

Études stochastiques de l'influence de l'erreur de mesure de la texture sur les propriétés effectives d'un matériau polycristallin

Bingqian Li¹, Piotr Breitkopf¹, Ludovic Cauvin¹

¹ Université de Technologie de Compiègne, Alliance Sorbonne Université, Roberval, Centre de recherche Royallieu, CS 60319, 60203 Compiègne Cedex, France
Bingqian.Li@utc.fr, Piotr.Breitkopf@utc.fr, Ludovic.Cauvin@utc.fr

Résumé — Ce travail étudie la propagation de l'erreur de mesure de la texture cristallographique vers les propriétés effectives d'un matériau polycristallin. La texture et l'erreur étant modélisées par un processus gaussien (PG), deux approches de la propagation d'incertitude issues de la distribution *a posteriori* du PG — une déterministe et une stochastique — sont proposées et employées dans un cas thermique bidimensionnel. Les résultats obtenus mettent en évidence l'intérêt de l'approche stochastique pour l'identification de propriétés effectives avec incertitude.

Mots clés — texture, figure de pôles, régression par processus gaussien, homogénéisation stochastique, propagation d'incertitude

1 Introduction

Les caractérisations expérimentales de la microstructure d'un matériau fournissent des informations riches pouvant être exploitées pour une reconstruction digitale du matériau et une prédiction de ses propriétés effectives par homogénéisation en champ complet. Toutefois, le nombre d'essais d'imagerie demeure souvent limité et les mesures sont intrinsèquement entachées d'erreurs, ce qui soulève un défi pour la caractérisation stochastique des propriétés effectives.

Ce travail s'intéresse à ce défi en exerçant une étude de propagation d'incertitude sur la texture des matériaux polycristallins, *i.e.* la distribution des orientations cristallines. En s'appuyant sur un modèle stochastique de processus gaussien (PG) proposé dans [2], qui intègre explicitement l'erreur de mesure, la moyenne, les bornes de l'intervalle de confiance à 95 % de la distribution *a posteriori* ainsi que les tirages stochastiques sont exploités dans une procédure d'homogénéisation en champ complet. Cette approche permet d'obtenir une caractérisation stochastique des propriétés effectives du matériau.

La texture est typiquement mesurée par diffraction d'électrons rétrodiffusés (EBSD). Cette information présente un intérêt particulier pour l'étude de l'anisotropie macroscopique du matériau. En effet, en raison de l'existence de systèmes de glissement au niveau du réseau cristallin, les propriétés et la réponse du matériau sont généralement anisotropes à cette échelle, de sorte que la distribution des orientations cristallines exerce une influence directe sur l'anisotropie observée à l'échelle macroscopique.

La mesure EBSD fournit des orientations cristallines discrètes, chacune associée à une densité. Une orientation cristalline étant tridimensionnelle, elle est décrite par un triplet d'angles d'Euler. Lorsqu'un système de glissement donné est considéré, l'orientation de chaque membre de la famille de plans cristallographiques associée peut être représentée par son vecteur normal. La projection de ce vecteur sur une sphère unité permet de définir cette orientation par un couple d'angles d'azimut et d'élévation, soit bidimensionnelle après cette projection. Une telle orientation décrivant la direction d'un plan cristallographique est appelée un *pôle*.

Dans ce travail, on s'intéresse à la variabilité de la densité des pôles mesurés. Les mesures étant discrètes, le vecteur contenant les densités de pôles mesurées est appelé *Pole Density Vector* (PDV). Lorsque la texture est mesurée par EBSD, c'est-à-dire sous forme d'orientations tridimensionnelles, celles-ci doivent d'abord être projetées sur la sphère unité en sélectionnant une famille de plans cristallographiques d'intérêt. Il existe également des techniques de mesure directe des pôles, telles que la diffraction des rayons X. Dans tous les cas, le vecteur des densités de pôles mesurées est désigné comme *Observed PDV* (OPDV) dans la suite.

Dans ce cadre, la mesure est supposée exacte et l'objectif est d'y introduire une erreur de mesure afin d'étudier la variation correspondante des propriétés effectives macroscopiques. L'utilisation de la régression par processus gaussien (RPG) permet de prendre explicitement en compte cette erreur de mesure à travers un hyperparamètre de bruit.

