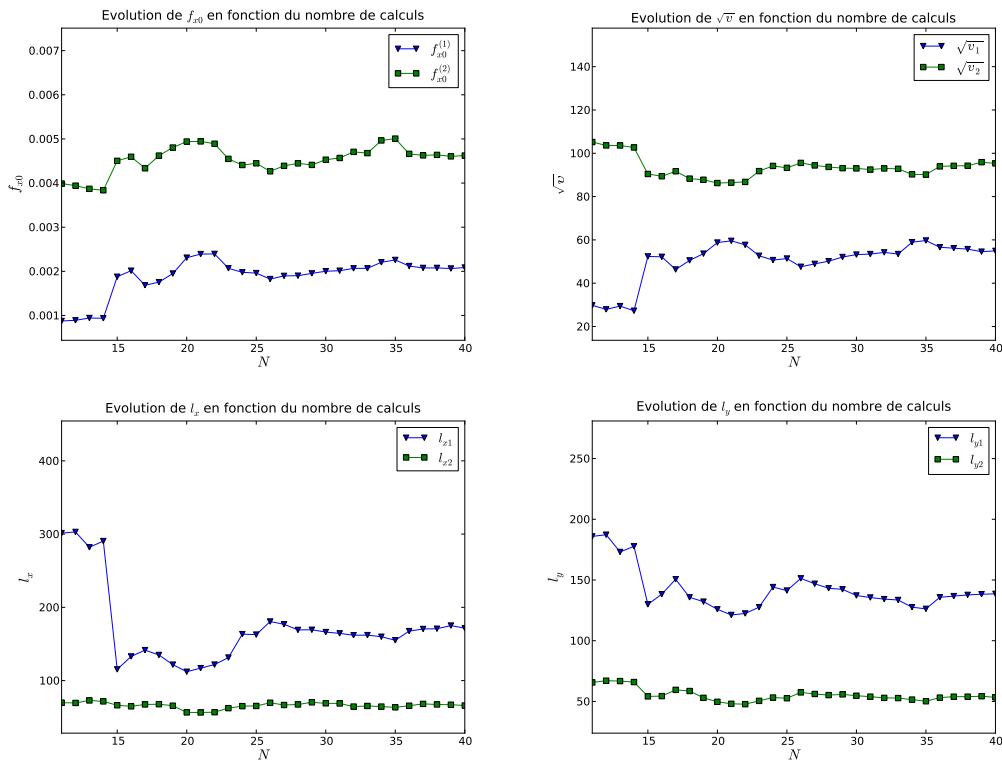


Figure 4.57 – Cas GA - Champ σ_I , $E_{yy} = 3,5\%$ - Évolution des paramètres identifiés en fonction du nombre de réalisations du champ

4.5.6 Influence de la fenêtre et de la finesse de la grille

Cette section présente les études paramétriques sur l'influence de la fenêtre d'observation et de la finesse de la grille. Les résultats sont présentés respectivement sur les figures 4.58, 4.59 et 4.60, 4.61. On tire les mêmes conclusions que celles obtenues dans la section 4.4.6 pour le champ de contrainte principale maximale σ_I .

- Hormis pour les deux modèles simples (rectangulaire et Bartlett), les autres modèles de fenêtre donnent des valeurs des paramètres identifiés identiques. Cela nous permet conserver la fenêtre de Blackman dans l'estimation du périodogramme empirique.
- Les paramètres identifiés convergent dès que la grille est de 64×64 points. Cela montre que la finesse de la grille de 256×256 points utilisée par la suite est suffisamment fine pour représenter les champs de contraintes.

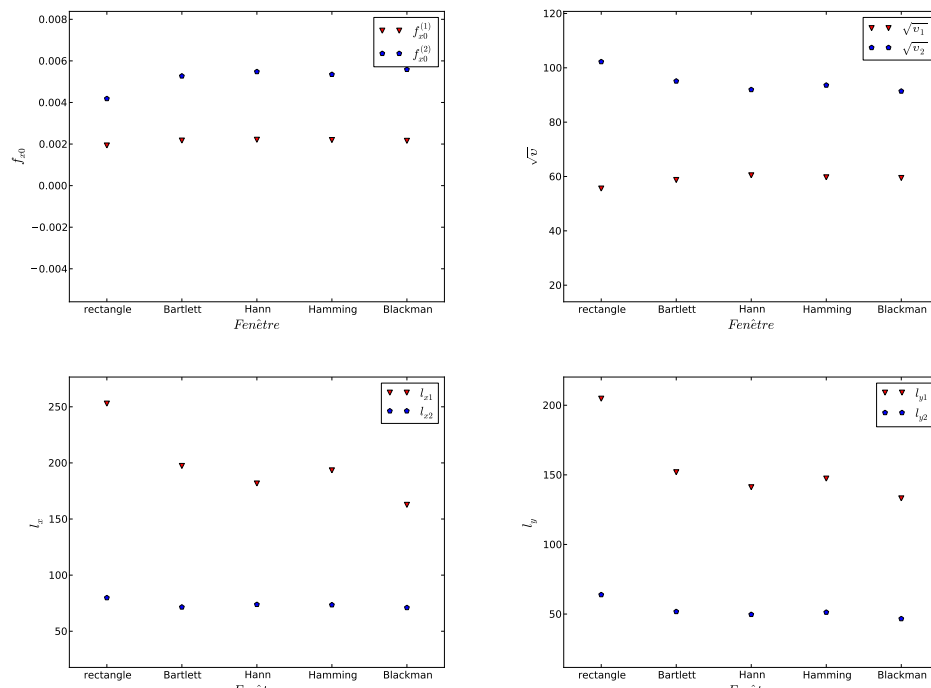


Figure 4.58 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la fenêtre d'observation sur les paramètres identifiés

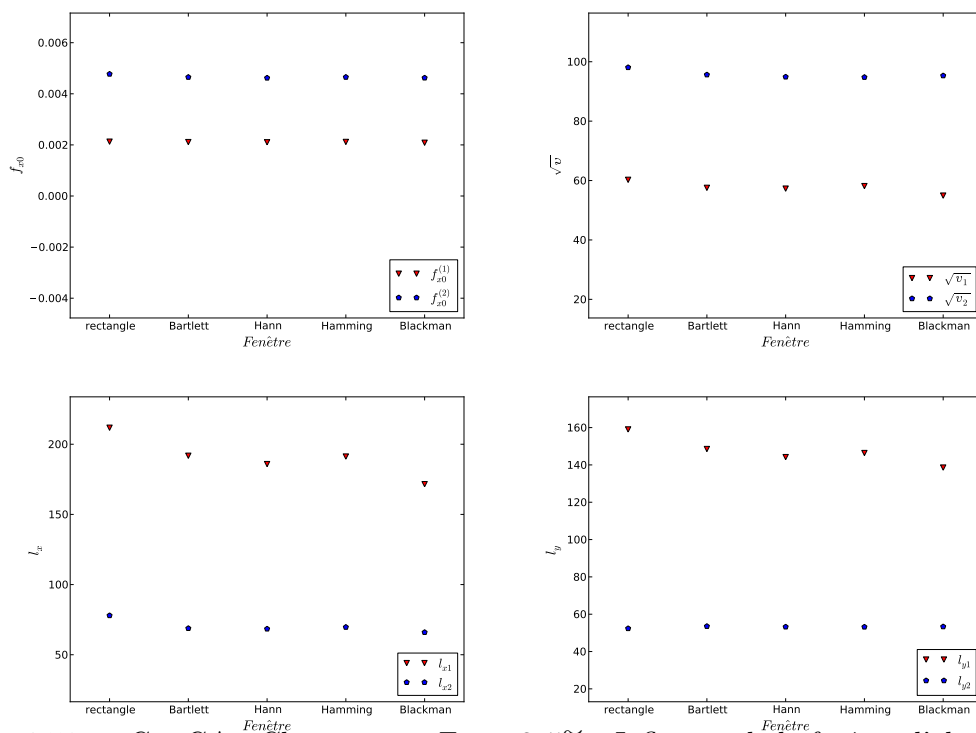


Figure 4.59 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Influence de la fenêtre d'observation sur les paramètres identifiés

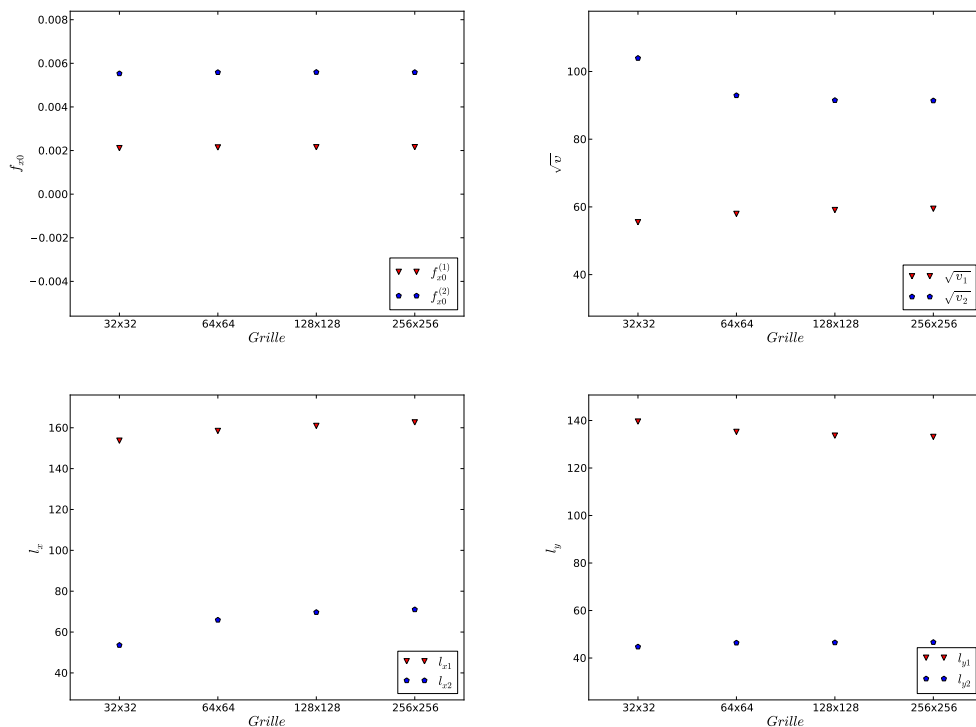


Figure 4.60 – Cas GF - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3, 5\%$ - Influence de la finesse de la grille sur les paramètres identifiés

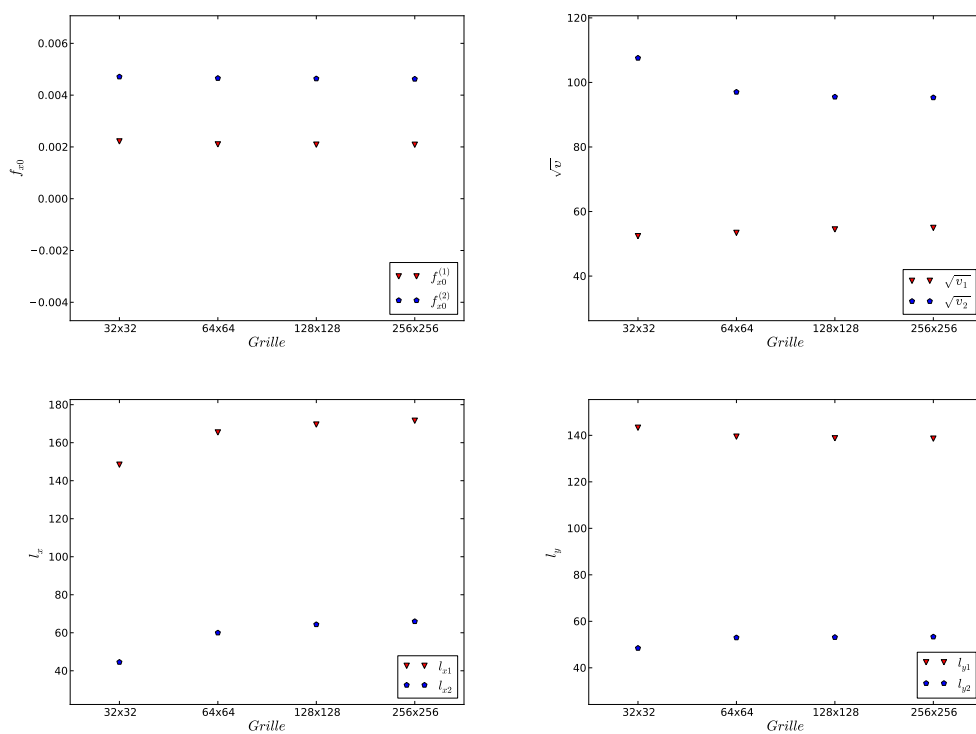


Figure 4.61 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3, 5\%$ - Influence de la finesse de la grille sur les paramètres identifiés

4.5.7 Identification à tous les niveaux de chargement

Les figures 4.62 et 4.63 présentent l'évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique E_{yy} , respectivement pour les cas GF et GA. On observe bien sur ces figures trois étapes d'évolution de déformation du matériau. Comme la contrainte de clivage n'apparaît que lorsque le matériau plastifie, le domaine élastique ($E_{yy} = 0\% - 0,2\%$) du matériau est représenté par les valeurs nulles des paramètres. Dans le domaine de déformation situé entre $0,2\%$ et $0,5\%$, les valeurs des paramètres identifiés sont dispersées. Celui-ci représente le domaine de transition (élasticité-plasticité) du champ σ_{cliv} et est analysé plus en détail ci-dessous. La troisième phase correspond au domaine où la plasticité est installée : les paramètres sont stables.

En observant les courbes relatives à l_y , on constate que dans le cas GF, après un palier stable, l_{y1} diminue, tandis que ce n'est pas le cas pour l_{y1} du cas GA. Notons que les longueurs de corrélation représentent la variabilité spatiale du champ. Le palier stable des paramètres montre l'invariance du champ tant au niveau de la dispersion qu'au niveau de la structure spatiale. La diminution de l_{y1} dans le cas GF vers le niveau de déformation $E_{yy} = 1,5\%$ représente l'augmentation de la variabilité spatiale du champ. Cela montre également que le champ σ_{cliv} dans le cas GA est plus homogène que celui dans le cas GF.

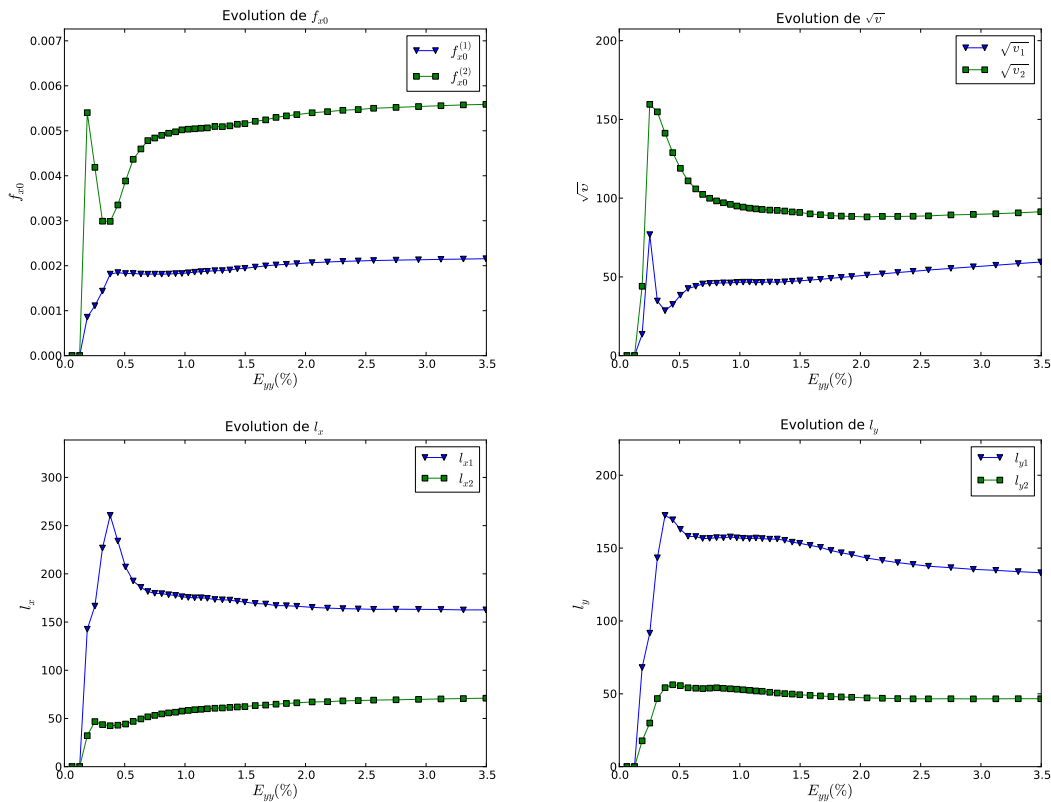


Figure 4.62 – Cas GF - Champ σ_{cliv} - Évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique

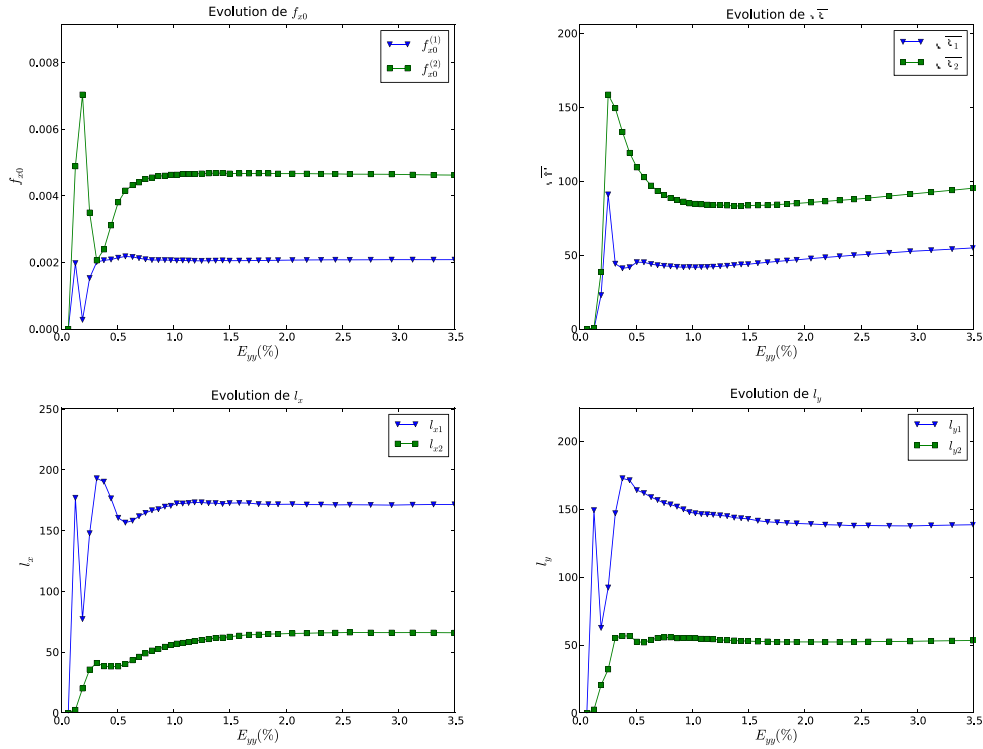


Figure 4.63 – Cas GA - Champ σ_{cliv} - Évolution des paramètres identifiés en fonction du niveau de déformation macroscopique

Il est clair que la contrainte de clivage est fortement dépendante des orientations cristallographiques des grains du matériau. Dans le domaine de transition élasticité-plasticité ($E_{yy} = 0,2\% - 0,5\%$), il est possible que dans la majorité de l'éprouvette, la contrainte de clivage soit nulle et qu'elle soit non-nulle uniquement dans certaines zones. Par exemple, les figure 4.64 et 4.65 représentent le champ σ_{cliv} au niveau de déformation $E_{yy} = 0,18\%$ et $E_{yy} = 0,25\%$. On observe bien les zones “nulles” et celles “non-nulles” du champ. Un tel champ de contraintes ne peut pas être modélisé par un champ aléatoire. Dès lors, les paramètres identifiés dans ce domaine ne sont pas valables. Ce domaine est désormais appelé *domaine de transition*.

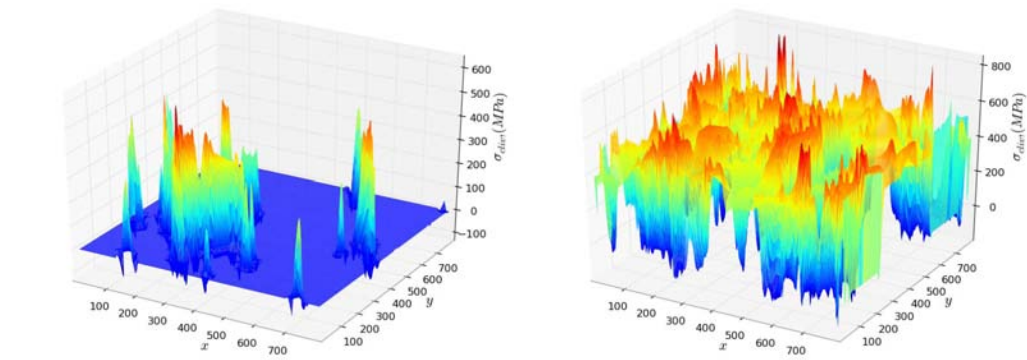


Figure 4.64 – Cas GF - Champ σ_{cliv} - $E_{yy} = 0,18\%$ à gauche et $E_{yy} = 0,25\%$ à droite

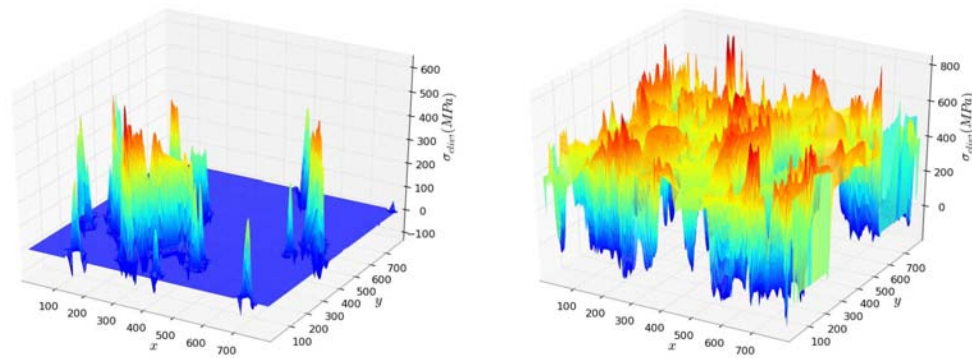


Figure 4.65 – Cas GA - Champ σ_{cliv} - $E_{yy} = 0,18\%$ à gauche et $E_{yy} = 0,25\%$ à droite

4.5.8 Conclusion

Dans cette section, nous avons présenté en détails l'identification du champ de contraintes de clivage en appliquant la procédure présentée dans la section 4.3. Les mêmes études que pour le champ σ_I sont réalisées. Nous retrouvons les mêmes significations physiques que pour le champ de contraintes principales maximales en montrant que le champ σ_{cliv} du cas GA se prête très bien à une modélisation par champ aléatoire gaussien stationnaire. Nous avons également mis en lumière un problème spécifique à l'étude du champ σ_{cliv} , qui n'apparaissait pas pour le champ σ_I : l'existence de zones pour lesquelles cette contrainte σ_{cliv} est identiquement nulle dans le domaine de transition élasticité-plasticité. La procédure d'identification des propriétés utilisées n'est clairement pas en mesure de traiter ce type de situation. Nous allons maintenant comparer les résultats des sections 4.4 et 4.5 relatives à σ_I et σ_{cliv} respectivement.