En considérant l'OPDV comme référence, deux approches stochastiques de description de la texture bruitée sont proposées sur la base de la distribution *a posteriori* du PG. Au total, trois types de PDV sont ainsi considérés :

- *OPDV* : les mesures considérées exactes, sans erreur de mesure ;
- *MPDV et bornes du PG* : Mean Pole Density Vector, correspondant à la moyenne *a posteriori* du PG ; les bornes supérieure et inférieure de l'intervalle de confiance (IC) à 95%, obtenues en ajoutant ou retranchant 1.96 fois l'écart-type *a posteriori* à la MPDV ; il s'agit d'estimations déterministes de l'incertitude ;
- *SPDVs* : Sampled Pole Density Vectors, correspondant à des échantillons aléatoires tirés de la distribution *a posteriori* du PG.

La Section 2 présente les éléments mathématiques nécessaires des reconstructions de PDV, lesquelles sont ensuite utilisées dans un problème bidimensionnel en conduction thermique visant à déterminer par homogénéisation la conductivité effective du matériau polycristallin. Les formulations associées à l'homogénéisation sont données en Section 3. Enfin, la Section 4 compare et discute les résultats des conductivités effectives obtenues à partir des trois types de PDV considérés comme données d'entrée.

2 Reconstruction des *Pole Density Vectors* (PDV) par Régression par Processus Gaussien (RPG)

Notons un PDV sous la forme $P_h(\mathbf{y})$, où h désigne une famille de plans cristallographiques et \mathbf{y} correspond à un ensemble de N orientations bidimensionnelles représentées par des points sur la surface sphérique, c'est-à-dire

$$\mathbf{y} = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}, \quad y_i \in S^2, \quad S^2 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}.$$

Dans ce travail, on suppose que l'erreur de mesure affecte la densité mesurée, mais non l'orientation détectée. Ainsi, en fixant \mathbf{y} , $P_h(\mathbf{y})$ peut être représenté par le vecteur des densités correspondantes, $\mathbf{d} = \langle d_1, d_2, \dots, d_N \rangle^\top$. La condition de normalisation est simplifiée à $\sum_{i=1}^N d_i = 1$.

Afin d'imposer la contrainte de non-négativité aux densités reconstruites, une transformation logarithmique a été proposée dans [2]. Dans un premier temps, la densité expérimentale d est transformée en d_{li} selon l'Éq. (1) :

$$d_{\text{li}} = f_{\text{li}}(d) = \begin{cases} \ln(d) & \text{si } d \leq d_0, \\ \frac{1}{d_0} d + \ln(d_0) - 1 & \text{si } d > d_0, \end{cases} \quad (1)$$

puis la RPG est appliquée dans cet espace transformé. Le résultat \tilde{d}_{li} est ensuite reconverti dans l'espace original, où la non-négativité est garantie, via :

$$\tilde{d} = f_{\text{li}}^{-1}(\tilde{d}_{\text{li}}) = \begin{cases} \exp(\tilde{d}_{\text{li}}) & \text{si } \tilde{d}_{\text{li}} \leq \ln(d_0), \\ d_0 \cdot (\tilde{d}_{\text{li}} - \ln(d_0) + 1) & \text{si } \tilde{d}_{\text{li}} > \ln(d_0). \end{cases} \quad (2)$$

Lorsqu'elle est appliquée à un vecteur, les transformations f_{li} et f_{li}^{-1} opèrent indépendamment sur chaque composante.

La moyenne *a posteriori* de la RPG, notée $\tilde{\mathbf{d}}$ et correspondant au MPDV, est donnée par

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{d}} &= f_{\text{li}}^{-1}(\tilde{\mathbf{d}}_{\text{li}}) \\ &= f_{\text{li}}^{-1}(\mathbf{C}(\mathbf{C} + \sigma_n^2 \mathbf{I})^{-1} f_{\text{li}}(\mathbf{d})), \end{aligned} \quad (3)$$

où \mathbf{C} est la matrice de covariance de taille $N \times N$, définie par la fonction de noyau :

$$C_{ij} = \sigma_f^2 k(\text{dist}(y_i, y_j), \ell), \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (4)$$

$\{\sigma_f, \ell\}$ étant deux hyperparamètres du noyau k à optimiser. L'hyperparamètre de bruit σ_n , qui modélise l'incertitude de mesure, est considéré comme une fraction de la densité maximale observée :

$$\sigma_n = \alpha \cdot d_{\max}, \quad \text{où} \quad d_{\max} = \max_{i=1, \dots, N} f_{\text{li}}(d_i). \quad (5)$$