4.6 Comparaison des résultats d'identification

4.6.1 Introduction

Dans les sections 4.4 et 4.5, nous avons présenté l'identification des propriétés du champ de contraintes principales maximales et du champ de contraintes de clivage en comparant les résultats des cas GF et GA. Dans cette section, nous présentons la comparaison entre deux champs de contraintes σ_I et σ_{cliv} pour chaque cas GF et GA. Nous présentons la comparaison de leurs structures de covariance spatiale et de leurs dispersions. Nous choisissons ensuite le champ de contraintes et le cas de la géométrie pour l'Approche Locale de la rupture mise en œuvre dans le chapitre suivant.

4.6.2 Comparaison des deux champs

Pour comparer les propriétés des deux champ (σ_I et σ_{cliv}), on redéfinit la différence relative d'un paramètre θ quelconque des deux champs par :

$$\epsilon_\theta = \frac{|\theta_{\sigma_{cliv}} - \theta_{\sigma_I}|}{\theta_{\sigma_I}} \times 100 \text{ (\%)} \quad (4.20)$$

On fait ensuite un tableau récapitulatif des paramètres identifiés des deux champs pour tous les cas GF et GA (Tab. 4.7).

Partie	Paramètres	Champ σ_I		Champ σ_{cliv}		ϵ (%)	
		GF	GA	GF	GA	GF	GA
	\sqrt{v}	95,82	97,18	109,0	110,0	13,7	13,2
gaussienne	ϑ_{x1}	308,4	330,0	288,2	304,1	6,50	7,80
	ϑ_{y1}	212,9	226,2	235,9	245,7	10,8	8,62
	$f_{x0}^{(1)}$	0,002	0,002	0,002	0,002	0,00	0,00
	$f_{y0}^{(1)}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00	0,00
exponentielle	ϑ_{x2}	138,6	139,7	142,0	131,9	2,45	5,58
	ϑ_{y2}	89,02	101,1	93,30	106,7	4,81	5,54
	$f_{x0}^{(2)}$	0,005	0,005	0,005	0,005	0,00	0,00
	$f_{y0}^{(2)}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00	0,00

Tableau 4.7 – Cas GF et GA - Champs σ_I et σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Paramètres correspondants du modèle de covariance gaussien-exponentiel - Différence relative ϵ

En observant les valeurs de la variance, on retrouve la conclusion de [Libert \(2007\)](#) que le champ de contraintes de clivage est plus dispersé que le champ de contraintes principales maximales. Cette conclusion est justifiée par une plus grande valeur de l'écart-type du champ σ_{cliv} que celui du champ σ_I ($\epsilon \approx 13\%$) aussi bien dans le cas GF que dans le cas GA.

Les longueurs de corrélation suivant la direction X des deux champs dans tous les cas sont presque identiques ($\epsilon = 2,4\% - 7,8\%$). Les différences des longueurs de corrélations suivant la direction de chargement Y des deux champs sont un peu plus grandes pour la contrainte de clivage ($\epsilon = 5\% - 11\%$). Tenant compte de l'erreur numérique dans l'ajustement des périodogrammes empiriques, nous nous permettons de conclure qu'en terme de corrélation spatiale, les deux champs présentent une structure spatiale remarquablement similaire. Autrement dit, la structure de covariance spatiale estimée à partir de 40 réalisations est représentative pour les deux champs.

Les valeurs des fréquences initiales des deux champs dans tous les cas sont les mêmes. Comme la fréquence principale représente le contenu fréquentiel la plus important du champ, les mêmes valeurs des fréquences initiales montrent que 40 réalisations du champ sont suffisantes pour estimer les contenus fréquentiels principaux représentatives des champs de contraintes.

4.6.3 Conclusion

La comparaison des cas GF et GA, ainsi que des champs de contraintes σ_I et σ_{cliv} dans les sections 4.4, 4.5 et 4.6 montre bien que :

- Le cas GA nous donne les mêmes structures de covariance spatiale des champs de contraintes (σ_I et σ_{cliv}) et cette structure représente bien toute la variabilité spatiale du matériau, tandis que ce n'est pas le cas pour le cas GF.
- Le champ de contraintes de clivage σ_{cliv} est plus dispersé que le champ de contraintes principales maximales σ_I . Cela nous permet de conclure que l'utilisation du champ σ_I dans l'Approche Locale de la rupture donnera des résultats différents de l'utilisation du champ σ_{cliv} et que la géométrie aléatoire est nécessaire dans la modélisation.

4.7 Simulation du champ de contraintes

4.7.1 Introduction

Après avoir identifié les champs de contraintes dans les sections précédentes, cette section présente la simulation des réalisations des champs en utilisant les paramètres identifiés. Grâce à la compatibilité du périodogramme et au temps de calcul réduit, la méthode spectrale est choisie pour la simulation (Chap. 2, Sec. 2.5.4).

On propose ici deux façons pour simuler des réalisations synthétiques. La première utilise directement le périodogramme empirique, tandis que la deuxième utilise le modèle théorique identifié du périodogramme. Nous présentons dans la section 4.7.2 ces deux méthodes de simulation. La section 4.7.3 présente une évaluation des réalisations simulées. Les conclusions sont présentées dans la section 4.7.4.

4.7.2 Simulation par le périodogramme empirique et théorique

Comme indiqué dans la section 2.5.4, la méthode spectrale utilise une discrétisation du périodogramme dans la simulation. Si l'on connaît le modèle de covariance et ses paramètres, on calcule les valeurs du périodogramme sur une grille quelconque. Cependant, le périodogramme empirique estimé à partir des réalisations du champ présente exactement la version discrétisée du périodogramme. Dès lors, il peut être utilisé directement dans la simulation. Notons que l'utilisation du périodogramme empirique ne nous permet de simuler le champ que sur la même grille que celle du périodogramme empirique, tandis qu'avec le périodogramme identifié, nous pouvons simuler le champ sur une grille quelconque.

Les figures 4.66 et 4.67 présentent les réalisations simulées du champ σ_{cliv} avec respectivement le périodogramme empirique et le périodogramme identifié, dans le cas GA, au niveau de déformation $E_{yy} = 3,5\%$. Elles sont mises en comparaison avec les réalisations résultant des calculs aux éléments finis. Visuellement, on observe sur les figures 3D que les réalisations simulées reproduisent bien la forme et les pics de celles des calculs. Sur les figures 2D, on observe bien les zones de forte intensité (zones rouges), ainsi que celles de faible intensité de contraintes (zones bleues). Ces deux zones représentent respectivement les domaines intragranulaire et les joints de grain.

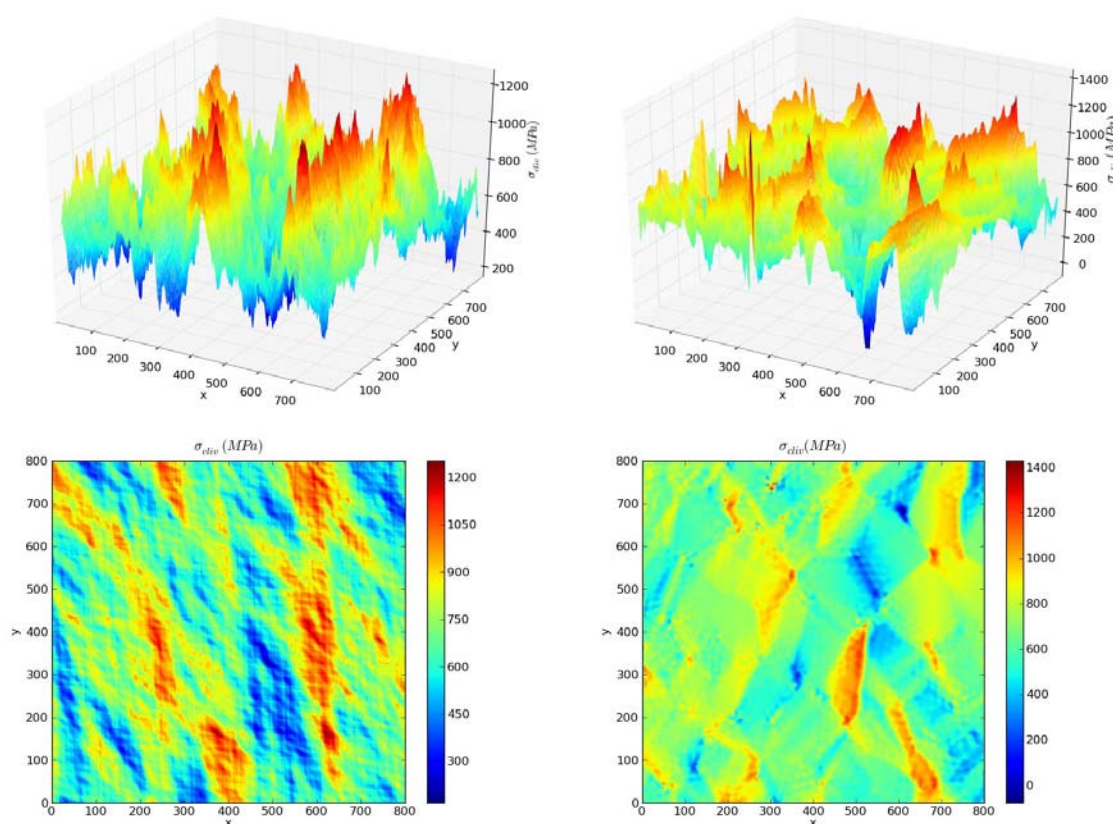


Figure 4.66 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Réalisation simulée avec le périodogramme empirique à gauche et résultat du calcul aux éléments finis à droite

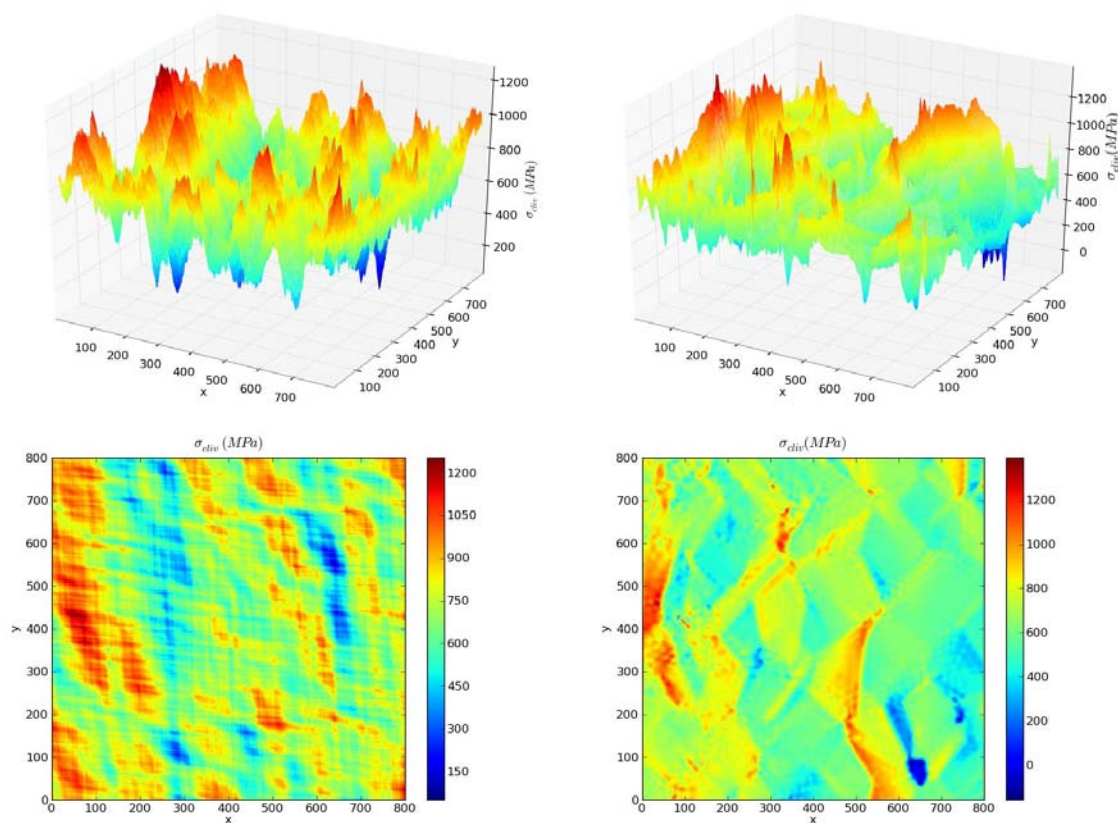


Figure 4.67 – Cas GA - Champ σ_{cliv} , $E_{yy} = 3,5\%$ - Réalisation simulée avec le périodogramme identifié à gauche et résultat du calcul aux éléments finis à droite

4.7.3 Comparaison des courbes de distribution des contraintes

Dans L'Approche Locale de la rupture présentée dans le chapitre 5, la hauteur et le nombre de pics de contraintes présents dans les réalisations jouent un rôle très important dans le calcul de la probabilité de défaillance de l'éprouvette. Dès lors, l'évaluation de la méthodologie proposée ici consiste à comparer des quantités d'intérêt scalaires calculables soit sur les réalisations simulées (RS), soit sur les résultats de calcul aux éléments finis (REF).

La courbe de distribution empirique des valeurs scalaires d'une réalisation est un moyen efficace pour étudier ces deux facteurs. Les figures 4.68 et 4.69 présentent respectivement ces courbes de 40 RS et de 40 REF, ainsi que les courbes moyennes et leurs zooms sur le domaine $[1000 - 1200]$ (MPa) des deux champs. Pour bien observer l'écart entre les courbes, on calcule la différence Δ entre les deux courbes "Calcul EF" et "Identifié" et elles sont tracées en fonction de la contrainte.

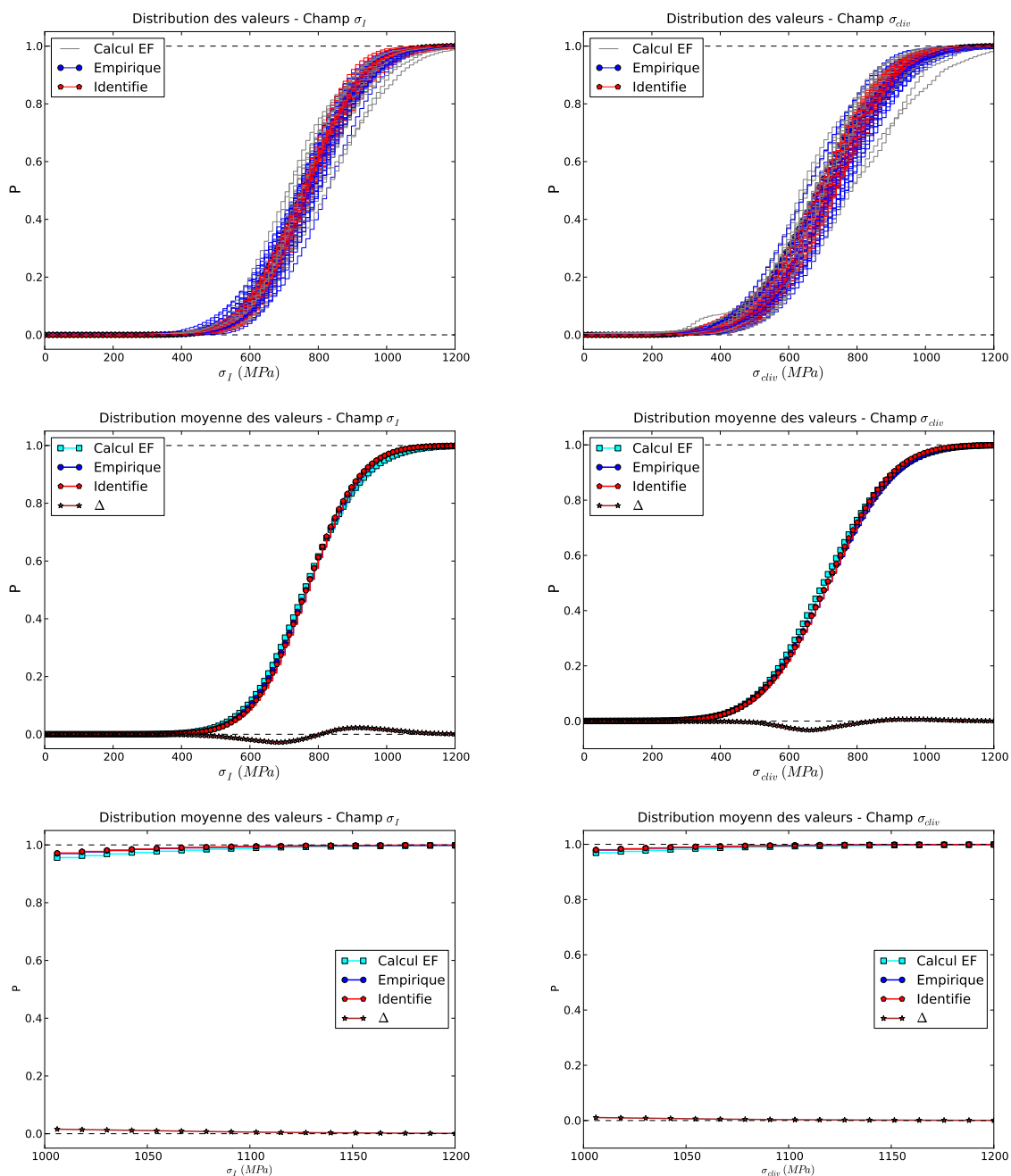


Figure 4.68 – Cas GF - $E_{yy} = 3,5\%$ - Comparaison des réalisations simulées et de référence : σ_I à gauche et σ_{cliv} à droite, 40 courbes (en haut), courbes moyennes (au milieu) et leurs zooms sur le domaine $[1000 - 1200]$ (MPa) (en bas)

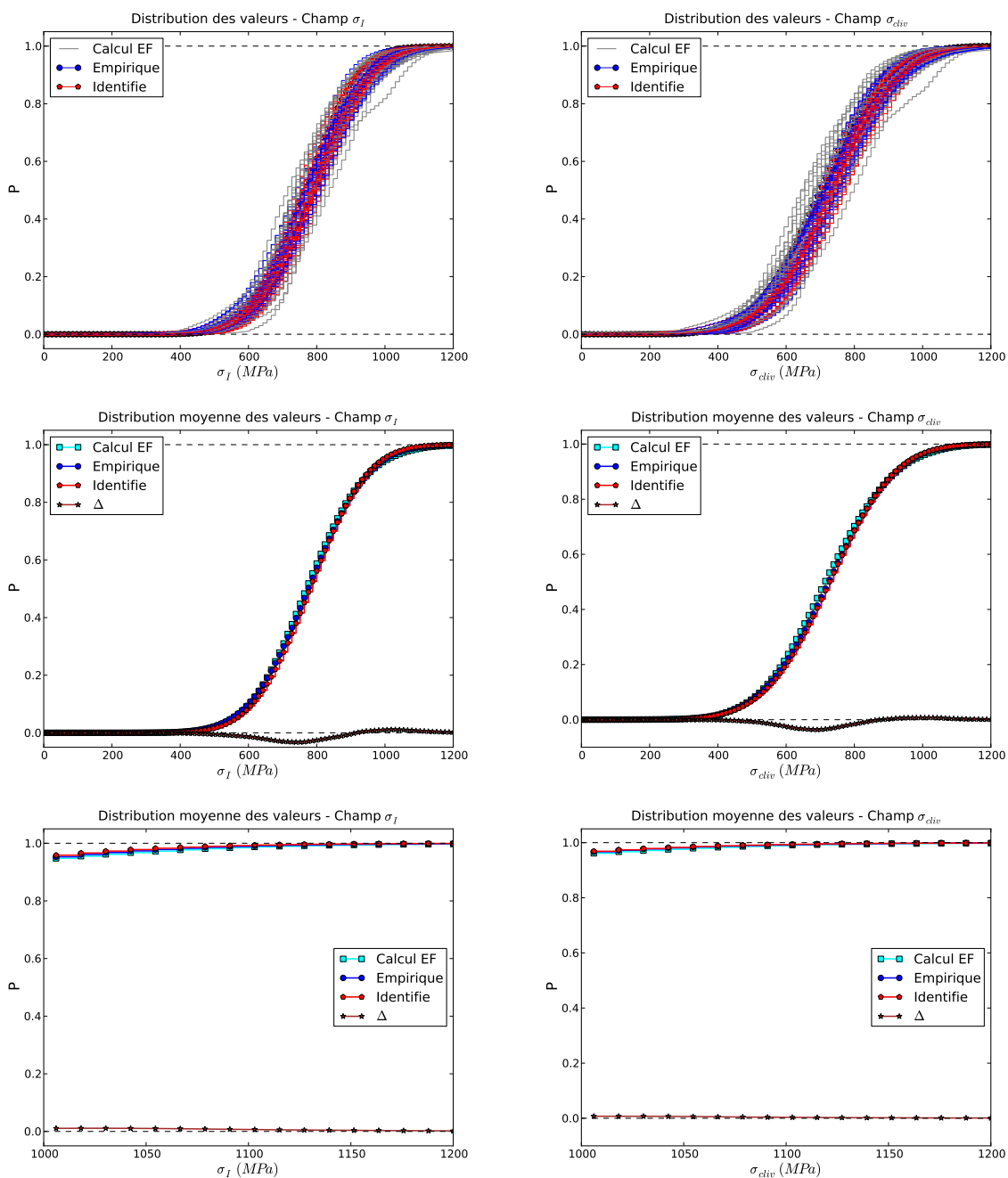


Figure 4.69 – Cas GA - $E_{yy} = 3,5\%$ - Comparaison des réalisations simulées et de référence : σ_I à gauche et σ_{cliv} à droite, 40 courbes (en haut), courbes moyennes (au milieu) et leurs zooms sur le domaine [1000 – 1200] (MPa) (en bas)

On observe bien que les courbes des RS simulées par les deux méthodes de simulations sont collées et qu'elles sont bien centrées dans les courbes des REF. Les RS reproduisent bien la dispersion des courbes de distribution des contraintes des REF. Par ailleurs, la courbe moyenne des RS et celle des REF sont presque superposées. Les courbes de Δ montrent bien cette constatation.

Remarque importante : les courbes tracées sur les figures 4.68 et 4.69 sont similaires dans leur construction à la *fonction de répartition empirique* d'un échantillon de valeurs. Cependant, la notion de fonction de répartition suppose que les points d'échantillon soient des réalisations indépendantes d'une variable aléatoire sous-jacente. Ce n'est pas le cas ici du fait de la corrélation spatiale des champs étudiés. Nous avons donc utilisé le terme de "courbe de distribution empirique" pour bien faire la distinction.

4.7.4 Conclusion

Nous avons fait dans cette section la simulation des champs de contraintes principales maximales et de contraintes de clivage en utilisant les résultats de la procédure d'identification. Nous présentons deux méthodes de simulation basées sur la méthode spectrale. La première utilise directement le périodogramme empirique dans la simulation, tandis que la deuxième utilise le modèle théorique identifié. Les comparaisons des réalisations simulées avec celles résultant des calculs aux éléments finis sont également réalisées. Les différents résultats présentés ici ainsi que les nombreuses autres comparaisons visuelles conduisent à conclure que les réalisations synthétiques simulées représentent bien les champs de contraintes.

4.8 Conclusion

Nous avons décrit jusqu'ici toutes les étapes de la modélisation micromécanique, ainsi que de l'identification des champs de contraintes dans une éprouvette en acier 16MND5 soumise à une traction uniaxiale. Différents champs de contraintes (σ_I et σ_{cliv}), ainsi que différents cas de la géométrie (GF et GA) ont été étudiés et comparés. Les résultats d'identification représentent bien les propriétés physiques du matériau. Ils montrent bien que l'utilisation de la géométrie aléatoire dans la simulation est nécessaire et que les deux champs de contraintes ont une même structure de covariance spatiale mais différents niveaux de dispersion. Cela signifie que l'utilisation du champ σ_{cliv} ou du champ σ_I dans l'Approche Locale de la rupture donnera des résultats différents.

Des réalisations synthétiques des champs ont également été simulées en utilisant les résultats d'identification. L'évaluation des réalisations a ensuite été réalisée en les comparant avec celles résultant des calculs aux éléments finis. Les résultats montrent une bonne cohérence d'ensemble. En conclusion, les résultats obtenus dans ce chapitre nous apparaissent satisfaisants et peuvent être utilisés dans l'Approche Locale de la rupture. C'est l'objet du chapitre suivant.

4.9 Perspectives

Dans le cadre de ce travail, on suppose que les champs de contraintes sont gaussiens stationnaires. Ces hypothèses, comme indiqué ci-dessus, sont acceptables. Mais en réalité,

les champs ne sont pas strictement gaussiens. Dans le cas général, les champs non gaussiens (éventuellement non stationnaires) peuvent être identifiés par les méthodes non-paramétriques développées récemment dans [Soize \(2005, 2010, 2011\)](#); [Guilleminot \(2008\)](#). On se propose de donner ici les principes d'une telle modélisation.

On estime tout d'abord la fonction de covariance $\hat{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ du champ de contraintes $\sigma(\mathbf{x}, \omega)$ à partir des 40 réalisations $\{\mathcal{X}_k = \sigma_k^{ij}(\mathbf{x}); k = 1, \dots, 40; i, j = 1, \dots, 256\}$ du champ. On utilise ensuite le développement de Karhunen-Loève du champ ([Ghanem et Spanos, 2003](#)).

$$\sigma(\mathbf{x}, \omega) = \mu_\sigma(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \xi_i(\omega) \varphi_i(\mathbf{x}) \quad (4.21)$$

où λ_i et $\varphi_i(\mathbf{x})$ sont respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres de la fonction de covariance $\hat{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, résultant du problème aux valeurs propres ci-dessous :

$$\int_{\mathcal{D}} \hat{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \varphi_i(\mathbf{x}') d\mathcal{D}_{\mathbf{x}'} = \lambda_i \varphi_i(\mathbf{x}) \quad \forall i \in \mathbb{N} \quad (4.22)$$

et $\xi_i(\omega)$ sont les variables aléatoires centrées et non-corrélées. Ces variables peuvent être calculées par :

$$\xi_i(\omega) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \int_{\mathcal{D}} [\sigma(\mathbf{x}, \omega) - \mu_\sigma(\mathbf{x})] \varphi_i(\mathbf{x}) d\mathcal{D} \quad (4.23)$$

On calcule maintenant pour chaque réalisation \mathcal{X}_k ($k = 1, \dots, 40$) l'ensemble des variables ξ_i^k selon l'équation (4.23). On obtient donc 40 réalisations pour chaque variable $\xi_i(\omega)$.

De part des propriétés de la décomposition de Karhunen-Loève, ces variables sont orthogonales ($E[\xi_i \xi_j] = \delta_{ij}$, symbole de Kronecker) mais pas indépendantes si le champ sous-jacent est non gaussien. Il est alors nécessaire d'identifier leur loi jointe. Pour ce faire, les variables $\xi_i(\omega)$ sont ensuite développées sur une base de chaos polynomial d'Hermite.

$$\xi_i(\omega) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} \eta_\alpha \psi_\alpha(\boldsymbol{\varsigma}_n) \quad (4.24)$$

où η_α sont les coefficients de projection et $\psi_\alpha(\boldsymbol{\varsigma}_n)$ sont les polynômes d'Hermite de variables aléatoires gaussiennes $\boldsymbol{\varsigma}_n$ (appelées germe).

Le problème posé maintenant est d'estimer la fonction de covariance $\hat{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ et de déterminer les coefficients η_α à partir de 40 réalisations ξ_i^k des variables $\xi_i(\omega)$. Pour le premier problème, dans le cas de champs stationnaires, la méthode du périodogramme présenté dans ce travail de thèse est une bonne méthode pour estimer la fonction de covariance du champ. Le deuxième problème peut être résolu par la méthode de maximum de vraisemblance présentée dans ([Guilleminot, 2008](#)) ou par une approche bayésienne telle que présentée dans [Soize \(2011\)](#).

Probabilité de rupture par clivage à partir des champs simulés

Sommaire

5.1	Introduction	193
5.2	Influence des paramètres sur la probabilité de rupture	193
5.2.1	Introduction	193
5.2.2	Effet de la distribution de la taille des carbures	194
5.2.3	Effet de la taille des grains	195
5.2.4	Effet de la température - Énergie de rupture	196
5.2.5	Effet de la triaxialité	198
5.2.6	Étape critique de la rupture par clivage	198
5.2.7	Conclusion	200
5.3	Construction du modèle	200
5.3.1	Introduction	200
5.3.2	Hypothèses de base	200
5.3.3	Tirage des carbures	201
5.3.4	Approche continue - Approche discrète	204
5.3.5	Comparaison des méthodes de tirage de carbures	205
5.3.6	Comparaison des approches continue - discrète	206
5.3.7	Modèle de l'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes	208
5.3.8	Conclusion	209
5.4	Probabilité de rupture	210
5.4.1	Introduction	210
5.4.2	Probabilité de rupture et intervalle de confiance	210
5.4.3	Influence de la simulation de champ de contraintes	212
5.4.4	Influence de l'utilisation des champs de contraintes	213
5.4.5	Influence du périodogramme utilisé pour simuler les champs	215
5.4.6	Influence de la structure de grains	215
5.4.7	Influence du modèle de distribution de la taille des carbures	216
5.4.8	Études paramétriques	218
5.5	Conclusion	221

5.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons présenté la modélisation micromécanique du matériau, ainsi que la modélisation des champs de contraintes, *i.e.* leur identification (à partir d'un nombre fini de calculs aux éléments finis) et la simulation de nouvelles réalisations synthétiques. Cela constitue la première partie de l'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique (Sec. 1.4). Ce chapitre est consacré à la deuxième partie (*i.e.* la résistance du matériau) et au calcul de la probabilité de rupture du matériau. On se base sur le travail de [Mathieu \(2006\)](#) pour construire notre modèle en y apportant quelques modifications. Le champ de contraintes de clivage σ_{cliv} est choisi pour le calcul de la probabilité de rupture, mais on compare également avec les résultats obtenus en réalisant le champ de contraintes principales maximales σ_I .

Ces études sont réalisées sur l'agrégat polycristallin présenté dans le chapitre 4. Il est nécessaire de préciser la taille de l'éprouvette pour estimer les paramètres des critères de rupture. Selon les observations expérimentales de l'acier 16MND5, la taille de grains est de 20 à 50 μm . Alors, une éprouvette de 100 grains de l'acier 16MND5 (en 2D) doit être de tailles de l'ordre de $500 \times 500 \times 1 \mu\text{m}^3$. Dès lors, la géométrie de taille 1000×1000 sans unité dans le chapitre 4 correspond dans le présent chapitre à une éprouvette de taille $500 \times 500 \times 1 \mu\text{m}^3$.

Ce chapitre commence par une étude bibliographique sur les paramètres influençant la probabilité de rupture du matériau dans la section 5.2. La section 5.3 rappelle les principales étapes du modèle de [Mathieu \(2006\)](#) et présente des propositions de modification. Les comparaisons sont réalisées pour montrer l'effet de ces modifications sur la probabilité de rupture calculée. Le modèle de l'Approche Locale de rupture à l'échelle microscopique par simulation de champ de contraintes de clivage est ensuite présenté. Ce modèle est appliqué dans la section 5.4 pour calculer la probabilité de rupture d'une éprouvette, ainsi que pour réaliser des études paramétriques. Enfin, les conclusions sont présentées dans la section 5.5.

5.2 Influence des paramètres sur la probabilité de rupture

5.2.1 Introduction

Cette section présente les paramètres influençant la rupture par clivage du matériau. Il s'agit des paramètres de microstructure, ainsi que des paramètres de chargement. Nous commençons par la distribution de *taille de carbures* et de *taille de grains*, qui interviennent dans la microstructure dans les sections 5.2.2 et 5.2.3. Ensuite, les sections 5.2.4 et 5.2.5 présentent les paramètres de chargement, *i.e.* la température et la triaxialité. Ces études sur les paramètres nous permettent de choisir les étapes critiques de la rupture par clivage présentées dans la section 5.2.6. Enfin, les conclusions sont tirées dans la section 5.2.7.

5.2.2 Effet de la distribution de la taille des carbures

Comme indiqué dans le chapitre 1, les inclusions de carbures et de sulfure de manganèse précipitées dans l'acier 16MND5 sont principalement responsables du clivage. Cependant, dans notre modélisation à l'échelle microscopique, la probabilité d'existence du sulfure de manganèse est négligeable. Aussi, le nombre de carbures ainsi que leur taille jouent un rôle décisif dans les critères de nucléation et de propagation du clivage. Dès lors, la connaissance de la distribution de taille de carbures est essentielle dans l'étude de l'Approche Locale de la rupture.

Dans les travaux utilisant le modèle de Beremin (1983), la distribution de taille de carbures est classiquement supposée suivre une forme exponentielle. Cette forme de distribution est largement utilisée (Rossoll et al., 1996; Wiesner et Goldthorpe, 1996; Tanguy, 2001; Hausild, 2002) mais celle-ci n'est pas le résultat d'observations expérimentales du matériau. Les paramètres de cette distribution ne sont pas identifiés directement, mais ils sont cachés dans les paramètres σ_u et m du modèle de Beremin.

L'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique nécessite de connaître la taille réelle des carbures. Dès lors, une distribution de taille de carbures construite à partir des observations expérimentales du matériau est nécessaire. Deux distributions principales de taille de carbures sont proposées dans la littérature, l'une (Eq. (5.1)) pour l'acier A508 CL.3 (Lee et al., 2002) et l'autre (Eq. (5.2)) pour l'acier Euro "A" (Ortner et al., 2005), tous deux proches de l'acier 16MND5.

$$\text{Lee : } F_R(r_c) = \mathbb{P}(R < r_c) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{2r_c - 0,00917}{0,10158} \right)^{1,192} \right] \quad (5.1)$$

$$\text{Ortner : } F_R(r_c) = \mathbb{P}(R < r_c) = \exp \left[- \left(\frac{2r_c}{0,072} \right)^{-2,7} \right] \quad (5.2)$$

où $2r_c$ est le diamètre de carbures (en μm) et $a = 0,00197 \mu\text{m}$ est le diamètre minimal de carbure dans le modèle de Lee et al. (2002).

La figure 5.1 présente les résultats d'observations expérimentales (en haut) et leurs modèles théoriques identifiés (en bas). On observe bien que les deux distributions sont relativement proches sauf dans les queues de distributions. La distribution de Ortner et al. (2005) présente une probabilité non-nulle de trouver des carbures de taille $2r_c = 3 \mu\text{m}$, tandis que la taille maximale de carbure observé est de $0,72 \mu\text{m}$ et l'estimation d'une taille possible maximale de $2 \mu\text{m}$. Pour le modèle de Lee et al. (2002), la valeur de probabilité est nulle dès la taille $2r_c = 1 \mu\text{m}$.

Cependant, en réalité il existe une limite de taille de carbures r_{max} pouvant causer la rupture. Les carbures dont la taille est supérieure à r_{max} , sont rompus, puis émoussés dès l'étape de mise en forme du processus métallurgique. Dès lors, selon Mathieu (2006), l'écart entre les queues des deux distributions n'influence pas la probabilité de rupture du matériau. Une étude quantitative est réalisée dans la section 5.4.7 pour mettre en évidence l'influence de cet écart.

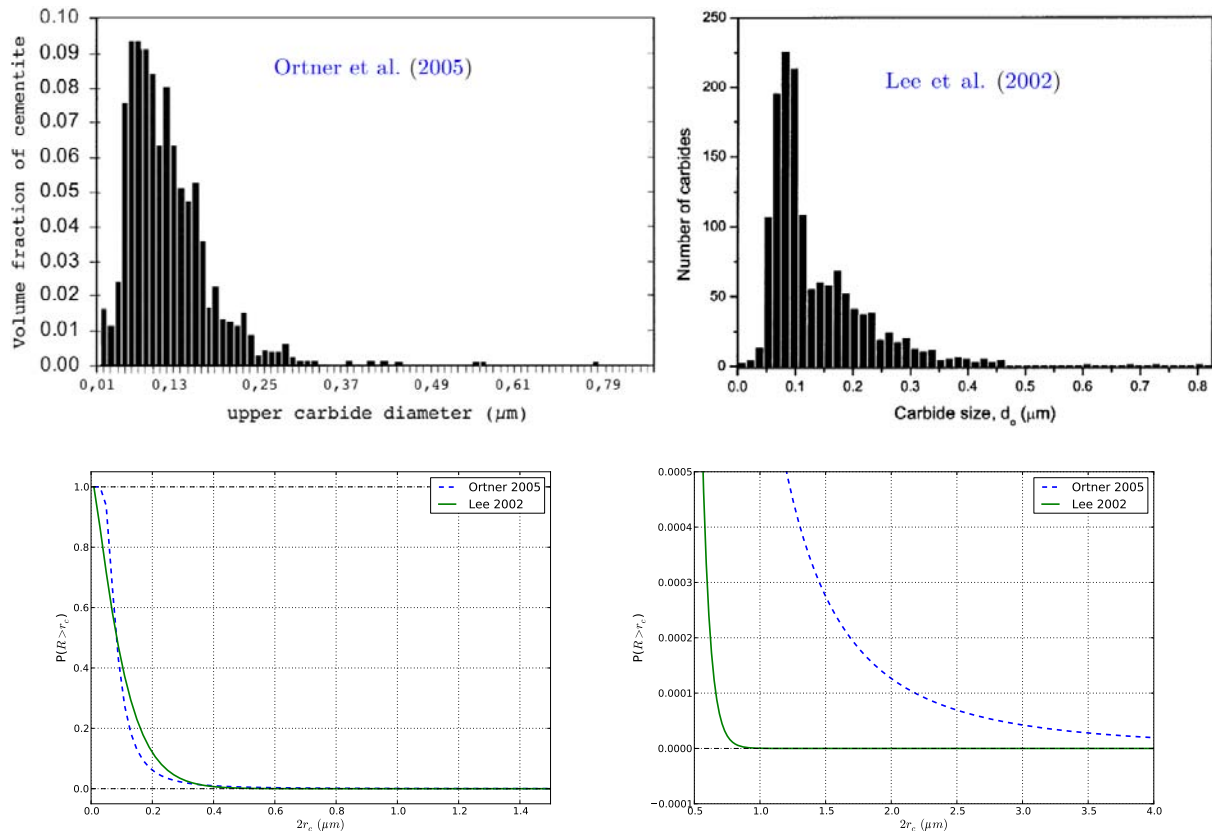


Figure 5.1 – Deux modèles [Lee et al. \(2002\)](#) et [Ortner et al. \(2005\)](#) de distribution de tailles de carbures : Résultats expérimentaux pour l’acier Euro “A” et A508 CL.3 en haut - Modèles identifiés et zoom sur les queues des distributions en bas ([Mathieu, 2006](#))

5.2.3 Effet de la taille des grains

L’effet de la taille des grains sur la rupture par clivage est multiple, tant au niveau de la modélisation micromécanique qu’au niveau de la résistance à la rupture du matériau. L’influence de la taille des grains sur le comportement local du matériau via la limite d’élasticité est étudiée dans [Zeghadi \(2005\)](#) ; c’est l’effet Hall-Petch. D’autre part, en observant les cartographies des champs de contraintes, on montre qu’il existe toujours des concentrations de contraintes aux joints de grains. Dès lors, qualitativement, plus la taille des grains est faible, plus les champs de contraintes présentent des pics aux joints de grains qui favorisent le déclenchement du clivage.

Du point de vue du comportement à la rupture du matériau, [Mathieu \(2006\)](#) montre dans ses travaux bibliographiques que les conclusions sur l’influence de la taille de grains ne sont pas évidentes. [Curry et Knott \(1978\)](#) concluent que la supposée dépendance directe de la contrainte critique d’amorçage de clivage à la taille des grains est un biais d’interprétation. Selon eux, la dépendance de la distribution de taille de carbures aux mêmes paramètres thermo-mécaniques que la taille des grains est l’origine de l’influence de cette dernière sur la rupture du matériau. Au contraire, [Lin et Evans \(1987\)](#) montre dans leurs travaux qu’en

diminuant la taille de grains indépendamment de la taille de carbures, le matériau est plus résistant. Qualitativement, une réduction de taille de grains va augmenter le nombre de joints de grains qui jouent le rôle d'obstacles à franchir pour la propagation des fissures.

5.2.4 Effet de la température - Énergie de rupture

L'influence de la température sur la rupture par clivage intervient de manière multiple. Premièrement, comme le comportement du matériau dépend de la température, le niveau de contraintes dans la structure est influencée par celle-ci. Cette influence est représentée par la dépendance en température des paramètres de la loi de comportement du matériau.

Du point de vue du comportement à la rupture, la température influence la rupture par clivage via l'énergie intervenant à chaque étape du phénomène. L'amorçage du clivage sur un carbure dépend de l'énergie de cohésion surfacique γ_s . La propagation d'un tel défaut amorcé dépend de l'énergie de propagation γ_p . Lorsque la fissure atteint la taille de grains, elle doit franchir le joint de grains pour aller jusqu'à la rupture finale. Cette étape dépend de l'énergie de franchissement du joint de grains γ_b .

Concernant les valeurs de ces énergies, on trouve dans [Blonski et Kiejna \(2004\)](#) une valeur d'environ $\gamma_s = 2,25 \text{ Jm}^{-2}$ calculée par la modélisation moléculaire pour Fe- α . Cette énergie est supposée indépendante de la température. Plusieurs travaux ([Hahn, 1984](#); [Zhang et Knott, 1999](#)) fournissent la valeur de l'énergie de franchissement γ_b de l'ordre de 100 à 120 Jm^{-2} à basse température (environ -100°C). [Libert \(2007\)](#) présente dans ses travaux de thèse un tableau récapitulatif des valeurs de l'énergie de propagation, trouvées dans la littérature (Tab. 5.1).

T($^\circ\text{C}$)	γ_p (Jm^{-2})	Matériau	Référence
T < -60	14	Fe- α	Hahn (1984)
T = -196	12,4	Acier 16MND5	Im et Lee (2004)
T = -80	14	Acier A533B	Zhang et Knott (1999)
T < -60	7	Acier 16MND5	Ortner et al. (2005)
T < -60	4,3 – 10	Acier A533B	Bowen (1984)
-120 < T < -60	9	Acier 16MND5	Hausild (2002)

Tableau 5.1 – Tableau récapitulatif des valeurs de γ_p dans les aciers faiblement alliés ([Libert, 2007](#))

Les auteurs considèrent ces valeurs de l'énergie de propagation comme étant constantes à température associée. Cependant, [Bowen \(1984\)](#) montre que celles-ci dépendent de la température, mais il ne donne pas une représentation synthétique de cette dépendance. [Wallin et al. \(1984\)](#), dans leurs études sur un acier bainitique proche de l'acier 16MND5,

proposent de décomposer l'énergie de propagation en deux composantes, une composante athermique d'énergie de cohésion surfacique γ_s et une contribution des mécanismes de plasticité w_p .

$$\gamma_p = \gamma_s + w_p \quad (5.3)$$

Le terme w_p dépend de la température et par méthode inverse, Wallin et al. (1984) trouvent une formule analytique de la dépendance de γ_p en fonction de la température ci-dessous.

$$\gamma_p(T) = 2,15 + 1,77 \exp(0,0104 T) \quad (5.4)$$

où T est la température de Kelvin : $T(K) = T(^{\circ}C) + 273,15$.