Les bornes de l'IC à 95 % du PG sont données par

$$IC_{0.95} = [IC_{0.95}^{\text{Inf}}, IC_{0.95}^{\text{Sup}}] \quad (6)$$

$$= [f_{\text{li}}^{-1}(\tilde{\mathbf{d}}_{\text{li}} - 1.96 \tilde{\sigma}_{\text{li}}), f_{\text{li}}^{-1}(\tilde{\mathbf{d}}_{\text{li}} + 1.96 \tilde{\sigma}_{\text{li}})], \quad (7)$$

où $\tilde{\sigma}_{\text{li}}$ est le vecteur des écarts-types *a posteriori*. Pour un $y \in S^2$ donné, on a

$$\tilde{\sigma}_{\text{li}}(y) = \sqrt{\sigma_f^2 k(y, y) - \mathbf{c}^\top (\mathbf{C} + \sigma_n^2 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{c}}, \quad (8)$$

où \mathbf{c} désigne le vecteur de covariance $N \times 1$ entre y et chacune des orientations mesurées :

$$c_i = \sigma_f^2 k(y, y_i), \quad i = 1, \dots, N. \quad (9)$$

Finalement, les SPDV, notés $P_h^{(i)}(\mathbf{y})$, sont générés en pratique en tirant des échantillons selon une distribution normale multivariée définie par la moyenne *a posteriori* $\tilde{\mathbf{d}}_{\text{li}}$ et la matrice de covariance *a posteriori* Σ :

$$f_{\text{li}}(P_h^{(i)}(\mathbf{y})) \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{d}}_{\text{li}}, \Sigma). \quad (10)$$

La matrice Σ est donnée par

$$\Sigma = \frac{1}{\sigma_f^2} \text{diag}(\tilde{\sigma}_{\text{li}}) \mathbf{C} \text{diag}(\tilde{\sigma}_{\text{li}}). \quad (11)$$

3 Homogénéisation de la conductivité effective

L'homogénéisation en champ complet nécessite la construction d'un Volume Élémentaire Représentatif (VER) reproduisant la microstructure du matériau. Dans le cas d'un matériau polycristallin, la taille du VER est définie par le nombre de grains et doit être suffisamment grande pour que le comportement effectif du VER soit représentatif du comportement macroscopique du matériau polycristallin considéré. Les propriétés physiques effectives du VER peuvent être obtenues par des simulations numériques ou calculées analytiquement.

Dans ce travail, les différents PDVs (OPDV, MPDV, $IC_{0.95}$, SPDVs) sont évaluées sur la conductivité effective du matériau en considérant un problème de conduction thermique bidimensionnelle dans le plan X - Y (voir Fig. 1). Les PDVs servent à définir la texture du VER. Les hypothèses suivantes sont adoptées pour qu'un seul PDV soit suffisant pour la caractérisation de la texture du VER :

- le matériau est monophasé (un seul type de grain) et présente un réseau HCP;
- tous les grains du VER ont une taille uniforme;
- la conductivité d'un grain est isotrope transverse, l'axe d'isotropie transverse étant aligné sur la direction cristallographique $[0\ 0\ 0\ 1]$;
- les PDV correspondent à la famille de plans basaux $\{0\ 0\ 0\ 1\}$;
- l'erreur de mesure affecte uniquement la densité mesurée et non l'orientation du grain.

La conductivité cristalline locale est fixée à

$$\mathbf{k}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 100 \end{bmatrix} \text{W}/(\text{mK}) \quad (12)$$

et doit être convertie dans le repère global en fonction de l'orientation y assignée à chaque grain.

$$\mathbf{k}(y) = \mathbf{R} \mathbf{k}_0 \mathbf{R}^\top = \begin{bmatrix} k_{XX} & k_{XY} & k_{XZ} \\ & k_{YY} & k_{YZ} \\ \text{sym} & & k_{ZZ} \end{bmatrix}. \quad (13)$$

\mathbf{R} est une matrice de rotation satisfaisant $\mathbf{R}\mathbf{n} = \mathbf{y}$, avec $\mathbf{n} = \langle 0, 0, 1 \rangle^\top$ correspondant au vecteur normal au plan basal. Comme on s'intéresse à un problème bidimensionnel dans le plan X - Y , seules les composantes k_{XX} , k_{XY} et k_{YY} sont nécessaires.