Mathieu (2006) montre que cette formule ne correspond pas à l'acier 16MND5. Il garde sa forme mais actualise les paramètres en utilisant les valeurs données dans la littérature pour l'acier 16MND5. Il considère les valeurs $\gamma_p = 7 \text{ Jm}^{-2}$ (Ortner et al., 2005) et $\gamma_p = 12,4 \text{ Jm}^{-2}$ (Im et Lee, 2004) comme les bornes inférieure et supérieure du mécanisme de clivage correspondant à une température de $-150^{\circ}C$ à $-50^{\circ}C$. La valeur de γ_p à $T = 0 \text{ K}$ est égale à celle du modèle de Wallin et al. (1984) ($\gamma_p = 3,9 \text{ Jm}^{-2}$). Ces trois valeurs sont ensuite utilisées pour identifier les paramètres (Eq. (5.5)). La figure 5.2 présente la comparaison des deux modèles.

$$\gamma_p(T) = 2,15 + 1,53 \exp(0,009 T) \quad (5.5)$$

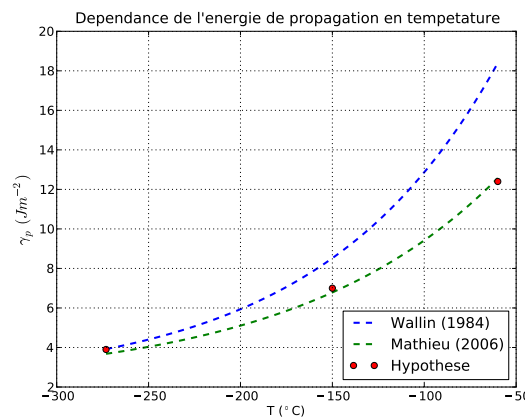


Figure 5.2 – Dépendance de l'énergie de propagation γ_p en fonction de la température, selon Wallin et al. (1984) et Mathieu (2006)

On observe que les valeurs de γ_p du modèle de Mathieu (2006) sont plus faibles que celles du modèle de Wallin et al. (1984). Cependant, notons bien que malgré l'utilisation des valeurs disponibles dans la littérature pour identifier des paramètres, Mathieu (2006) a supposé $\gamma_p = 12,4 \text{ Jm}^{-2}$ à $-60^{\circ}C$ tandis que selon Im et Lee (2004), cette valeur est associée à température $-196^{\circ}C$.

5.2.5 Effet de la triaxialité

Le chargement influence fortement la probabilité de rupture du matériau. Plus le niveau de chargement est grand, plus la probabilité de rupture est grande. Par ailleurs, non seulement le niveau de chargement mais aussi sa triaxialité influencent la rupture du matériau. Cependant, l'influence de ce paramètre est complexe et ne peut pas être expliquée qualitativement. De nombreux travaux utilisant le modèle de Beremin (Rossoll et al., 1996; Milella et Bonora, 2000; Tanguy, 2001), ont essayé d'étudier l'influence de ce paramètre. Mais les limites de ce modèle ne permettent pas aux auteurs de tirer des conclusions synthétiques et significatives.

Dès le développement de l'Approche Locale à l'échelle microscopique, Mathieu (2006) confirme cette influence. Il réalise des modélisations avec différents niveaux de triaxialité. Ensuite, il identifie les paramètres du modèle de Beremin à partir de ses résultats. Il conclut que les paramètres du modèle de Beremin augmentent avec le niveau de triaxialité (Fig. 1.8). Ces conclusions sont également tirées dans Libert (2007).

5.2.6 Étape critique de la rupture par clivage

Comme indiqué dans le chapitre 1, la rupture par clivage se compose de deux étapes principales : germination et propagation. On suppose que le clivage suit le modèle de Smith. Les défauts sont amorcés par la rupture des carbures sous l'action de la déformation plastique. Ces défauts de taille celle des carbures sont propagés ensuite sous l'action de contraintes de chargement. Lorsqu'ils rencontrent des obstacles microstructuraux (*e.g.* joints de grains, joints de paquets de lattes), ils doivent les franchir. L'étape d'amorçage est contrôlée par un seuil de déformation plastique équivalente ε_p^{min} , tandis que les deux autres étapes sont modélisées par le critère de Griffith.

Mathieu (2006) dans ses travaux, calcule la contrainte de Griffith pour propager une fissure (σ_c^p) et pour que celle-ci puisse franchir des obstacles (σ_c^f) dans des larges plages de valeurs admissibles d'énergie de rupture et de taille de défauts (Fig. 5.3).

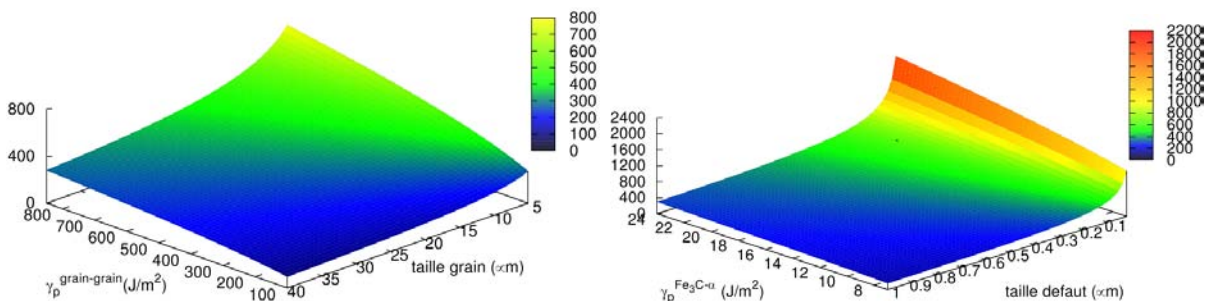


Figure 5.3 – Contrainte de Griffith pour le franchissement des barrières microstructurales (joints de paquets) σ_c^f à gauche et pour la propagation d'une fissure σ_c^p à droite (Mathieu, 2006)

Il observe que pour l'acier 16MND5, la contrainte critique pour la propagation d'une fissure est toujours supérieure à la contrainte nécessaire pour le franchissement des obstacles microstructuraux (joints de paquets). Cette conclusion n'est pas valable pour les matériaux ayant une taille de paquets de lattes faible comme ceux étudiés dans Lambert-Perlade (2001). Il conclut que pour l'acier 16MND5, les étapes de germination et de propagation de la fissure sont les étapes critiques de la rupture. Alors, les critères de rupture sont les suivants :

$$\begin{cases} \varepsilon_p^{eq} > \varepsilon_p^{min} \\ \sigma_{cliv}^{max} > \sigma_c^p \end{cases} \quad (5.6)$$

Cependant, en réalisant les études paramétriques avec différents niveaux de $\varepsilon_p^{min} = 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}$, Mathieu (2006) montre une superposition des courbes de probabilité de rupture de ces différents cas (Fig. 5.4). Il conclut que le critère sur ε_p^{min} n'est pas vraiment pertinent. Cela peut s'expliquer par le fait que les points où se propagent les fissures voient des niveaux de contrainte élevés. L'activité plastique est souvent forte. Le critère de déformation plastique minimale est automatiquement satisfait quelque soit le seuil ε_p^{min} retenu.

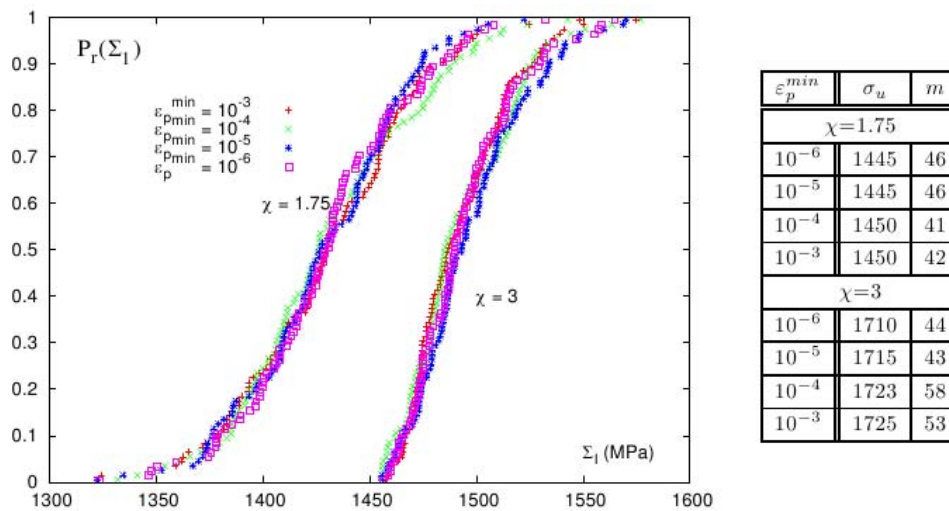


Figure 5.4 – Influence du niveau de déformation plastique équivalente minimale sur la probabilité de rupture pour deux niveaux de triaxialité (Mathieu, 2006)

Dans notre travail, comme évoqué dans le chapitre 4, les résultats d'identification dans le domaine de transition élasticité-plasticité ne sont pas valables. On ne considère ici que les résultats dans le domaine de plasticité, *i.e.* lorsque le matériau plastifie totalement. Le critère de déformation plastique équivalente minimale est alors moins important et *est supposé toujours satisfait*. De plus, la structure des paquets de lattes n'est pas prise en compte. Le critère de rupture unique retenu dans la suite de notre analyse est donc :

$$\sigma_{cliv}^{max} > \sigma_c^p \quad (5.7)$$

5.2.7 Conclusion

Nous avons fait dans cette section une brève étude bibliographique sur les paramètres gouvernant la rupture par clivage de l'acier 16MND5. Les paramètres intervenant sur le critère de rupture sont étudiés tour à tour. Nous avons également choisi les étapes critiques de la rupture en utilisant les résultats des travaux précédents. Tout cela nous aide à la construction du modèle présenté dans la section suivante.

5.3 Construction du modèle

5.3.1 Introduction

Il s'agit ici de choisir les hypothèses de base sur lesquelles sont établies le critère de rupture par clivage, ainsi que de construire la procédure pour calculer la probabilité de rupture. Notre approche est construite en se basant sur le modèle de [Mathieu \(2006\)](#) présenté dans la section 1.4.2.

Dans un premier temps, nous présentons les hypothèses de base pour la construction du modèle dans la section 5.3.2. Ensuite, nous présentons en détail les étapes principales de la démarche utilisée par [Mathieu \(2006\)](#) et pour chacune, nous proposons des modifications qui nous semble pertinentes (Sec. 5.3.3, Sec. 5.3.4). Puis, dans les sections 5.3.5 et 5.3.6, nous présentons des résultats pour illustrer l'influence de ces modifications. A partir des conclusions tirées dans les comparaisons, nous construisons notre modèle de l'Approche Locale de la rupture dans la section 5.3.7.

5.3.2 Hypothèses de base

Les hypothèses de base de ce modèle s'appuient sur celles de [Mathieu \(2006\)](#) (voir Sec. 1.4.2). Nous prenons en compte les résultats de ses travaux (Sec. 5.2.6) pour ajouter des hypothèses simplificatrices détaillées ci-dessous :

- H1 : Les inclusions de carbures sont les seules responsables de l'amorçage de clivage de l'acier 16MND5. Le clivage est amorcé par la rupture d'une inclusion de carbure selon le modèle de Smith (Sec. 1.2.2.5). Le critère de déformation plastique équivalente minimale pour l'amorçage du clivage est supposé *toujours satisfait*.
- H2 : Les inclusions de carbures sont supposées réparties sur un ensemble de points discrets (*e.g.* les nœuds d'une grille, les points de Gauss des éléments finis). Le nombre moyen de carbures n_{car} en un point est calculé par le nombre total de carbures M_{car} divisé par le nombre de points considérés N_{pts} . La distribution de taille de carbures suit le modèle de [Ortner et al. \(2005\)](#).
- H3 : Le clivage se produit principalement dans les plans de la famille $\{100\}$ (Sec. 1.2.2.1). Sa propagation est contrôlée par le critère de Griffith (Sec. 1.2.2.2)

sous l'action de la contrainte de clivage maximale σ_{cliv}^{max} qui est définie comme étant le maximum des projections du tenseur de contraintes sur les plans de la famille $\{110\}$. Ce champ de contraintes de clivage maximale est appelé champ de contraintes de clivage et noté σ_{cliv} .

- H4 : L'étape de propagation d'une fissure amorcée est l'étape critique de la rupture. Le critère de rupture est alors présenté par l'équation (5.7), où le terme σ_{cliv}^{max} est remplacé par σ_{cliv} . La contrainte critique de propagation σ_c^p est calculée par le critère de Griffith (Eq. (1.2)) et désormais appelée simplement contrainte critique, notée par σ_c .

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi E \gamma_p}{2(1 - \nu^2)r_c}} \quad (5.8)$$

où

γ_p est l'énergie de propagation.

E est le module d'Young.

ν est le coefficient de Poisson.

r_c est la taille de carbures.

- H5 : Il existe une taille de carbures maximale r_{max} , au delà de laquelle les fissures amorcées sont émoussées plutôt que propagées.
- H6 : Comme le niveau maximal de déformation macroscopique dans les calculs polycristallins de 3,5% est assez faible, le choix de la valeur de l'énergie de propagation γ_p de l'ordre de 7 – 12,4 Jm⁻² donnera toujours une probabilité de rupture nulle. Dès lors, pour la démonstration de la méthodologie, on suppose dans ce travail la valeur de γ_p de l'ordre de 0,5 – 2 Jm⁻².

5.3.3 Tirage des carbures

Le tirage des carbures se compose de deux étapes. La première consiste à tirer le nombre de carbures en chaque point N_c . La deuxième a pour but de tirer la taille r_c pour chaque carbure en chaque point. Comme la rupture est contrôlée par le critère de Griffith, plus la taille de carbure est grande, plus la contrainte critique correspondante est petite. Dès lors, en chaque point, parmi les carbures tirés, il est nécessaire de vérifier le critère (5.7) uniquement pour celui dont la taille est maximale.

Pour le tirage du nombre de carbures en chaque point, la seule information disponible est le nombre moyen de carbures n_{car} . Le nombre moyen de carbures dans une unité volumique $\mu_{car} = 7,6 \times 10^{17}$ (carbures/m³) de l'acier 16MND5 est tiré de [Ortner et al. \(2005\)](#). Le nombre moyen de carbures en chaque point est alors calculé par :

$$n_{car} = \frac{M_{car}}{N_{pts}} = \frac{\mu_{car} V}{N_{pts}} \quad (5.9)$$

où n_{car} est le nombre moyen de carbures en chaque point, M_{car} est le nombre total de carbures dans le volume V de l'éprouvette et N_{pts} est le nombre de points considérés.

Mathieu (2006) propose dans ses travaux de thèse de tirer le nombre de carbures en chaque point selon la loi normale de moyenne n_{car} et d'écart-type 4. Comme la valeur du nombre de carbures doit être supérieure ou égale à 0, lorsque le nombre tiré est négatif, il retient une valeur nulle. Les nombres tirés sont arrondis pour obtenir des nombres entiers. Ce tirage est appelé *tirage normal* (N).

On constate que le tirage du nombre de carbures selon une loi normale alors que l'on ne connaît que la moyenne de la distribution est arbitraire. De plus, retenir une valeur nulle pour les nombres tirés négatifs entraîne une augmentation artificielle du nombre total de carbures tirés. L'écart-type de 4 est également arbitraire.

On propose dans la suite de ce mémoire donc le tirage du nombre de carbures selon la loi de Poisson pour des raisons suivantes. Premièrement, cette loi décrit le comportement du nombre d'événements dans un laps de temps fixé qui est identique au nombre de carbures dans l'éprouvette de l'épaisseur fixé à 1 μm . Deuxièmement, elle nécessite de connaître la moyenne comme seule information pour définir complètement le tirage. Troisièmement, le tirage selon cette loi donne des nombres entiers non négatifs. Ce tirage est désormais appelé *tirage de Poisson* (P).

Pour le tirage de taille de carbures, en chaque point et pour chaque carbure, Mathieu (2006) tire une taille selon le modèle de Ortner et al. (2005). Comme la valeur de taille de carbures doit être inférieure ou égale à r_{max} , lorsque la taille tirée est supérieure à la taille maximale r_{max} , il retient la valeur r_{max} . Une telle méthode de troncature entraîne une concentration importante, indésirable des valeurs r_{max} tirées et n'est pas une bonne méthode de tirages des variables aléatoires tronquées. Ce tirage est désormais appelé *tirage non-tronqué* (NT).

La bonne méthode pour tirer des variables aléatoires tronquées est la méthode du rejet. La taille de carbure r_c est tiré selon sa loi tronquée du modèle de Ortner et al. (2005) présentée par l'équation (5.10). Lorsque la valeur tirée est supérieure à r_{max} , on rejette cette valeur et on retire une autre. Ce tirage est désormais appelé *tirage tronqué* (T).

$$F_R^T(r_c) = \mathbb{P}(R < r_c | R \leq r_{max}) = \frac{F_R(r_c)}{F_R(r_{max})} = \frac{1}{F_R(r_{max})} \exp \left[- \left(\frac{2r_c}{0,072} \right)^{-2,7} \right] \quad (5.10)$$

Pour illustration, considérons un volume de taille $500 \times 500 \times 1 \mu\text{m}^3$. Le nombre de carbures total dans le volume est de 19×10^4 . La taille maximale de carbures r_{max} est supposée de 1 μm . On étudie deux cas de grille : 256×256 points et 128×128 points. On compare dans chaque cas les histogrammes de nombres de carbures tirés et de tailles de carbures tirées, ainsi que le nombre total de carbures tirés. Les résultats sont présentés sur les figures 5.5 et 5.6.

Pour le tirage de nombre de carbures N_c , dans le cas de la grille 256×256 points, le nombre moyen de carbures n_{car} en chaque point est de 2,899. Le tirage N avec la moyenne 2,899 et l'écart-type 4 donne un taux important de valeurs négatives (27,5%). Dès lors, il présente une concentration importante des valeurs 0 causée par la retenue des nombres négatifs tirés à 0 (Fig. 5.5). Par conséquent, le nombre total de carbures tirés (226 051) est plus grand que la consigne (190 000), tandis que l'autre cas donne 189 333 carbures et une

faible taux des valeurs 0 (5,5%).

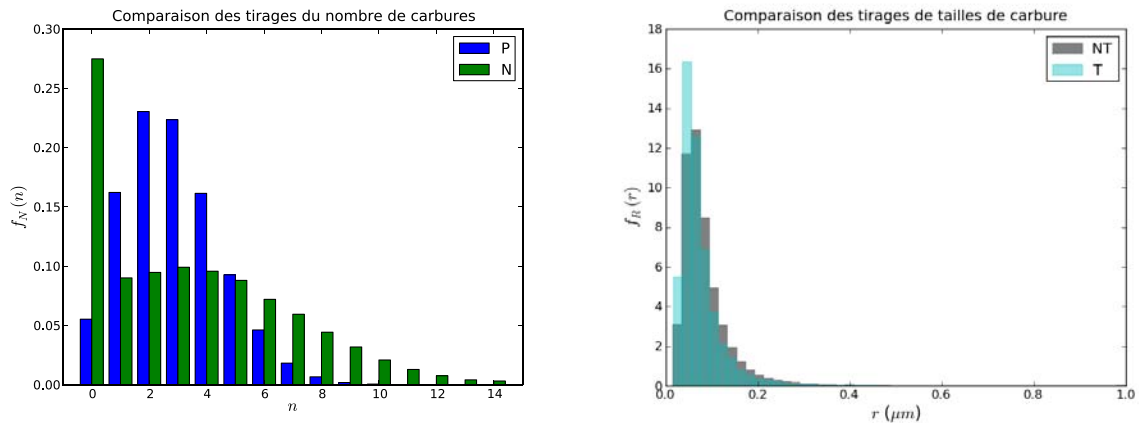


Figure 5.5 – Grille 256×256 points - Comparaison des méthodes de tirage du nombre de carbures (à gauche) et de la taille de carbures (à droite) de Mathieu (2006) (légende “N” et “NT”) et de ce travail (légende “P” et “T”)

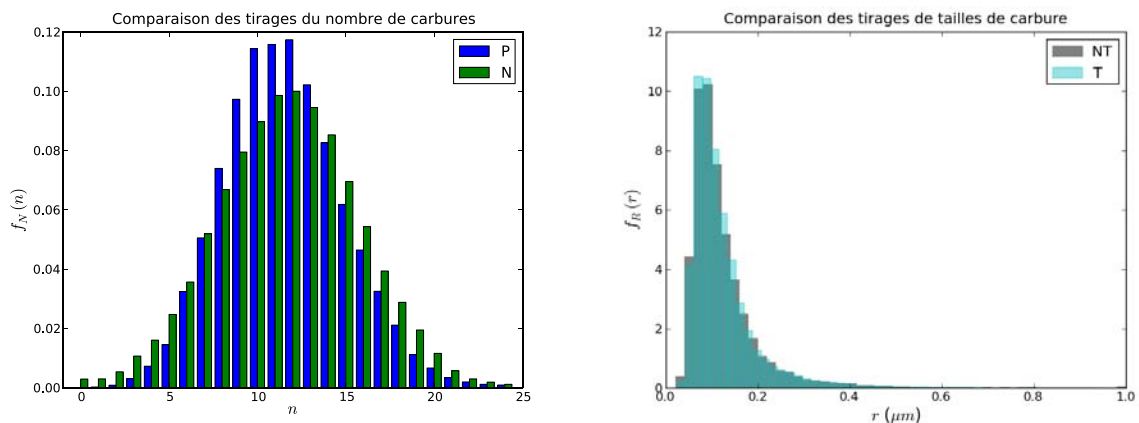


Figure 5.6 – Grille 128×128 points - Comparaison des méthodes de tirage du nombre de carbures (à gauche) et de la taille de carbures (à droite) de Mathieu (2006) (légende “N” et “NT”) et de ce travail (légende “P” et “T”)

Dans le cas de la grille 128×128 points, le nombre moyen de carbures n_{car} en chaque point est de 11,6. Le taux des valeurs négatives du tirage N n’est pas importante (0,29%). On n’observe pas de valeurs nulles sur la figure 5.6. Les résultats des deux tirages sont identiques. Les nombres totaux de carbures tirés des deux cas (190 658 et 189 365) sont alors en accord avec la consigne. En conclusion, la méthode proposée par Mathieu (2006) n’est acceptable que pour une situation bien particulière et devrait dans tous les cas être remplacée par un tirage de Poisson.

Pour le tirage des tailles de carbures, dans le premier cas, on observe que le tirage NT donne plus de grandes valeurs de taille de carbures que l’autre. Dans le deuxième, les

résultats sont généralement identiques à l'exception d'une concentration des valeurs r_{max} . Si l'on fait un zoom (Fig. 5.7), on observe bien une concentration plus importante des valeurs r_{max} du tirage NT par rapport à l'autre. Plus le nombre moyen de carbure n_{car} est grand, plus cette concentration est importante. On montre alors une influence importante du tirage P et une faible influence du tirage NT dans le cas de la grille 256×256 points. Le phénomène est l'inverse dans l'autre cas.