Le VER est composé de 2400 grains de taille uniforme, générés à l'aide d'un diagramme de Voronoï aléatoire avec *Neper* [4]. Il est maillé par des éléments T3, avec environ 270 éléments par grain. Ces choix sont validés par une étude de convergence.

Afin que le VER respecte la texture définie par le PDV, il est nécessaire d'attribuer aux grains un ensemble d'orientations $\mathbf{y}^* = \{y_1^*, y_2^*, \dots, y_{2400}^*\}$ tel que

$$\frac{1}{2400} \sum_{i=1}^{2400} \delta(y_i^*, y_j) \approx d_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (14)$$

où δ désigne le delta de Kronecker. Avec ce processus d'attribution d'orientations, la géométrie microstructurale ainsi que le maillage du VER peuvent être fixés. Une alternative consisterait à utiliser un nombre identique d'orientations N et de grains, et à faire varier la taille des grains afin de respecter la texture imposée. Toutefois, cette approche est plus complexe à mettre en œuvre et n'est pas retenue dans le présent travail.

L'homogénéisation du VER est réalisée en imposant des conditions aux limites de type *Uniform Temperature Gradient* [5]. Un gradient de température uniforme est appliqué sur le contour du VER. Deux simulations sont effectuées : la première avec un gradient dirigé selon X , la seconde selon Y . Le tenseur de conductivité effective est alors déterminé en combinant les résultats de ces deux simulations. Enfin, en suivant la méthode proposée dans [1], le tenseur de conductivité effective est noté

$$\langle \mathbf{k}_{XY} \rangle = \begin{bmatrix} \langle k_{XX} \rangle & \langle k_{XY} \rangle \\ \langle k_{XY} \rangle & \langle k_{YY} \rangle \end{bmatrix}. \quad (15)$$

4 Expérimentation numérique

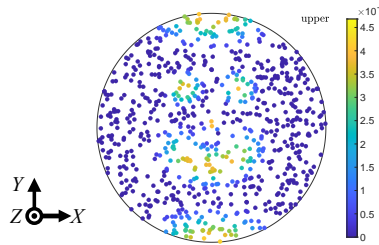


FIGURE 1 – OPDV de 1500 orientations détectées (vue de dessus de la sphère)

La figure 1 illustre un OPDV contenant 1500 orientations détectées [2]. À partir de cet OPDV comme donnée d'entrée, la RPG est appliquée pour évaluer le MPDV, les bornes de l'IC à 95% ainsi que plusieurs SPDVs. Le modèle de PG utilise une fonction de noyau de type Matérn ($\nu = 5/2$) associée à une distance géodésique. Ces choix, ainsi que l'optimisation des hyperparamètres du noyau, sont établis par la maximisation de la vraisemblance marginale.

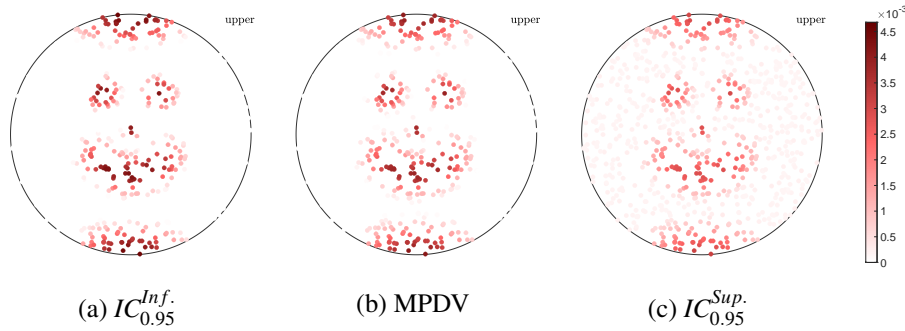


FIGURE 2 – La moyenne et les bornes de l’IC à 95% de la distribution *a posteriori* du PG pour $\alpha = 0.05$ (vue de dessus de la sphère).

La figure 2 présente les résultats de la RPG pour un niveau de bruit de $\alpha = 0,05$ (voir Éq. (5)). On observe que le MPDV et l’ $IC_{0.95}^{Inf.}$ ne présentent pas de différences marquées, bien qu’une légère tendance à une localisation accrue de la texture soit perceptible pour l’ $IC_{0.95}^{Inf.}$. En revanche, l’ $IC_{0.95}^{Sup.}$ montre une distribution plus étendue des densités, avec l’apparition de valeurs non nulles dans les régions où aucune densité n’est mesurée, ce qui traduit une tendance à l’uniformisation de la texture.

Il convient de noter que cette observation vient du fait que, dans cet exemple, les orientations mesurées sont relativement uniformément distribuées sur la sphère. Si elles présentaient au contraire une distribution plus localisée, l’ajout d’une erreur de mesure ne conduirait pas à une tendance à l’uniformisation de la texture.

Ce comportement s’explique par l’augmentation du niveau de bruit α , qui accroît l’incertitude associée aux densités mesurées et conduit à une élévation de l’écart-type *a posteriori* (voir Éq. (8)). Ainsi, la borne supérieure présente des densités non nulles dans les régions dépourvues de mesures, tandis que pour la borne inférieure, une valeur proportionnelle à l’écart-type est soustraite. Toutefois, en raison de la transformation log-linéaire, la densité demeure non-négative, ce qui limite la différence observée avec la valeur mesurée.

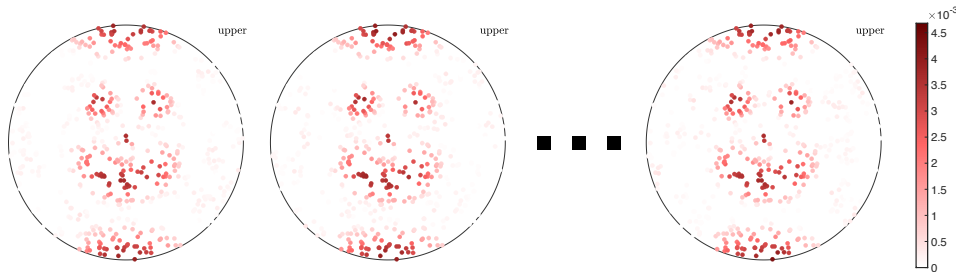


FIGURE 3 – Exemples de SPDVs pour $\alpha = 0.05$ (vue de dessus de la sphère).

La figure 3 présente plusieurs tirages aléatoires de SPDVs issus de la distribution *a posteriori* du PG, illustrant des représentations plausibles de la texture compte tenu de l’incertitude de mesure. Les SPDVs se situent généralement entre le MPDV et l’ $IC_{0.95}^{Sup.}$, avec certaines orientations initialement nulles présentant une densité faible. Cette caractéristique apparaît à différents endroits de la sphère selon les tirages, ce qui reflète la nature stochastique de l’approche.

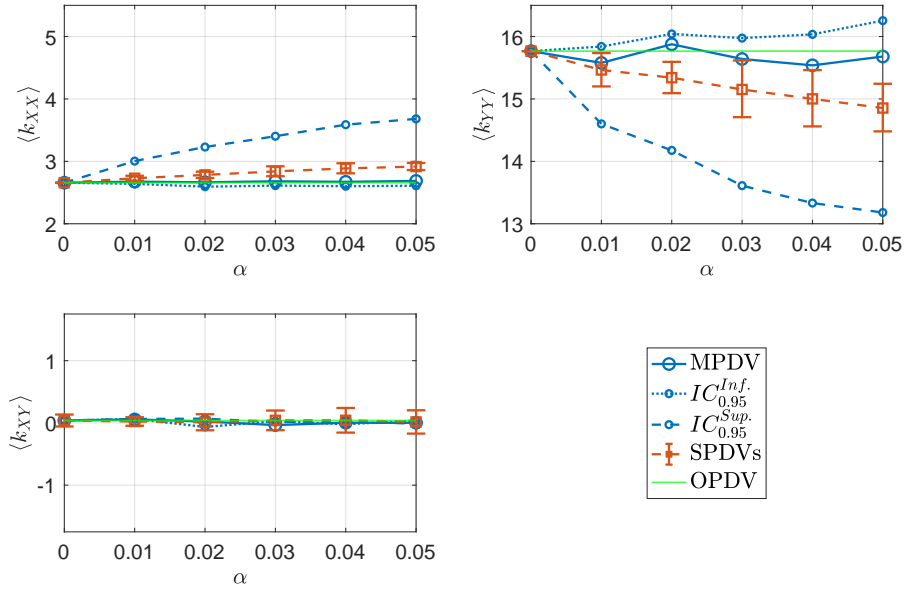


FIGURE 4 – Comparaison des conductivités effectives obtenues par les trois types de PDVs en fonction du niveau de bruit α .