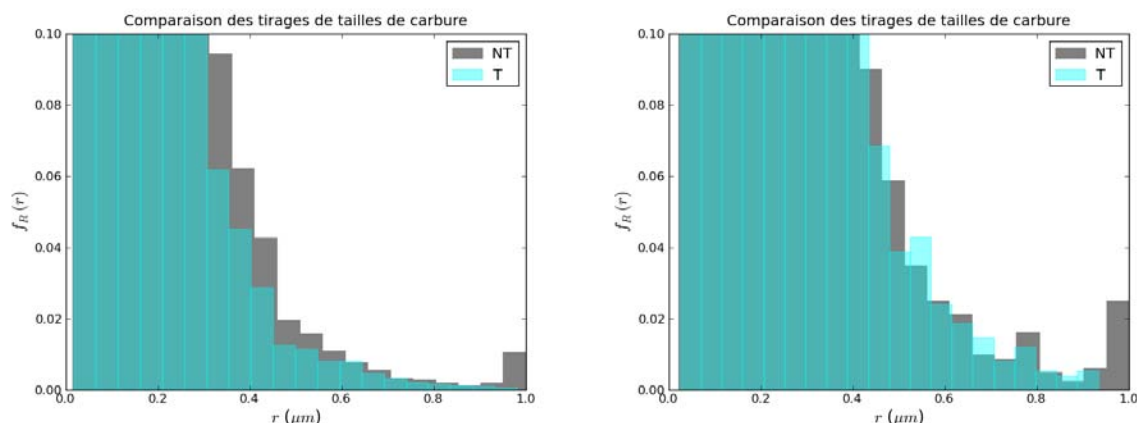


Figure 5.7 – Zoom sur la concentration des valeurs r_{max} : cas de la grille 256×256 points à gauche et cas de la grille 128×128 points à droite

A cause de la concentration des valeurs r_{max} , on constate que la probabilité de rupture associée au tirage NT est plus grande que le tirage selon une loi tronquée. Cette constatation sera confirmée par une comparaison de l'influence de ces méthodes de tirage de carbures sur la probabilité de rupture présentée dans la section 5.3.5.

5.3.4 Approche continue - Approche discrète

Jusqu'ici nous avons obtenu pour chaque tirage de carbures une contrainte critique σ_c en chaque point considéré. Il s'agit maintenant de comparer le champ des contraintes de chargement σ_{cliv} et celui des contraintes critiques pour calculer la probabilité de rupture. Cependant, comme les calculs aux éléments finis sont réalisés par une suite de niveaux de chargement, il existe deux approches pour calculer la courbe de probabilité de rupture en fonction du niveau de chargement : *Approche continue* (AC) et *Approche discrète* (AD).

La première approche est utilisée dans Mathieu (2006) et est présentée en détails dans la section 1.4.2. Elle consiste à réaliser tout d'abord N_{tir} tirages de carbures. Ensuite, pour chaque tirage, on compare le champ de contraintes critiques avec le champ de contraintes de chargement en chaque niveau de chargement en ordre croissant. Dès que la rupture apparaît, on note le niveau de chargement correspondant (*e.g.* niveau de déformation macroscopique E) comme étant le niveau de chargement de rupture E_r . Avec N_{tir} tirages de carbures, on obtient un échantillon de N_{tir} valeurs de niveau de chargement de rupture

$\{E_r^i, i = 1, \dots, N_{tir}\}$. Cette approche est appelée *approche continue*. La fonction de répartition empirique des valeurs E_r^i représente la probabilité de rupture de l'éprouvette en fonction du niveau de déformation macroscopique.

L'approche continue n'est pas applicable dans notre travail parce que la simulation des champs de contraintes ne peut pas reproduire la cross-covariance du champ à différents niveaux de chargement. On propose alors une deuxième approche, dite *approche discrète*. Elle consiste à réaliser pour chaque niveau de chargement une simulation de Monte Carlo. Précisément, pour chaque niveau E_i , on réalise N_{tir} tirages de carbures et on obtient N_{tir} réalisations du champ σ_c . Ensuite, chaque réalisation du champ σ_c est comparée avec le champ σ_{cliv} au niveau E_i . Parmi ces N_{tir} comparaisons, on compte le nombre de rupture N_r^i . La probabilité de rupture P_R^i correspondante à ce niveau E_i est calculée par :

$$P_R^i = \frac{N_r^i}{N_{tir}} \quad (5.11)$$

Une comparaison de l'influence de ces approches sur la probabilité de rupture est présentée dans la section 5.3.6. Comme on le verra plus loin, l'approche discrète proposée ici est plus naturelle du point de vue de la mécanique probabiliste et permet par ailleurs de calculer des *intervalles de confiance* sur les résultats.

5.3.5 Comparaison des méthodes de tirage de carbures

Dans cette section, nous étudions l'influence des méthodes de tirage de carbures sur la probabilité de rupture. L'étude est réalisée sur l'agrégat polycristallin de 100 grains et de taille de $500 \times 500 \times 1 \mu\text{m}^3$, présenté dans le chapitre 4. Le nombre total de carbures est de 190 000. Le champ σ_{cliv} aux points de Gauss résultant d'un calcul aux éléments finis est utilisé dans l'Approche Locale de la rupture. Le nombre de points de Gauss est $N_{pts} = 16\ 644$ (Sec. 4.2.4). Le nombre moyen de carbure en chaque point est alors $n_{car} = 11,4$. L'approche continue est utilisée pour le calcul de probabilité de rupture.

On étudie quatre cas de tirage de carbures :

- Cas N_NT : Le nombre de carbures en chaque point N_c est tiré selon le tirage normal (N). La taille de carbures r_c est tirée selon le tirage non-tronqué (NT). Ce cas correspond exactement à l'approche de [Mathieu \(2006\)](#).
- Cas N_T : Le nombre de carbures en chaque point N_c est tiré selon le tirage normal (N). La taille de carbures r_c est tirée selon le tirage tronqué (T).
- Cas P_NT : Le nombre de carbures en chaque point N_c est tiré selon le tirage de Poisson (P). La taille de carbures r_c est tirée selon le tirage non-tronqué (NT).
- Cas P_T : Le nombre de carbures en chaque point N_c est tiré selon le tirage de Poisson (P). La taille de carbures r_c est tirée selon le tirage tronqué (T).

La figure 5.8 présente les courbes de probabilité de rupture obtenues. Cette figure montre qu'avec une même méthode de tirage de r_c , les différentes méthode de tirage de N_c donnent

les mêmes résultats. Au contraire, avec une même méthode de tirage de N_c , les différentes méthodes de tirage de r_c donnent différents résultats. On retrouve la conclusion tirée dans la section 5.3.3 que la probabilité de rupture dans le cas du tirage NT est plus grande que celle du cas N.

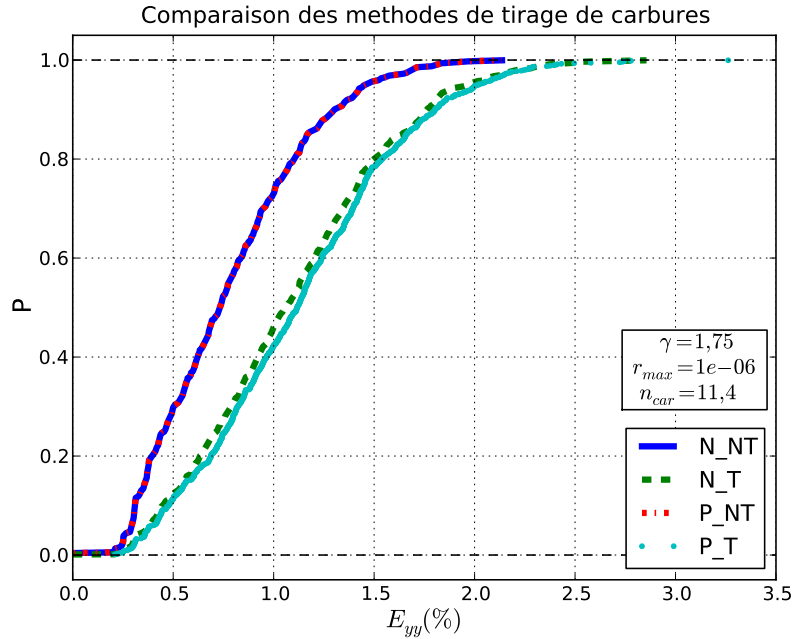


Figure 5.8 – Comparaison des méthodes de tirage de carbures sur la probabilité de rupture : $\gamma_p = 1,75 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 11.4$

De plus, le résultat montre une faible influence de la méthode de tirage de N_c , mais une influence importante de la méthode de tirage de r_c . On confirme la constatation évoquée dans la section 5.3.3 sur l'influence de la méthode de tirage de taille de carbures. En conclusion, le tirage du nombre de carbure selon la loi de Poisson et le tirage de tailles de carbures selon la loi tronquée sont nécessaires et sont donc utilisés dans la suite de notre travail.

5.3.6 Comparaison des approches continue - discrète

Dans cette section, on étudie l'influence des différentes approches numériques permettant de calculer la courbe de probabilité de rupture, *i.e.* approche continue (AC) et approche discrète (AD). On réalise quatre cas d'études :

- Cas N_NT_AC : Le tirage du nombre de carbures est normale, le tirage de taille de carbures est non tronqué et l'approche utilisée est continue.
- Cas N_NT_AD : Le tirage du nombre de carbures est normale, le tirage de taille de carbures est non tronqué et l'approche utilisée est discrète.
- Cas P_T_AC : Le tirage du nombre de carbures est celui de Poisson, le tirage de taille de carbures est tronqué et l'approche utilisée est continue.

- Cas P_T_AD : Le tirage du nombre de carbures est celui de Poisson, le tirage de taille de carbures est tronqué et l'approche utilisée est discrète.

La figure 5.9 présente une comparaison des quatre cas d'études réalisés sur un seul calcul polycristallin (en haut) et une comparaison des deux méthodes continue et discrète sur cinq calculs polycristallins en utilisant le tirage de carbures P_T (en bas).

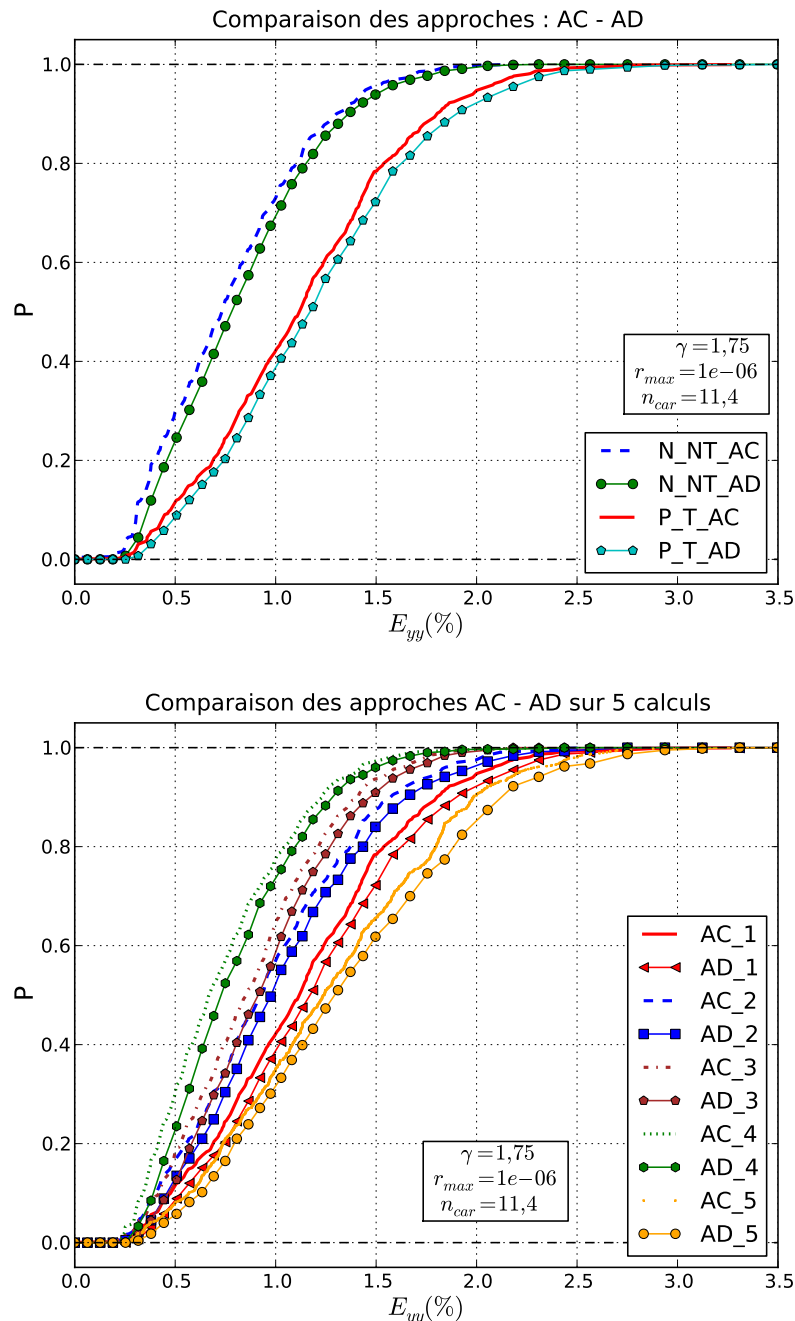


Figure 5.9 – Comparaison des approches continue et discrète réalisée sur un calcul polycristallin en haut et sur cinq calculs polycristallins avec le même tirage de carbures en bas : $\gamma_p = 1,75 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 11,4$

Cette figure montre clairement que les deux approches donnent les mêmes résultats. Cette conclusion est valable non seulement pour un calcul polycristallin, mais aussi pour tous les calculs. Ce résultat nous permet d'utiliser l'approche AD dans notre modèle présenté dans la section 5.3.7.

5.3.7 Modèle de l'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes

Le modèle de Mathieu (2006) nous permet de calculer la probabilité de rupture du matériau avec *un seul* calcul polycristallin en supposant que la microstructure de l'éprouvette soit représentative. Constatant que la variabilité de la microstructure (*i.e.* la variabilité de la structure de grains et des orientations cristallographiques) du matériau a une influence importante sur sa probabilité de rupture, l'apport original de ce travail est la prise en compte de cette variabilité dans l'Approche Locale de la rupture comme le montre la méthodologie générale proposée.

Avant de construire notre modèle, on vérifie l'influence de la microstructure en appliquant le modèle de Mathieu (2006) sur 20 calculs polycristallins du cas GA (Chap. 4). La figure 5.10 présente 20 courbes de probabilité de rupture correspondantes.

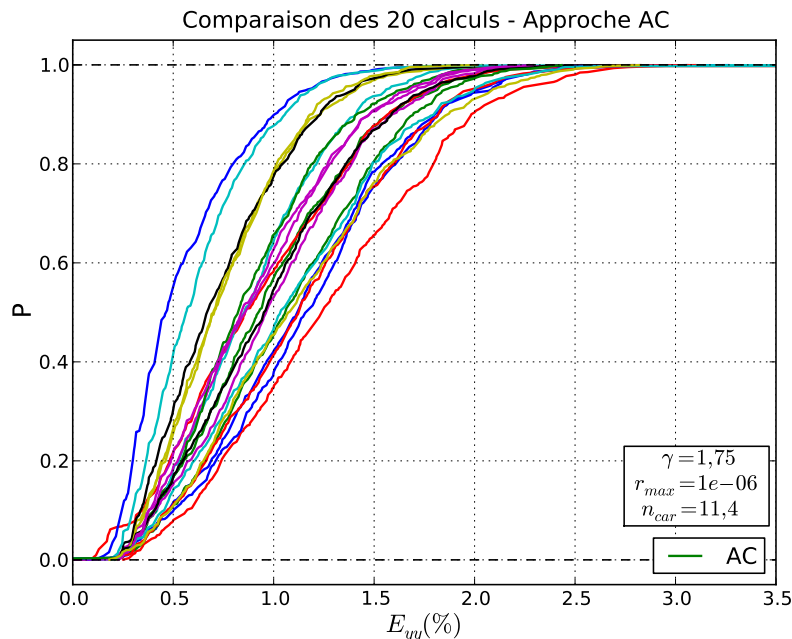


Figure 5.10 – Dispersion de probabilité de rupture calculée avec 20 calculs polycristallins de différente microstructure par le modèle de Mathieu (2006) : $\gamma_p = 1,75 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 11,4$

On observe bien une dispersion importante des courbes, au moins dans ce cas de calcul polycristallin en 2D. La valeur de déformation macroscopique à rupture médiane (*e.g.* correspondant à une probabilité de rupture de 50%) varie entre d'environ 0,5% et 1,25% sur ces 20 calculs. Cela nous confirme l'intérêt à construire notre modèle de l'Approche

Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes permettant à prendre en compte la variabilité de la microstructure dans l'analyse.

Compte tenu des observations précédentes, et pour résumer, notre approche est définie par les hypothèses suivantes :

- Le nombre de carbures est tiré selon la loi de Poisson.
- La taille de carbures est tirée selon le modèle de [Ortner et al. \(2005\)](#) tronqué.
- La probabilité de rupture est calculée avec l'approche discrète.

Du côté du champ de contraintes de chargement, au lieu de l'utilisation d'un seul champ de contraintes de clivage σ_{cliv} résultant d'un unique calcul polycristallin comme dans le modèle de [Mathieu \(2006\)](#), on utilise les réalisations de champ simulées dans le chapitre 4. Cela nous permet de prendre en compte dans la modélisation la variabilité spatiale de la microstructure représentée par les réalisations simulées du champ de contraintes. Les détails du modèle sont les suivants :

- Étape 1 : Pour chaque niveau de chargement E_i ($i = 1, \dots, 41$), simuler N_{tir} réalisations du champ de contraintes de clivage $\sigma_{cliv}(E_i)$ sur une grille régulière (Chap. 4).
- Étape 2 : Réaliser N_{tir} tirages de carbures sur la même grille que celle du champ de contraintes et calculer N_{tir} réalisations du champ de contraintes critiques σ_c correspondant selon le critère de Griffith (Eq. (5.8)).
- Étape 3 : Pour chaque niveau de chargement E_i ($i = 1, \dots, 41$), vérifier le critère de rupture (5.7) pour chaque réalisation $\sigma_{cliv}^j(E_i)$ ($j = 1, \dots, N$) en la comparant avec une réalisation σ_c^j . Parmi N_{tir} vérifications, compter le nombre de rupture N_r^i .
- Étape 4 : Pour chaque niveau de chargement E_i ($i = 1, \dots, 41$), calculer la probabilité de rupture selon l'équation 5.10 en utilisant les résultats obtenus à l'étape 3.

Notons que N_{tir} réalisations du champ σ_c sont tirées une seule fois et sont utilisées pour tous les niveaux de chargement. Cela assure les mêmes distributions de défauts tirées pour tous les niveaux de chargement dans l'Approche Locale de la rupture.

5.3.8 Conclusion

Nous avons construit dans cette section 5.3 notre modèle de l'Approche Locale par simulation de champ de contraintes en nous basant sur l'approche de [Mathieu \(2006\)](#). Nous avons montré certaines limitations de cette approche et proposé des modifications permettant de la rendre plus rigoureuse. Ces modifications ont été justifiées et validées par comparaison. Avant de construire notre modèle, nous avons également illustré la dispersion de la probabilité de rupture avec le changement de la microstructure dans le modèle de [Mathieu \(2006\)](#), au moins dans le cas 2D. Les résultats obtenus nous confirment l'intérêt de construire un modèle qui tient compte de la variabilité spatiale de la microstructure dans la modélisation. Ce modèle sera utilisé dans la section suivante pour le calcul de la probabilité de rupture d'une éprouvette de l'acier 16MND5 sous traction uniaxiale.

5.4 Probabilité de rupture

5.4.1 Introduction

Le modèle de l'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contraintes construit dans la section précédente est appliqué dans cette section pour calculer la probabilité de rupture du matériau. Notons que les champs de contraintes sont simulés dans le chapitre 4 dans un domaine de taille 800×800 correspondant à un volume $400 \times 400 \times 1 \mu\text{m}^3$ et sur une grille de 256×256 points. Le nombre totale de carbures dans ce volume est $M_{car} = 121\,600$ et le nombre moyen de carbures en chaque point est alors $n_{car} = 1,86$. Nous prenons dans chaque étude suivante le nombre de simulations $N_{tir} = 1000$.

Nous présentons tout d'abord dans la section 5.4.2, l'estimation de la probabilité de rupture et son intervalle de confiance. Ensuite, les études sur l'influence de la simulation de champ de contraintes, de l'utilisation des champs de contraintes, de la méthode de simulation du champ de contraintes, de la géométrie (GF et GA), ainsi que du modèle de distribution de tailles de carbures sont respectivement présentées dans les sections 5.4.3 à 5.4.7. Ces études nous permettent de choisir les meilleurs paramètres pour le calcul de la probabilité de rupture. Les paramètres choisis sont utilisés dans les études paramétriques sur l'influence des paramètres intervenant dans le critère de rupture dans la section 5.4.8.

Rappelons que les résultats d'identification du champ de contraintes de clivage σ_{cliv} ne sont pas valables dans le domaine de transition élasticité-plasticité ($E_{yy} \approx 0 - 0,5\%$), les valeurs de probabilité de rupture correspondantes dans ce domaine sont donc fausses. Dès lors, sur les figures des courbes de probabilité de rupture dans la suite, ce domaine est représenté par une zone grise hachurée.

5.4.2 Probabilité de rupture et intervalle de confiance

Comme dans notre modèle, la probabilité de rupture à chaque niveau de chargement est estimée par la simulation de Monte Carlo, l'intervalle de confiance à 95% de cette estimation est définie par (Saporta, 2006) :

$$P_R = \bar{P}_R \pm 1,96 \sqrt{\frac{\bar{P}_R(1 - \bar{P}_R)}{N_{tir}}} \quad (5.12)$$

où \bar{P}_R est l'estimation de la probabilité de rupture et N_{tir} est le nombre de simulations (dans ce cas $N_{tir} = 1000$).

La figure 5.11 présente une courbe de probabilité de rupture estimée et l'intervalle de confiance à 95% de cette estimation. On observe bien sur la figure 5.11 (à gauche) trois étapes de l'évolution de la déformation de l'éprouvette. La première étape ($E \approx 0 - 0,2\%$) représente le domaine élastique. Dans ce domaine, le champ de contraintes de clivage est nul. Dès lors, la probabilité de rupture est égale à 0. La deuxième étape ($E \approx 0,2 - 0,5\%$) représente le domaine de transition élasticité-plasticité. Comme montré dans le chapitre 4,

les résultats d'identification du champ σ_{cliv} dans ce domaine sont dispersés et ne sont pas valables. Dès lors, dans ce domaine, la probabilité de rupture est également dispersée. La troisième étape ($E \approx 0,5-3,5\%$) représente l'évolution de la déformation de l'éprouvette dans le domaine plastique. Dans ce domaine, les paramètres identifiés sont stables, mais la moyenne du champ augmente avec le niveau de chargement (Fig. 5.15). Dès lors, la probabilité de rupture augmente avec le niveau de chargement.

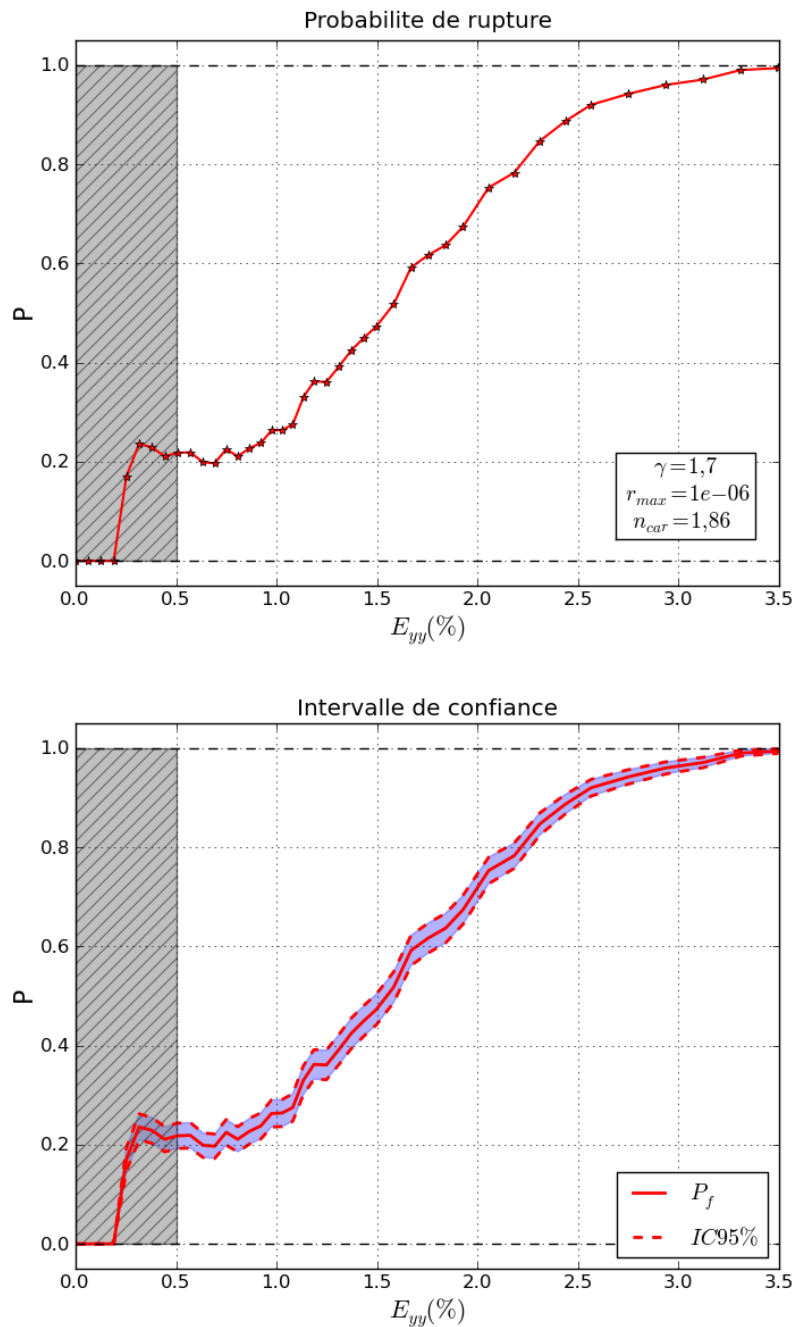


Figure 5.11 – Cas GA - Courbe de probabilité de rupture en haut et l'intervalle de confiance à 95% de l'estimation en bas : $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$

La figure 5.11 en bas présente un intervalle de confiance de l'estimation assez petit. Cela nous permet de conclure que l'utilisation de 1000 simulations est suffisante pour une bonne estimation de la probabilité de rupture du matériau.

5.4.3 Influence de la simulation de champ de contraintes

Cette étude a pour but d'observer l'influence de la simulation du champ de contraintes sur la probabilité de rupture. Autrement dit, on étudie l'influence de la prise en compte de la variabilité spatiale de la microstructure sur la probabilité de rupture du matériau. La figure 5.12 présente les résultats des trois cas d'études :

- *1000C - 1EF* : On utilise une seule réalisation du champ de contraintes σ_{cliv} sur la grille 256×256 points, résultant d'un calcul aux éléments finis (1EF) et 1000 tirages de carbures (1000C) pour calculer la probabilité de rupture.
- *1000C - 1000S* : La probabilité de rupture est calculée avec 1000 tirages de carbures (1000C) et 1000 simulations du champ de contraintes (1000S).
- *1C - 1000S* : La probabilité de rupture est calculée avec un seul tirage de carbures (1C) et 1000 simulations du champ de contraintes (1000S).

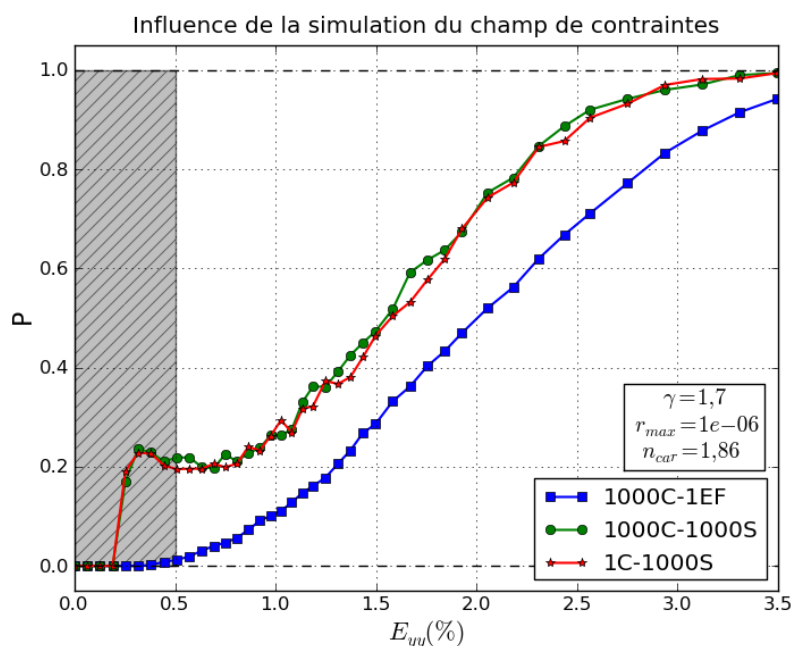


Figure 5.12 – Cas GA - Influence de la simulation du champ de contraintes sur la probabilité de rupture : $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$

Cette figure présente bien une superposition des courbes 1000C - 1000S et 1C - 1000S. Cela montre que la simulation du champ de contraintes joue un rôle décisif dans l'estimation de la probabilité de rupture dans notre modèle. On observe également que la simulation du champ de contraintes entraîne une augmentation de la probabilité de rupture par rapport au cas 1000C - 1EF. Ce résultat est logique puisque la simulation crée dans chaque réalisation du champ de contraintes une configuration de positions de joints de

grains où se trouvent les valeurs les plus grandes du champ. Cela augmente alors la chance de rupture.

5.4.4 Influence de l'utilisation des champs de contraintes

Malgré le choix de l'utilisation du champ de contraintes de clivage σ_{cliv} dans ce mémoire, on réalise dans ce paragraphe une comparaison des probabilités de rupture calculées avec le champ σ_{cliv} et avec le champ σ_I . Cette étude va confirmer la conclusion tirée dans le chapitre 4, à savoir que l'utilisation des deux champs de contraintes donne des résultats différents pour la probabilité de rupture. Les figures 5.13 et 5.14 présentent les résultats de quatre cas d'études.

- Cas 1 : Géométrie de l'agrégat fixe (GF), simulation des champs σ_{cliv} et σ_I avec le périodogramme empirique (PE).
- Cas 2 : Géométrie de l'agrégat fixe (GF), simulation des champs σ_{cliv} et σ_I avec le périodogramme identifié (PI).
- Cas 3 : Géométrie de l'agrégat aléatoire (GA), simulation des champs σ_{cliv} et σ_I avec le périodogramme empirique (PE).
- Cas 4 : Géométrie de l'agrégat aléatoire (GA), simulation des champs σ_{cliv} et σ_I avec le périodogramme identifié (PI).

La figure 5.15 présente l'évolution de la moyenne des champs σ_I et σ_{cliv} en fonction du niveau de déformation macroscopique.

On observe bien sur ces figures que la courbe associée σ_I est plus "régulière" que l'autre. Ce phénomène peut s'expliquer par le fait que les résultats d'identification du champ σ_I sont valables dès dans le domaine d'élasticité, tandis que ceux du champ σ_{cliv} ne sont pas valables dans le domaine de transition. Par ailleurs, ces figures montrent également que dans le cas GF, dans le domaine $E_{yy} \approx 0 - 1,5\%$, la probabilité de rupture associée σ_I est plus faible que l'autre et elle devient plus élevée lorsque la déformation macroscopique dépasse 1,5%. Le point de dépassement dans le cas GA est décalé vers $E_{yy} \approx 1\%$. Rappelons que la comparaison des courbes dans le domaine de transition $E_{yy} \approx 0 - 0,5\%$ est fautive car les résultats d'identification du champ σ_{cliv} ne sont pas valables dans ce domaine.

En observant les figures 4.40, 4.41 et 4.62, 4.63, on voit que tandis que les variances v_{σ_I} du champ σ_I augmentent lentement avec le niveau de chargement, celles $v_{\sigma_{cliv}}$ du champ σ_{cliv} atteignent rapidement leurs valeurs maximales et se stabilisent. Ces valeurs importantes de la variance du champ σ_{cliv} expliquent pourquoi le champ σ_{cliv} donne une valeur plus grande de probabilité de rupture dans un premier temps malgré que sa moyenne soit plus petite (Fig. 5.15).

De plus, avec l'augmentation de niveau de chargement, la variance du champ σ_I tend vers sa valeur maximale proche de celle du champ σ_{cliv} . Par ailleurs, la moyenne du champ σ_I est toujours supérieure à celle du champ σ_{cliv} (Fig. 5.15). Dès lors, le niveau de contraintes σ_I dans les réalisations simulées est plus élevé que celui de contraintes σ_{cliv} . Par conséquent, la probabilité de rupture associée σ_I passe par celle du champ σ_{cliv} .

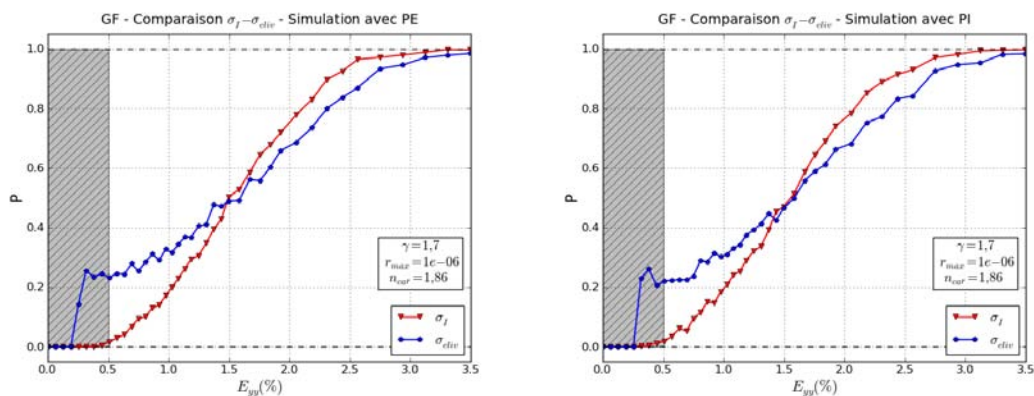


Figure 5.13 – Cas GF - Influence de l'utilisation du champ σ_{cliv} et du champ σ_I : simulation des champs avec PE à gauche et avec PI à droite ($\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$)

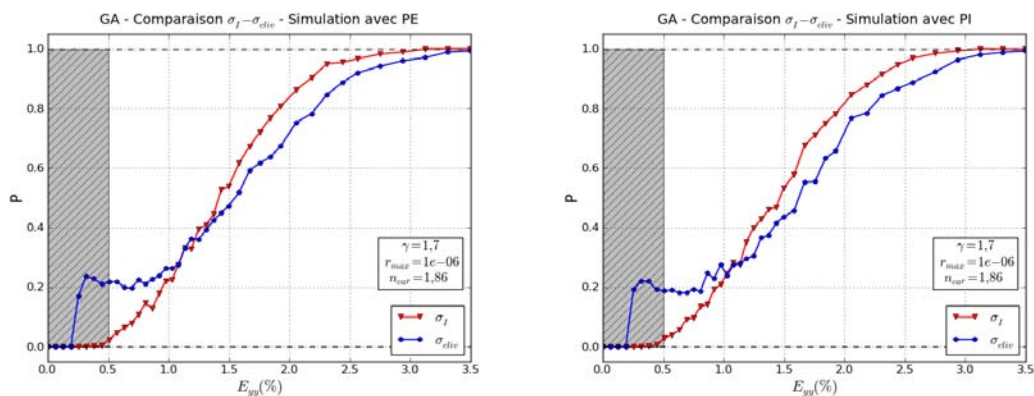


Figure 5.14 – Cas GA - Influence de l'utilisation du champ σ_{cliv} et du champ σ_I : simulation des champs avec PE à gauche et avec PI à droite ($\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$)

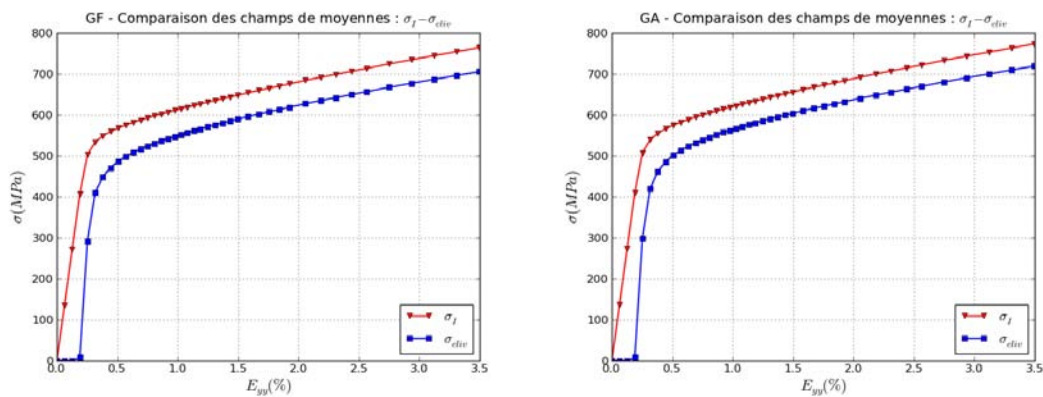


Figure 5.15 – Évolution de l'estimation de moyenne des champs de contraintes en fonction de déformation macroscopique : cas GF à gauche et cas GA à droite

5.4.5 Influence du périodogramme utilisé pour simuler les champs

Ce paragraphe a pour but d'évaluer l'effet de l'ajustement du périodogramme empirique comme présenté dans la chapitre 4. On réalise deux cas d'étude. Le premier utilise les réalisations du champ σ_{cliv} simulées avec le périodogramme empirique (PE) dans l'Approche Locale de la rupture, tandis que le deuxième utilise les réalisations simulées à partir du périodogramme théorique identifié. La figure 5.16 présente la comparaison des probabilités de rupture pour les cas GF et GA et pour deux valeurs de l'énergie de propagation $\gamma_p = 1,5 \text{ Jm}^{-2}$ et $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$.

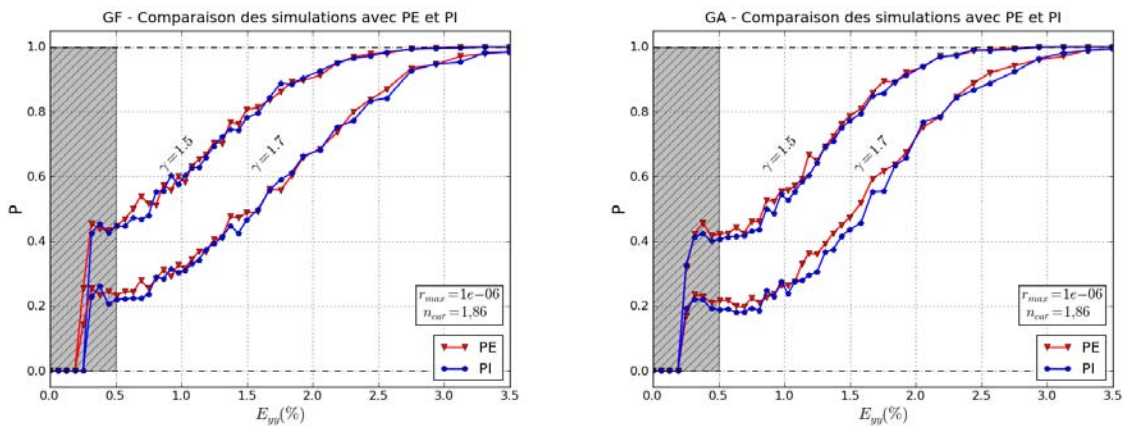


Figure 5.16 – Influence du périodogramme utilisé dans la simulation du champ de contraintes σ_{cliv} : cas GF à gauche et cas GA à droite ($r_{max} = 1 \text{ }\mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$)

Cette figure montre un bon accord entre les deux méthodes de simulation, pour tous les cas GF et GA, ainsi que pour les deux valeurs de γ_p . Ce résultat nous permet de confirmer que l'ajustement du périodogramme empirique par le modèle théorique "gaussien-exponentiel" est très bon. Autrement dit, les paramètres identifiés représentent bien la covariance spatiale des champs de contraintes. Ils peuvent être utilisés pour simuler des réalisations des champs dans n'importe quel domaine et sur n'importe quelle grille, alors que la simulation avec PE ne le permet que sur la grille de projection du champ de contraintes.

5.4.6 Influence de la structure de grains

Dans cette section, on étudie l'influence de la géométrie de l'agrégat sur la probabilité de rupture. On réalise deux cas d'étude. Dans le premier, on utilise les paramètres identifiés du champ σ_{cliv} dans le cas GF pour simuler les réalisations du champ et estimer la probabilité de rupture. De la même manière, le deuxième utilise les paramètres identifiés dans le cas GA. La figure 5.17 présente la comparaison des probabilités de rupture de ces deux cas pour trois valeurs de l'énergie de propagation $\gamma_p = 1,5; 1,6; 1,7 \text{ Jm}^{-2}$.

On observe bien que les courbes sont assez proches. Cela montre une faible influence de la structure de grains et que la variabilité des orientations cristallographiques des grains joue le rôle le plus important dans la variabilité de la microstructure du matériau. Mais rappelons que, comme l'a montré dans le chapitre 4, l'influence de la variabilité de la structure de grains sur l'homogénéité du champ de contraintes est assez claire.

Ces résultats sont compréhensibles. Premièrement, dans les calculs polycristallins, la structure de grains fixe entraîne la superposition de position des joints de grains de différents calculs et par conséquent, entraîne la superposition de position des pics des réalisations des champs de contraintes obtenus. Cela influence la structure du champ. Deuxièmement, dans l'estimation de la probabilité de rupture, la simulation des champs de contraintes reproduit elle-même la variabilité de la structure de grains. Dès lors, l'influence de la géométrie fixe n'est pas importante et les courbes de probabilité de rupture sont quasiment identiques.

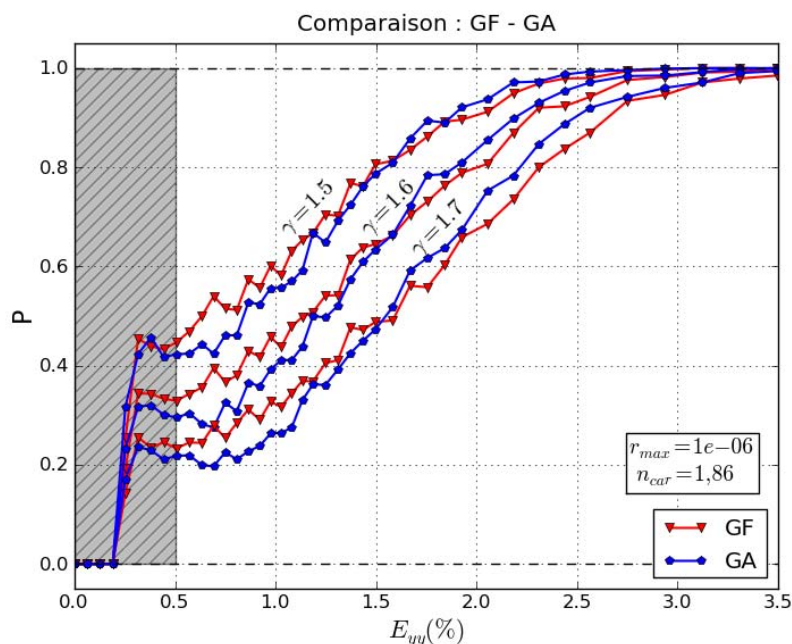


Figure 5.17 – Influence de la structure des calculs polycristallins : cas GF et GA ($\gamma_p = 1,5; 1,6; 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$)

En conclusion, du point de vue de l'Approche Locale de la rupture, les deux modélisations GF et GA ne conduisent pas à des probabilités de rupture significativement différentes.

5.4.7 Influence du modèle de distribution de la taille des carbures

On étudie l'influence des deux modèles de distribution de taille de carbures présentés dans la section 5.2.2 : modèle de [Ortner et al. \(2005\)](#) et modèle de [Lee et al. \(2002\)](#). Rappelons

que ces deux distributions sont très similaires (dans le domaine $2r_c = 0 - 1 \mu\text{m}$) sauf dans les queues de distribution où le premier modèle présente des valeurs de probabilité non nulles de trouver des tailles de carbures de l'ordre de $2r_c = 3 \mu\text{m}$, tandis que le deuxième affiche une probabilité nulle dès une taille de l'ordre de $2r_c = 1 \mu\text{m}$.

On étudie donc deux cas de tirage selon ces deux distributions. Le premier tirage est réalisé avec la taille maximale de carbures $r_{max} = 0,025 \mu\text{m}$ pour que les tailles de carbures r_c tirées tombent dans le domaine $2r_c = 0 - 1 \mu\text{m}$. Le deuxième est réalisé avec $r_{max} = 1 \mu\text{m}$ pour que les valeurs de r_c tirées tombent dans les queues des distributions. On estime ensuite les probabilités de rupture correspondantes à ces deux tirages. Comme le niveau de la taille maximale de carbure est petit, on doit prendre dans cette étude la valeur de l'énergie de propagation $\gamma_p = 0,7 \text{ Jm}^{-2}$ pour que la probabilité de rupture soit non nulle pour la plage de chargement considérée ($E_{yy} \leq 3,5\%$). La figure 5.18 présente le résultat de cette étude.