En Figure 4 les composantes de la conductivité effective obtenues après une procédure d’homogénéisation considérant les trois types de PDVs sont comparées pour un niveau de bruit α variant de 0 à 5%. Quand $\alpha = 0$, tous les PDVs reproduisent l’OPDV comme l’écart-type *a posteriori* aux orientations mesuré est nul (Éq. (8)). Par conséquent, les conductivités effectives issues des approches différentes coïncident. Lorsque α augmente, les conductivités effectives dérivées du MPDV restent proches de celles obtenues à partir de l’OPDV, montrant une bonne robustesse de cette approche déterministe face à l’erreur de mesure. En revanche, les conductivités effectives issues des bornes de l’IC à 95% divergent progressivement de celles basées sur l’OPDV, avec une tendance vers l’anisotropie pour l’ $IC_{0.95}^{Inf}$ et vers l’isotropie pour l’ $IC_{0.95}^{Sup}$. Cette observation, en étant en accord avec l’observation directe aux figures de pôles, souligne que l’approche déterministe peut conduire à des estimations extrêmes et divergeant des propriétés effectives lorsque l’incertitude de mesure augmente. On peut souligner que ces bornes ne sont que des courbes d’enveloppe et ne fournissent pas d’information sur la distribution réelle des propriétés effectives.

En revanche, les conductivités effectives obtenues à partir des SPDVs sont ajustées à un modèle log-normal, dont le mode et l’intervalle de confiance à 95% sont représentés sous forme de barres d’erreur. On observe que le mode des conductivités effectives issues des SPDVs présente une tendance similaire à celle de l’ $IC_{0.95}^{Sup}$, mais avec une variation plus modérée lorsque α augmente. L’élément notable est que l’intervalle de confiance empirique reste globalement stable pour tous les niveaux d’erreur, reflétant ainsi la distribution des propriétés effectives en tenant compte explicitement de l’incertitude de mesure.

5 Conclusion

Les descripteurs de la distribution *a posteriori* — la moyenne et les bornes de l’IC à 95% — sont déterministes une fois les hyperparamètres optimisés et ne permettent pas de représenter la distribution effective des propriétés lorsque l’incertitude de mesure augmente. La moyenne conduit à des résultats similaires à ceux obtenus à partir de la texture expérimentale, tandis que les bornes de l’IC à 95% fournissent des estimations correspondant aux cas extrêmes d’anisotropie et d’isotropie, sans pour autant caractériser la variabilité des propriétés effectives. À l’inverse, les tirages stochastiques du PG conduisent à une distribution empirique des propriétés effectives, dont la variabilité reste stable avec l’augmentation du niveau d’erreur. Ces conclusions peuvent être expliquées par la non-linéarité de la relation microstructure-propriété. L’approche stochastique complète, basée sur le tirage aléatoire à partir

de la distribution *a posteriori* du PG, apparaît donc comme la plus pertinente pour la propagation de l'incertitude de mesure.

Les principaux résultats présentés ici sont issus d'un article récemment accepté dans la revue *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* [3].

Références

- [1] T. Kanit, S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury, D. Jeulin. *Determination of the size of the representative volume element for random composites : statistical and numerical approach*, International Journal of Solids and Structures, Volume 40, 2003.
- [2] B. Li, P. Breitkopf, L. Cauvin. *Customized Gaussian process for representing polycrystalline texture*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 440, 2025.
- [3] B. Li, P. Breitkopf, L. Cauvin. *Stochastic Inference of Effective Material Properties from Crystallographic Textures via Gaussian Process Regression*, accepté dans Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2026.
- [4] R. Quey, P. Dawson, F. Barbe. *Large-scale 3D random polycrystals for the finite element method : Generation, meshing and remeshing*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Volume 440, 1729-1745, 2011.
- [5] J. Yvonnet. *Computational Homogenization of Heterogeneous Materials with Finite Elements*, Springer International Publishing, 2019.