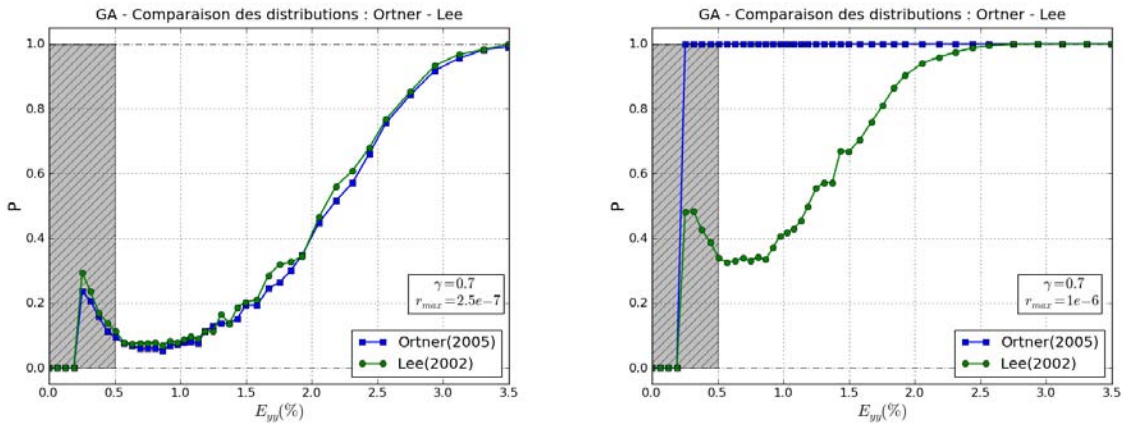


Figure 5.18 – Influence du modèle de distribution de tailles de carbures ($\gamma_p = 0,7 \text{ Jm}^{-2}$, $n_{car} = 1,86$) : $r_{max} = 0,25 \mu\text{m}$ à gauche et $r_{max} = 1 \mu\text{m}$ à droite

Avant de comparer le résultat des deux cas, on rappelle que comme indiqué dans le chapitre 4, les résultats d'identification du champ de contraintes de clivage dans le domaine de transition ne sont pas valables. Alors, l'estimation de la probabilité de rupture dans ce domaine n'est également pas valable. On observe sur la figure 5.18, une forte dispersion des courbes dans ce domaine.

Dans le premier cas ($r_{max} = 0,025 \mu\text{m}$), les courbes de probabilité de rupture sont presque superposées. Ce résultat est cohérent avec l'observation d'un bon accord des deux distributions dans le domaine $2r_c = 0 \sim 1 \mu\text{m}$ (Fig. 5.1). Mais lorsque l'on prend $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, dans le deuxième cas, les courbes sont totalement différentes. Tandis que la probabilité de rupture du modèle de Lee et al. (2002) présente encore les valeurs inférieures à 1, l'autre modèle présente la rupture du matériau dès une valeur faible du chargement $E_{yy} = 0,3\%$ (pour la valeur $\gamma_p = 0,7 \text{ Jm}^{-2}$).

Comme la probabilité de rupture est estimée par la théorie du maillon le plus faible, une seule taille de carbures importante tirée peut entraîner la rupture totale. Par ailleurs,

dans le deuxième cas, le tirage selon la distribution de [Ortner et al. \(2005\)](#) peut donner des valeurs proches ou égales à $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, tandis que la probabilité d'obtenir des telles valeurs importantes de l'autre cas est presque nulle. Dès lors, la probabilité de rupture correspondante au modèle de [Ortner et al. \(2005\)](#) est plus élevée que celle du modèle de [Lee et al. \(2002\)](#)

Le résultat de cette étude montre une très forte influence des queues des distributions sur la probabilité de rupture. Cette conclusion est en contradiction avec la constatation de [Mathieu \(2006\)](#) évoquée dans la section 5.2.2. Elle conduit à penser qu'une analyse statistique fine des tailles de carbures observées dans des échantillons de matériau est nécessaire pour obtenir des courbes de rupture réellement quantitatives.

5.4.8 Études paramétriques

5.4.8.1 Influence de l'énergie de propagation

On calcule dans cette section la probabilité de rupture pour différentes valeurs de l'énergie de propagation $\{\gamma_p = 1,5; 1,55; 1,6; 1,65; 1,7; 1,75\}$ (Jm^{-2}) en fixant les autres paramètres $r_{max} = 1 \mu\text{m}$ et $n_{car} = 1,86$. La figure 5.19 présente les courbes de probabilité de rupture obtenues.

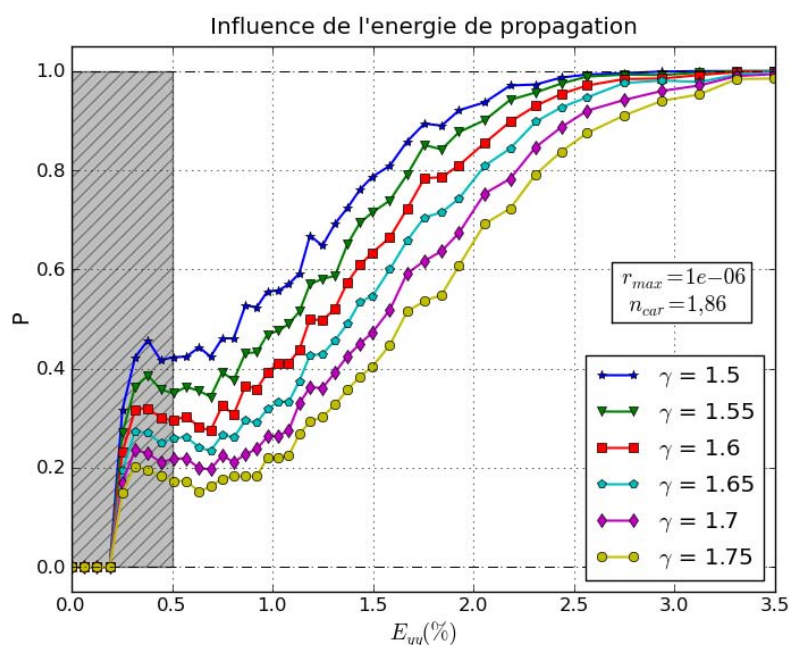


Figure 5.19 – Cas GA - Simulation avec PE - Influence de l'énergie de propagation sur la probabilité de rupture : $r_{max} = 1 \mu\text{m}$, $n_{car} = 1,86$

On observe bien que la probabilité de rupture diminue avec l'augmentation de l'énergie de propagation. De plus, les écarts entre les courbes sont assez importants dès un petit

incrément de γ_p ($0,05 \text{ Jm}^{-2}$). Cela montre une dépendance forte de la probabilité de rupture à l'énergie de propagation, qu'il conviendrait de mieux caractériser.

Comme γ_p est un paramètre intervenant directement dans le critère de Griffith, le changement de ce paramètre entraîne clairement le changement de la probabilité de rupture. De plus, l'équation (5.8) montre que plus l'énergie de propagation est grande, plus la contrainte de Griffith est grande et par conséquent plus la probabilité de rupture est petite.

5.4.8.2 Influence de la taille maximale de carbure

La taille maximale de carbures n'est pas un paramètre intervenant directement dans le critère de rupture, mais elle influence fortement la probabilité de rupture. L'influence de ce paramètre a déjà été observée dans l'étude de l'influence du modèle de distribution de tailles de carbures (Sec. 5.4.7). Dans cette étude, on calcule la probabilité de rupture avec différentes valeurs $\{r_{max} = 0,65; 0,75; 1; 1,05\} \mu\text{m}$ en fixant les autres paramètres $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$ et $n_{car} = 1,86$. La figure 5.20 présente les courbes de probabilité de rupture obtenues.

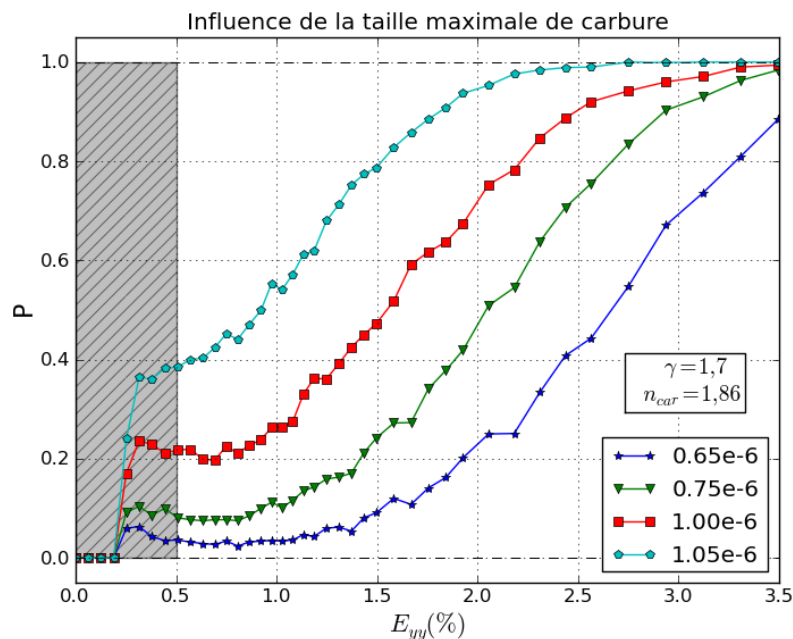


Figure 5.20 – Cas GA - Simulation avec PE - Influence de taille maximale de carbures sur la probabilité de rupture : $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $n_{car} = 1,86$

On observe bien que la probabilité de rupture augmente avec la taille maximale de carbure r_{max} et que la dépendance est assez sensible. Malgré une intervention indirecte de ce paramètre dans le critère de rupture, on montre que plus r_{max} est grand, plus les tailles de carbures r_c tirées sont grandes. Ces derniers interviennent directement dans le critère de rupture. Dès lors, la probabilité de rupture augmente avec r_{max} . De nouveau, il est

clair qu'une estimation précise de ce paramètre est nécessaire pour obtenir des courbes de probabilité de rupture réellement pertinentes.

5.4.8.3 Influence de la finesse de la grille

Dans ce paragraphe, on étudie l'effet de la finesse de la grille de points considérés sur la probabilité de rupture. On projète le champ de contraintes de clivage résultant des calculs aux éléments finis sur différentes grilles, *i.e.* 64×64 points, 128×128 points et 256×256 points. Les réalisations résultantes sont ensuite utilisées pour identifier et pour simuler des réalisations synthétiques du champ sur la même grille. Puis on calcule la probabilité de rupture associée à chaque finesse de la grille en utilisant les réalisations synthétiques correspondantes. Le tirage des carbures sont réalisés sur la même grille que le champ de contraintes pour chaque cas. Les valeurs correspondantes du nombre moyen de carbure n_{car} sont respectivement $\{27,96; 7,44; 1,86\}$. Cette étude correspond alors à celle sur l'influence du nombre moyen de carbures n_{car} sur la probabilité de rupture. La figure 5.21 présente le résultat de cette étude.

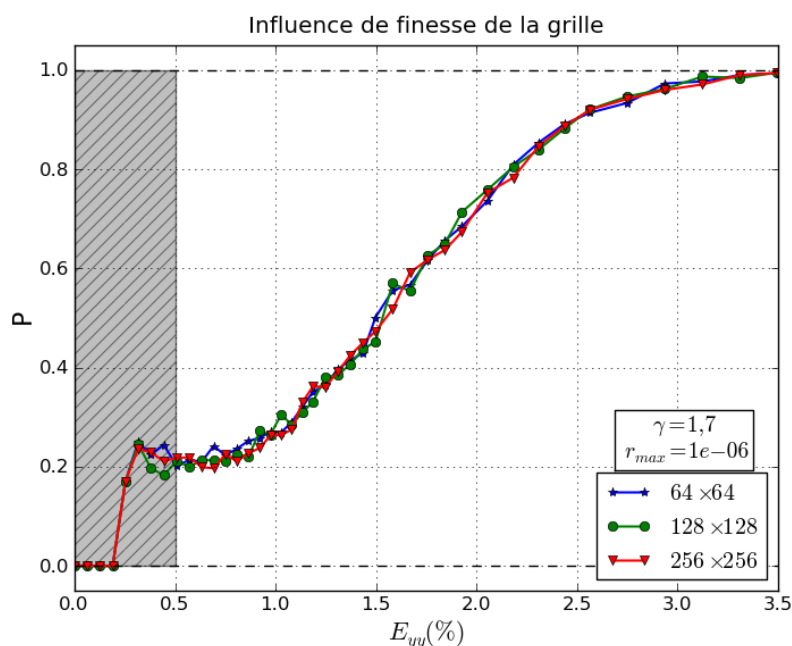


Figure 5.21 – Cas GA - Simulation avec PE - Influence de la finesse de la grille utilisée sur la probabilité de rupture : $\gamma_p = 1,7 \text{ Jm}^{-2}$, $r_{max} = 1 \mu\text{m}$

La figure 5.21 montre une superposition des courbes des différents cas. On en déduit comme dans le chapitre 4 que les résultats convergent dès la grille de 64×64 points et que la grille de 256×256 points est largement suffisante pour appliquer avec précision l'Approche Locale.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons construit notre modèle de l'Approche Locale de la rupture par clivage qui permet de prendre en compte de la variabilité spatiale de la microstructure du matériau dans l'estimation de la probabilité de rupture. Nous avons également réalisé des études paramétriques sur différents facteurs intervenant la probabilité de rupture. Ces études nous permettent de tirer des conclusions importantes.

Premièrement, on a montré que l'utilisation d'un seul calcul polycristallin pour estimer la probabilité de rupture de l'éprouvette n'est pas suffisante. On ne peut donc pas faire confiance au résultat. Dès lors, on confirme que la prise en compte de la variabilité spatiale de la microstructure dans l'estimation de la probabilité de rupture en réalisant un certain nombre de calculs polycristallins est nécessaire.

Deuxièmement, le tirage du nombre de carbures en chaque point considéré doit être fait avec une distribution de Poisson. De plus, la distribution de la taille de carbures a une très forte influence sur la probabilité de rupture, surtout dans les queues de ces distributions. Dès lors, dans des études sur la distribution de taille de carbures, il nous faut :

- bien traiter les données d'observations disponibles ;
- bien déterminer la taille maximale de carbure existante dans le matériau ;
- bien simuler des distributions tronquées à droite.

Ces deux aspects du tirage de carbures étudiés en détail dans ce mémoire doivent être repris dans tout calcul par l'Approche Locale, même si l'on n'utilise pas la partie "champ aléatoire".

Troisièmement, le fait de prendre une géométrie de grains aléatoire n'apporte pas grand chose du point de vue de la probabilité de rupture calculée. L'utilisation d'une seule géométrie fixe et des orientations cristallographiques aléatoires dans les calculs polycristallins est suffisante. Par ailleurs, une grille de projection des champs de contraintes de taille 64×64 points est suffisante tant au niveau d'identification des champs qu'au niveau d'estimation de la probabilité de rupture.

Finalement, le choix entre le champ de contrainte principale maximale σ_I et le champ de contrainte de clivage σ_{cliv} est important, mais moins que la distribution (et la troncature) de taille de carbures r_c et que la valeur de l'énergie de propagation γ_p .

Conclusions et perspectives

Conclusions

Le sujet de cette thèse consiste à identifier les propriétés du champ de contraintes dans les agrégats polycristallins et de l'utiliser le champ ainsi identifié dans l'Approche Locale de la rupture pour estimer la probabilité de rupture d'un volume élémentaire représentatif du matériau en fonction du chargement. Une telle modélisation complète dans un cadre général est un gros travail et ne peut pas être menée dans la limite d'une thèse. Dès lors, on se limite dans ces travaux de thèse à l'objectif principal : mise en œuvre de la méthodologie proposée dans l'introduction générale de ce mémoire, en prenant certaines hypothèses simplificatrices (*i.e.* gaussien, stationnaire et ergodique).

On peut résumer les travaux de cette thèse en trois parties principales : modélisation d'agrégats polycristallins, identification et simulation de champ de contraintes et Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique.

- Au niveau de la modélisation d'agrégats polycristallins, on a mis en œuvre les calculs aux éléments finis en prenant en compte la structure de grains, les orientations cristallographiques dans la modélisation pour le cas 2D. On montre par les observations des résultats que la modélisation représente bien les propriétés d'agrégats polycristallins du matériau. On a également réussi à projeter les champs de contraintes sur une grille régulière pour obtenir leurs réalisations sous un format adéquat pour l'identification des propriétés du champ aléatoire sous-jacent.
- Au niveau de l'identification et de la simulation des champs de contraintes, on a étudié différentes méthodes. Ces méthodes sont implémentées en langage de programmation Python et on les a comparé afin de choisir les méthodes les plus pertinentes pour la suite. Les méthodes choisies venant du domaine de traitement du signal dans le cas 1D sont développées pour les cas 2D et 3D dans ce travail. Elles sont ensuite appliquées pour identifier les propriétés des champs de contraintes. Les conclusions, conformes à l'intuition physique, confirment notre orientation de recherche et montrent une bonne implémentation des méthodes d'identification et de simulation.
- Au niveau de l'Approche Locale de la rupture, on a réussi à construire notre modèle par simulation de champ de contraintes. Ce modèle est ensuite appliqué pour estimer

la probabilité de rupture et pour réaliser des études paramétriques en utilisant les réalisations simulées du champ de contraintes.

En conclusion, on a réussi à mettre en œuvre la méthodologie proposée pour le cas simplifié (*i.e.* champ gaussien stationnaire en 2D). Toutes les étapes sont étudiées en détail et sont connectées les unes avec les autres. La méthodologie développée pourrait maintenant être améliorée en améliorant chacune de ces étapes. Ces perspectives sont présentées dans la section suivante.

Perspectives

Malgré des résultats satisfaisants tant au niveau de l'identification des propriétés aléatoires des champs de contrainte que pour leur post-traitement dans l'Approche Locale de la rupture, il pourrait être utile de raffiner la modélisation à différentes étapes de la méthodologie. Le paragraphe qui suit ouvre quelques perspectives dans ce sens.

Modélisation d'agrégats polycristallins

- Il est clair qu'un calcul d'agrégats polycristallins bidimensionnel présente des limitations dans la modélisation de la microstructure, du comportement mécanique et du comportement à la rupture du matériau. Un développement de la modélisation d'agrégats polycristallins dans les cas multi-triaxialité, tridimensionnel ([Mathieu, 2006](#); [Osipov, 2007](#)) et leur intégration dans notre méthodologie constituent une des perspectives importantes de ce travail. Dans une telle modélisation 3D, les grains portent leur vraie forme au lieu de la forme extrudée comme dans le cas 2D. De plus, la condition de déformation plane n'est pas nécessaire dans ce cas. Il est probable que la structure de variabilité spatiale d'un champ de contraintes tridimensionnel sera différent des résultats obtenus en 2D.
- La limitation à l'échelle de grains de la modélisation influence non seulement le champ de contraintes, mais aussi la probabilité de rupture via la réduction des obstacles microstructuraux. Une modélisation plus fine (*i.e.* à l'échelle des paquets de lattes) ([Osipov, 2007](#)) pourrait fournir des résultats sensiblement différents.
- La structure d'agrégats complètement aléatoire ne reproduit probablement pas les propriétés précises de la vraie microstructure du matériau. Une méthode de construction de la microstructure à partir des observations expérimentales ([Jeulin et Ostoja-Starzewski, 2001](#); [Osipov, 2007](#); [Kouchmeshky et Zabaras, 2010](#)) pourrait être testée dans le cadre de notre méthodologie : on réaliserait alors chacun des calculs aux éléments finis à partir d'une image obtenue par l'expérimentation, au prix d'une plus grande lourdeur de mise en œuvre.
- La qualité des réalisations des champs de contraintes résultant des calculs aux éléments finis joue un rôle décisif dans le problème d'identification. Il nécessite donc

de réaliser des études sur les conditions aux limites (Barbe, 2000; Dang et al., 2011b) pour réduire l'effet de bord sur les champs de contraintes.

Identification et simulation des champs de contraintes

- Malgré une bonne identification et une bonne simulation des champs de contraintes réalisées dans ces travaux, il est clair que les hypothèses (*i.e.* gaussien, ergodique et stationnaire) sont très fortes. Les méthodes d'identification et de simulation présentées dans ce mémoire ne s'appliquent que sous cette hypothèse.
- Comme indiqué dans le chapitre 4, dans le cas de champs non-gaussiens (éventuellement non stationnaires), on pourrait appliquer le modèle non-paramétrique récemment développé par Soize (2005, 2010, 2011); Guillemintot (2008) pour identifier les propriétés des champs de contraintes.

Approche Locale de la rupture

- Dans notre modèle d'Approche Locale de la rupture, les inclusions de carbures sont supposés réparties régulièrement aux points considérés de la grille de calcul. Mais en réalité, elles se répartissent aléatoirement dans la matrice ferritique. Dès lors, il est envisageable de prendre en compte la *distribution spatiale* des inclusions de carbures dans la modélisation. A partir d'observations, on pourrait modéliser la distribution spatiale des carbures par un processus ponctuel de Poisson, éventuellement non homogène. On pourrait également prendre en compte de façon plus réaliste la configuration des carbures par rapport aux joints de grains.
- L'énergie de propagation γ_p présente une forte influence sur la probabilité de rupture \mathbb{P}_R . Mais les valeurs de ce paramètre trouvées dans la littérature sont encore dispersées. Il serait intéressant de mieux caractériser la valeur de ce paramètre ou bien de considérer ce paramètre comme une variable aléatoire dans la modélisation.

Bibliographie

- Anderson, T. (2005). *Fracture mechanics*. CRC Press.
- Bailey, T. et A. Gatrell (1995). *Interactive spatial data analysis*. Longman Scientific & Technical.
- Barbato, M. et J. Conte (2007). Spectral characteristics of non-stationary random processes : Theory and applications to linear structural models. *Prob. Eng. Mech.*, 23, 416–426.
- Barbe, F. (2000). *Étude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Barbe, F., L. Decker, D. Jeulin, et G. Cailletaud (2001). Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part I : F.E. model. *Int. J. Plasticity*, 17, 513–536.
- Bartlett, M. (1948). Smoothing periodograms from time-series with continuous spectra. *Nature*, 161, 686–687.
- Baudoin, G. et J. Bercher (2001). *Transformée de Fourier discrète*. Notes de cours, ESIEE, Paris, France, 28 pages.
- Beremin, F. (1983). A local criterion for cleavage fracture of a nuclear pressure vessel steel. *Metall. Trans. A*, 14A, 2277–2287.
- Besson, J., C. Berdin, S. Bugat, R. Desmorat, F. Feyel, S. Forest, E. Lorentz, E. Maire, T. Pardoen, A. Pineau, et B. Tanguy (2004). *Local approach to fracture*. Presses de l'École des Mines ParisTech.
- Blonski, P. et A. Kiejna (2004). Calculation of surface properties of BCC iron. *Vacuum*, 74, 179–183.
- Bocchini, P. et G. Deodatis (2008). Critical review and latest developments of a class of simulation algorithms for strongly non-Gaussian random fields. *Prob. Eng. Mech.*, 23, 393–407.
- Bordet, S., A. Kartensen, D. Knowles, et C. Wiesner (2005). A new statistical local criterion for cleavage fracture in steel. Part I : model presentation. *Eng. Frac. Mech.*, 72, 435–452.
- Bowen, P. (1984). *Effects of microstructure on toughness in pressure vessel steel*. Thèse de Doctorat, University of Cambridge.

- Bradford Barber, C., D. Dobkin, et H. Huhdanpaa (1996). The Quickhull algorithm for convex hulls. *ACM Trans. Math. Software*, 22(4), 469–483.
- Broersen, P. (2006). *Automatic autocorrelation and spectral analysis*. Springer.
- Cailletaud, G. (1988). Une approche micromécanique du comportement des polycristaux. *Rev. Phys. Appl.*, 23, 353–365.
- Chell, G., A. Curry, C. Howard, J. Kameda, T. Lindley, L. McCartney, C. McMahon, E. Smith, V. Vitek, et A. Willoughby (1981). *Developments in fracture mechanics-2*. Applied science publishers.
- Chilès, J. et P. Delfiner (1999). *Geostatistics : Modeling spatial uncertainty*. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley.
- Cooley, J. W. et J. W. Tukey (1965). An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Math. Comput.*, 19, 297–301.
- Cottrell, A. (1958). Theory of brittle fracture in steel and similar metals. *Trans. Metall. Soc. of AIME*, 211, 192–203.
- Cressie, N. (1991). *Statistics for spatial data*. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley.
- Curry, D. et I. Knott (1978). Effect of microstructure on cleavage fracture stress in mild steel. *Metal. Sci.*, 12, 511–514.
- Curry, D. et I. Knott (1979). Effect of microstructure on cleavage fracture toughness of quenched and tempered steels. *Metal. Sci.*, pp. 341–345.
- Dang, H., B. Sudret, M. Berveiller, et A. Zeghadi (2011a). Identification of random stress fields from the simulation of polycrystalline aggregates. In *Proc. 1st Int. Conf. Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC), Barcelona, Spain*.
- Dang, H., B. Sudret, M. Berveiller, et A. Zeghadi (2011b). Statistical inference of 2D random stress fields obtained from polycrystalline aggregate calculation. In *Proc. 2nd Int. Conf. Mat. Model. (ICMM2), Paris, France*.
- Dang, X., B. Sudret, et M. Berveiller (2011c). Benchmark of random fields simulation methods and links with identification methods. In Faber, M., J. Köhler, et K. Nishijima (Eds.), *Proc. 11th. Int. Conf. on Applications of Stat. and Prob. in Civil Engineering (ICASP11), Zurich, Switzerland*.
- Deodatis, G. (1996). Non-stationary stochastic vector processes : seismic ground motion applications. *Prob. Eng. Mech.*, 11, 149–168.
- Deodatis, G. et R. Micaletti (2001). Simulation of highly skewed non-Gaussian stochastic processes. *J. Eng. Mech.*, 127(12), 1284–1295.
- Der Kiureghian, A. et J. Ke (1988). The stochastic finite element method in structural reliability. *Prob. Eng. Mech.*, 3(2), 83–91.
- Diard, O. (2005). Basis for modifications to the standard Beremin and Master Cuve models. Technical report, EDF R&D - Renardières.
- Diard, O., S. Leclercq, G. Rousselier, et G. Cailletaud (2002). Distribution of normal stress at grain boundaries in multicrystals : application to an intergranular damage modelling. *Comp. Mat. Sci.*, 25, 73–84.

- Dietrich, C. et G. Newsam (1993). A fast and exact method for multidimensional Gaussian stochastic simulation. *Water Resour. Res.*, (8), 2861–2869.
- Engerand, J. (1990). Mécanique de la rupture. *Techniques de l'ingénieur*, (B 5 060), 1–12.
- Fivel, M. et S. Forest (2004). Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal. *Techniques de l'Ingénieur*, (M 4 016).
- François, D., A. Pineau, et A. Zaoui (1993). *Comportement mécanique des matériaux : Viscoplasticité, endommagement, mécanique de la rupture et mécanique du contact*. Hermès.
- Fuentes, M. (2000). *Fitting algorithms for the semivariogram and examples. Notes de cours ST 810M : Spatial statistics, lecture 4-8*. North Carolina State University, Raleigh.
- Ghanem, R. et P. Spanos (2003). *Stochastic Finite Elements : A Spectral Approach*. Courier Dover Publications.
- Gilbert, E. (1962). Random subdivisions of space into crystals. *Ann.Math.Stat.*, 33(3), 958–972.
- Gourgues, A., H. Flower, et T. Lindly (2000). Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures. *Mater. Sci. Tech.*, 16, 26–40.
- Griffith, A. (1921). The phenomena of rupture and flow in solids. *Phil. Trans. R. Soc. London*, 221, 163–198.
- Guilleminot, J. (2008). *Modélisation stochastique mésoscopique de milieux aléatoires : application à un polymère renforcé de fibres longues*. Thèse de Doctorat, Université de Lille 1.
- Hahn, G. (1984). The influence of microstructure on brittle fracture toughness. *Metall. Trans.*, 15, 947–959.
- Harris, F. (1978). On the use of windows for harmonic analysis with the discrete Fourier transform. In *Proceedings of the IEEE*, volume 66, pp. 51–83.
- Hausild, P. (2002). *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, École Centrale Paris.
- Hausild, P., C. Berdin, et P. Bompard (2005). Prediction of cleavage fracture for a low-alloy steel in the ductile-to-brittle transition temperature range. *Mater. Sci. Eng., A* 391, 188–197.
- Hearn, G. et A. Metcalfe (1995). *Spectral analysis in engineering*. Elsevier. University of Newcastle upon Tyne.
- Im, Y. et B. Lee (2004). Effect of microstructure on the cleavage fracture strength of low carbon Mn-Ni-Mo bainitic steel. *J. Nucl. Mat.*, 234, 33–40.
- Jeulin, D. et M. Ostojca-Starzewski (2001). *Mechanics of random and multiscale microstructures*. Springer.
- Journal, A. et C. Huijbregts (2003). *Mining Geostatistics*. The Blackburn Press.

- Kanit, T., S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, et D. Jeulin (2003). Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach. *Int. J. Solids. Struct.*, 40, 3647–3679.
- Karhunen, K. (1947). Über linear Methoden in der Warscheinlichkeitsrechnung. *Annal. Acad. Sci. Fennicae*, 37, 1–79.
- Kitanidis, P. (1983). Statistical estimation of polynomial generalized covariance functions and hydrologic applications. *Water Resour. Res.*, 19(4), 909–921.
- Kitanidis, P. (1987). Parametric estimation of covariances of regionalized variables. *Water Resour. Bull.*, 23(4), 557–567.
- Kobayashi, H., B. Mark, et W. Turin (2012). *Probability, Random Processes, and Statistical Analysis*. Cambridge University Press.
- Kouchmeshky, B. et N. Zabararas (2010). Microstructure model reduction and uncertainty quantification in multiscale deformation processes. *Comput. Mater. Sci*, 48, 213–227.
- Kozintsev, B. (1999). *Computations with Gaussian random fields*. Thèse de Doctorat, University of Maryland.
- Krige, D. (1951). A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. *J. Chem. Metall. Min. Soc.*, 52, 119–139.
- Kroon, M. et J. Faleskog (2002). A probabilistic model for cleavage fracture with a length scale - influence of material parameters and constraint. *Int. J. Fract.*, 118, 99–118.
- Lacroix, J. et P. Baldi (2005). *Processus stationnaire et prévision*. Laboratoire de Probabilités et Modèles Aléatoires - Université Pierre et Marie Curie. Support de cours - Master de mathématique.
- Lambert-Perlade, A. (2001). *Rupture par clivage de microstructure d'aciers bainitiques obtenues en conditions de soudage*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Laug, P. et H. Borouchaki (1999). BLSURF-mesh generator for composite parametric surface. Technical Report 0235, INRIA. User's Manual (November 1999).
- Le Corre, V. (2006). *Étude de la compétition de la déchirure ductile - rupture fragile : Application à la tenue mécanique des tubes en acier C-Mn et de leurs joints soudés*. Thèse de Doctorat, École Centrale de Lille.
- Lee, S., S. Kim, B. Hwang, B. Lee, et C. Lee (2002). Effet of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel. *Acta Mater.*, 50, 4755–4762.
- Lemaitre, J. (1996). *A Course on Damage Mechanics*. Springer.
- Li, C. et A. Der Kiureghian (1993). Optimal discretization of random fields. *J. Eng. Mech.*, 119(6), 1136–1154.
- Li, Z., B. Wen, et N. Zabararas (2010). Computing mechanical response variability of polycrystalline microstructures through dimensionality reduction techniques. *Comput. Mater. Sci*, 49, 568–581.
- Libert, M. (2007). *Étude expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Thèse de Doctorat, École Centrale Paris.

- Libert, M., C. Rey, L. Vincent, et B. Marini (2011). Temperature dependant polycrystal model application to bainitic steel behavior under tri-axial loading in the ductile–brittle transition. *Int. J. Solids. Struct.*, 48(14–15), 2196 – 2208.
- Lin, T. et A. Evans (1987). Stochastic modelling of the independent roles of particle size and grain size in transgranular cleavage fracture. *Metall. Trans. A*, 18, 641–651.
- Loève, M. (1948). *Fonctions aléatoire du seconde ordre*. Note in P. Levi's Processus stochastiques et mouvement Brownien, Gauthier-Villars, Paris.
- Lophaven, S., H. Nielsen, et J. Sondergaard (2002). DACE, a Matlab kriging toolbox. Technical report, Informatics and Mathematical Modelling (IMM) - Technical University of Denmark.
- Marcotte, D. (2009). *Géostatistique et Géologie minière*. École polytechnique de Montréal, Canada.
- Margolin, B., A. Gulenko, et V. Shvetsova (1998). Improved probalistic model for fracture toughness prediction based for nuclear pressure vessel steels. *Int. J. of Press. Vessels and Piping*, 75, 843–855.
- Margolin, B. et V. Shvetsova (1996). Local criterion for cleavage fracture : structural and mechanical approach. *J. Phys. IV*, (C6), 225–234.
- Matheron, G. (1962). *Traité de géostatistique appliquée*, Technip edition.
- Matheron, G. (1963a). Principles of geostatistics. *Economic Geology*, 58, 1246–1266.
- Matheron, G. (1963b). *Traité de géostatistique appliquée, II*, B. R. G. M., Paris edition.
- Matheron, G. (1973). The intrinsic random functions and their applications. *Adv. Appl. Prob.*, 5, 439–468.
- Mathieu, J. (2006). *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : Prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- Mathieu, J., K. Inal, S. Berveiller, et O. Diard (2010). A micromechanical interpretation of the temperature dependence of Beremin model parameters for French RPV steel. *J. Nucl. Mat.*, 406, 97–112.
- Méric, L. et G. Cailletaud (1991). Single crystal modelling for structural calculation : Part 2 - F.E. Implementation. *J. Eng. Mat. Tech.*, 113, 171–182.
- Milella, P. et N. Bonora (2000). On the dependence of the Weibull exponent on geometry and loading conditions and its implications on the fracture toughness probability curve using a local approach criterion. *Int. J. Fract.*, 104, 71–87.
- Nguyen, C. (2010). *Modélisation du comportement en plasticité et à rupture des aciers bainitiques irradiés*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Nowak, W. (2004). *Geostatistical methods for the identification of flow and transport parameters in the subsurface*. Thèse de Doctorat, Institut of Wasserbau - University of Stuttgart.
- Nygards, M. (2003). Number of grains necessary to homogenize elastic materials with cubic symmetry. *Mech. Mat.*, 35, 1049–1057.

- Ortner, S., J. Duff, et D. Beardsmore (2005). Characterization of Euro A reference steel for application of EOH model of brittle fracture. Technical Report SA/EIG/15234/R003, Project PERFECT, SERCO Assurance.
- Ortner, S. et C. Hipsley (1996). Two-component description of ductile to brittle transition in ferritic steel. *Mater. Sci. Tech.*, 12, 1035–1042.
- Osipov, N. (2007). *Génération et calcul de microstructures bainitiques, approche locale intragranulaire de la rupture*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Osipov, N., A. Gourgues-Lorenzon, B. Marini, V. Mounoury, F. Nguyen, et G. Cailletaud (2009). Finite element modelling of bainitic steels using crystal plasticity. *Philos. Mag.*, 88, 3757–3777.
- Patterson, H. et R. Thompson (1971). Recovery of inter-block information when block sizes are unequal. *Biometrika*, 58, 545–554.
- Pelissou, C., J. Baccou, Y. Monerie, et F. Perales (2009). Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites. *Int. J. Solids. Struct.*, 46, 2842–2855.
- Percival, D. (2006). Exact simulation of complex-valued Gaussian stationary processes via circulant embedding. *Signal Processing*, 86(7), 1470–1476.
- Pesci, R. (2004). *Étude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers - CER Metz.
- Phoon, K., H. Huang, et S. Quek (2005). Simulation of strongly non Gaussian processes using Karhunen-Loeve expansion. *Prob. Eng. Mech.*, 20(2), 188–198.
- Pineau, A. (2007). Development of the local approach to fracture over the past 25 years : Theory and applications. *Anal. Mech. Fractura*, 1, 9–24.
- Pommier, S. (2011). *Mechanisms at the origin of the deformation of materials*. Cours de l'École Normale Supérieure de Cachan.
- Popescu, R., G. Deodatis, et J. Prevost (1998). Simulation of homogeneous non Gaussian stochastic vector fields. *Prob. Eng. Mech.*, 13(1), 1–13.
- Preumont, A. (1990). *Vibrations aléatoires et analyse spectrale*. Presses polytechniques et universitaires romandes.
- Priestly, M. (1967). Power spectral analysis of non-stationary random processes. *J. Sound Vib.*, 6, 86–97.
- Renevey, S. (1998). *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Thèse de Doctorat, Université Paris XI Orsay - CEA.
- Renevey, S., S. Carassou, B. Marini, C. Eripret, et A. Pineau (1996). Ductile - brittle transition of ferritic steel modelled by the local approach to fracture. *J. Phys. IV*, (C6), 343–352.
- Rezaee, S. (2011). *Plasticité cristalline des aciers sphéroïdisés et clivage*. Thèse de Doctorat, École Centrale Paris.

- Rice, J. et D. Tracey (1973). *Numerical computer methods in structural mechanics*. Academic Press, New York.
- Richie, R., J. Knott, et J. Rice (1973). On the relationship between critical tensile stress and fracture toughness in mild steel. *J. Mech. Phys. Solids*, 21, 395–410.
- Rossoll, A., M. Tahar, C. Berdin, R. Piques, B. Forget, C. Prioul, et B. Marini (1996). Local approach of the Charpy test at low temperature. *J. Phys. IV*, (C6), 279–286.
- Ruste, J. (2012). *Les réacteurs nucléaires*. Ingénieur Senior EDF R&D.
- Sab, K. (1992). On the homogenization and the simulation of random materials. *Eur. J. Mech. Solids*, 11(5), 585–607.
- Sakamoto, S. et R. Ghanem (2001). Simulation of multi-dimensional non-Gaussian non-stationary random fields. *Prob. Eng. Mech.*, 17, 167–176.
- Saporta, G. (2006). *Probabilités, analyse des données et statistique*. Editions Technip, 2nd edition.
- Schlather, M. (1999). Introduction to positive definite functions and to unconditional simulation of random fields. Technical report, Department of Mathematics and Statistics, Lancaster University, UK.
- Schlather, M. (2009). Simulation and analysis of random fields. Technical report, Department of Mathematics and Statistics, Lancaster University, UK.
- Sherman, M. (2011). *Spatial statistics and spatio-temporal data*. Wiley Series in Probability and Statistics. Wiley. Texas A&M University, USA.
- Shinozuka, M. et G. Deodatis (1991). Simulation of stochastic processes by spectral representation. *App. Mech. Rev.*, 44(4), 191–204.
- Shumway, R. et D. Stoffer (2006). *Time series analysis and its applications*. Springer.
- Smith, E. (1966). The nucleation and growth of cleavage microcracks in mild-steel. In *Physical basis of yield and fracture*, pp. 36–46. Institute of Physics and Physical Society, Oxford London.
- Soize, C. (2005). A comprehensive overview of a non-parametric probabilistic approach of model uncertainties for predictive models in structural dynamics. *J. Sound Vib.*, 288, 623–652.
- Soize, C. (2010). Identification of high-dimension polynomial chaos expansions with random coefficients for non Gaussian tensor-valued random fields using partial and limited experimental data. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 199, 2150–2164.
- Soize, C. (2011). A computational inverse method for identification of non Gaussian random fields using the Bayesian approach in very high dimension. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 200, 3083–3099.
- Speyer, J. et W. Chung (2008). *Stochastic processes, estimation, and control*. Siam. University Canifornia, Los Angeles.
- Stoica, P. et R. Moses (2005). *Spectral analysis of signal*. Prentice Hall.
- Stroh, A. (1954). The formation of cracks as a result of plastic flow. *Proc. R. Soc. London A*, 223, 404–414.

- Sturges, H. (1926). The choice of a class interval. *J American Statistical Association*, pp. 65–66.
- Sudret, B. (2007). *Uncertainty propagation and sensitivity analysis in mechanical models – Contributions to structural reliability and stochastic spectral methods*. Habilitation à diriger des recherches, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, France, 173 pages.
- Sudret, B. et A. Der Kiureghian (2000). Stochastic finite elements and reliability : a state-of-the-art report. Technical Report UCB/SEMM-2000/08, University of California, Berkeley. 173 pages.
- Tanguy, B. (2001). *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture - Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Vanmarcke, E. (1988). *Random fields : analysis and synthesis*. The MIT Press, Cambridge, Massachussets.
- Wallin, K., K. Saario, et T. Törrönen (1984). Statistical model for carbide induced brittle fracture in steel. *Metal Sci.*, 18, 13–16.
- Welch, P. (1967). The use of Fast Fourier Transform for the estimation of power spectra : A method base on time averaging over short, modified periodograms. *IEEE Trans. Audio. Elec.*, AU-15(2), 70–73.
- Wiesner, C. et M. Goldthorpe (1996). The effet of temperature and specimen geometry on the parameters of the local approach to cleavage to fracture. *J. Phys. IV*, C6, 295–304.
- Wood, A. et G. Chan (1994). Simulation of stationary Gaussian processes. *J. Comput. Graph. Stat.*, 3(4), 409–432.
- Yamazaki, F. et M. Shinozuka (1988). Digital generation of non-Gaussian stochastic fields. *J. Eng. Mech.*, 114(7), 1183–1197.
- Zeghadi, A. (2005). *Effet de la morphologie tri-dimensionnelle et de la taille de grain sur le comportement mécanique d'agrégats polycristallins*. Thèse de Doctorat, École des Mines ParisTech.
- Zener, C. (1948). Fracturing of Metals. In *29th National Metal Congress and Exposition*, pp. 3–31. American Society for Metals.
- Zhang, J. et B. Ellingwood (1994). Orthogonal series expansions of random fields in reliability analysis. *J. Eng. Mech.*, 120(12), 2660–2677.
- Zhang, X. et J. Knott (1999). Cleavage fracture in bainitic and martensitic microstructures. *Acta Mater.*, 47, 3483–3495.

Abstract

This thesis is a contribution to the construction of the Local Approach to fracture at the microscopic scale using polycrystalline aggregate modeling. It consists in taking into account the spatial variability of the microstructure of the material. To do this, the micromechanical modeling is carried out by finite element analysis of polycrystalline aggregates. The random stress fields (maximum principal et cleavage stress) in the material representing the spatial variability of the microstructure are then modeled by a stationary ergodic Gaussian random field. The properties of the spatial variability of these fields are identified by an identification method, *e.g.* periodogram method, variogram method, maximum likelihood method. The synthetic realizations of the stress fields are then simulated by a simulation method, *e.g.* discrete Karhunen-Loève method, circulant embedding method, spectral method, without additional finite element calculations. Finally, a Local Approach to fracture by simulation of the cleavage stress field using the simulated realizations is constructed to estimate the rupture probability of the material.

Keywords: Local approach to fracture, polycrystalline aggregates, finite element simulation, cleavage stress, spatial variability, stationary Gaussian random fields, ergodicity, simulation of realizations, Karhunen-Loève expansion, circulant embedding method, identification, semi-variogram, periodogram.

Résumé

Cette thèse est une contribution à la construction de l'Approche Locale de la rupture à l'échelle microscopique à l'aide de la modélisation d'agrégats polycristallins. Elle consiste à prendre en compte la variabilité spatiale de la microstructure du matériau. Pour ce faire, la modélisation micromécanique du matériau est réalisée par la simulation d'agrégats polycristallin par éléments finis. Les champs aléatoires de contrainte (principale maximale et de clivage) dans le matériau qui représentent la variabilité spatiale de la microstructure sont ensuite modélisés par un champ aléatoire gaussien stationnaire ergodique. Les propriétés de variabilité spatiale de ces champs sont identifiés par une méthode d'identification, *e.g.* méthode du périodogramme, méthode du variogramme, méthode du maximum de vraisemblance. Des réalisations synthétiques des champs de contraintes sont ensuite simulées par une méthode de simulation, *e.g.* méthode Karhunen-Loève discrète, méthode "Circulant Embedding", méthode spectrale, sans nouveau calcul aux éléments finis. Enfin, le modèle d'Approche Locale de la rupture par simulation de champ de contrainte de clivage permettant d'y intégrer les réalisations simulées du champ est construit pour estimer la probabilité de rupture du matériau.

Mots-clés: Approche locale de la rupture, agrégats polycristallins, calculs aux éléments finis, contrainte de clivage, variabilité spatiale, champs aléatoires gaussiens stationnaires, ergodicité, simulation de réalisations, décomposition de Karhunen-Loève, méthode Circulant Embedding, identification, variogramme, périodogramme.