

Chapitre **7**

Modèles de collecteur de courant

Le collecteur de courant a été caractérisé dans le Chapitre 4. Nous reprenons cette caractérisation afin de proposer une modélisation à l'échelle de la mousse dans un premier temps et à l'échelle de la céramique dans un second temps. Cette modélisation est proposée avec en perspective deux finalités, d'une part la prédiction de la conductivité électronique de ce collecteur, d'autre part l'optimisation de cette propriété au regard de la microstructure à l'échelle de la mousse ainsi qu'à l'échelle de la céramique.

7.1 Modèle à l'échelle de la mousse : Modèle Booléen à coques *régularisées*

7.1.1 Définition

Le matériau illustré Fig. 4.2 présente de fortes singularités aux frontières de sa phase poreuse (en noir sur Fig. 4.2). La phase poreuse est elle même généralement enrobée par la mousse métallique de NiCrAl (en blanc sur Fig. 4.2) en raison du procédé de fabrication. Ladite mousse présente un aspect plutôt régulier à ses frontières. Enfin, la phase céramique (en gris sur Fig. 4.2) est présente en très grande partie (Tab. 4.3) et l'érosion linéaire associée à cette phase céramique présente un comportement linéaire (Fig. 4.12). Ce résultat est compatible avec la modélisation de cette phase par un modèle Booléen à grains primaires convexes (voir Sec. 5.1). Nous utilisons le modèle défini dans [72] en partant de deux modèles Booléens afin de modéliser les trois phases du matériau. Le premier modèle X est construit à partir d'un grain primaire X' sphérique de rayon constant R_X implanté sur le processus de points Poissonien \mathbb{P}_X d'intensité θ_X (voir Fig. 7.1). Le second modèle noté Y est obtenu à partir d'un grain primaire Y' implanté sur le processus de points Poissonien \mathbb{P}_Y d'intensité θ_Y . Ce grain primaire est obtenu comme $Y' = X' \cup (Y'' \cap (X')^c)$ où Y'' est une sphère de rayon $R_Y > R_X$ et de même centre. Les trois phases du modèle $(\tilde{B}_0, \tilde{G}_0, \tilde{W}_0)$ sont obtenues comme décrit dans [72] selon :

$$\tilde{G}_0 = X \cup \left(\bigcup_{x_k \in \mathbb{P}_Y} X'_{x_k} \right), \quad \tilde{W}_0 = \left(\bigcup_{x_k \in \mathbb{P}_Y} Y''_{x_k} \right) \cap (\tilde{G}_0)^c, \quad \tilde{B}_0 = (\tilde{W}_0)^c \cap (\tilde{G}_0)^c. \tag{7.1}$$

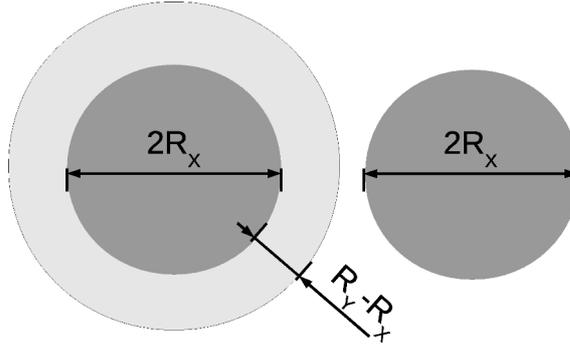


FIGURE 7.1 – Représentation schématique des deux grains primaires X' (droite) et Y' (gauche) où X' apparaît en gris sombre et Y' en gris clair.

Le modèle défini par [72] et rappelé ci-dessus est illustré Fig. 7.2a. Nous y retrouvons les singularités observées aux frontières de la phase B . En revanche la phase \tilde{W}_0 générée par les *coques* de Y' n'est visuellement pas satisfaisante pour la modélisation de W . En effet, la frontière entre les phases W et G est beaucoup plus régulière sur les images. Afin de palier ce problème, tout en conservant l'aspect obtenu pour \tilde{B}_0 , nous le modifions en appliquant les opérations suivantes :

$$\tilde{B} = \tilde{B}_0 \quad (7.2)$$

$$\tilde{W} = \{\tilde{W}_0 * \mathcal{G}(\sigma) \geq \lambda\} \cap (\tilde{B}_0)^c \quad (7.3)$$

$$\tilde{G} = (\tilde{B} \cup \tilde{W})^c, \quad (7.4)$$

où $*$ représente le produit de convolution, $\mathcal{G}(\sigma)$ un noyau gaussien centré de variance σ^2 et λ un réel défini tel que les fractions volumiques de \tilde{W} et de \tilde{W}_0 vérifient $\tilde{f}_W = \tilde{f}_{W_0}$. Le modèle à trois phases final $(\tilde{B}, \tilde{G}, \tilde{W})$ défini ci-dessus est illustré Fig. 7.2b. L'ensemble des 5 paramètres de ce modèle s'écrit $\mathcal{P} = (\theta_X, R_X, \theta_Y, R_Y, \sigma)$. Dans la suite, nous ferons référence à ce modèle comme le *modèle Booléen à coques régularisées*.

7.1.2 Validation

Ce modèle fait intervenir des modèles Booléens aux grains primaires assez rudimentaires dans un premier temps. Tout d'abord, l'étape de *régularisation* modifie les modèles obtenus mais conserve les fractions volumiques inchangées. Nous allons donc pouvoir effectuer une optimisation séparée de l'ensemble \mathcal{P} des paramètres. Dans un premier temps nous écrivons les relations suivantes sur les fractions volumiques :

$$f_{\tilde{B}} = e^{-\frac{4}{3}\pi(\theta_X R_X^3 + \theta_Y R_Y^3)} \quad (7.5)$$

$$f_{\tilde{G}} = 1 - e^{-\frac{4}{3}\pi R_X^3(\theta_X + \theta_Y)} \quad (7.6)$$

Les Eqs. 7.5 et 7.6 relient les fractions volumiques du matériau avec les intensités des processus de points pour R_X et R_Y fixés ce qui permet de réduire l'espace des paramètres \mathcal{P} à caler en lui retirant deux dimensions. La covariance $\overline{C}_{\tilde{B}_0}(h)$ est donnée analytiquement en fonction des paramètres du modèle selon :

$$\overline{C}_{\tilde{B}_0}(h) = e^{-\frac{4}{3}\pi(R_X^3 \theta_X (2 - k_X(h; R_X)) + R_Y^3 \theta_Y (2 - k_Y(h; R_Y)))} \quad (7.7)$$

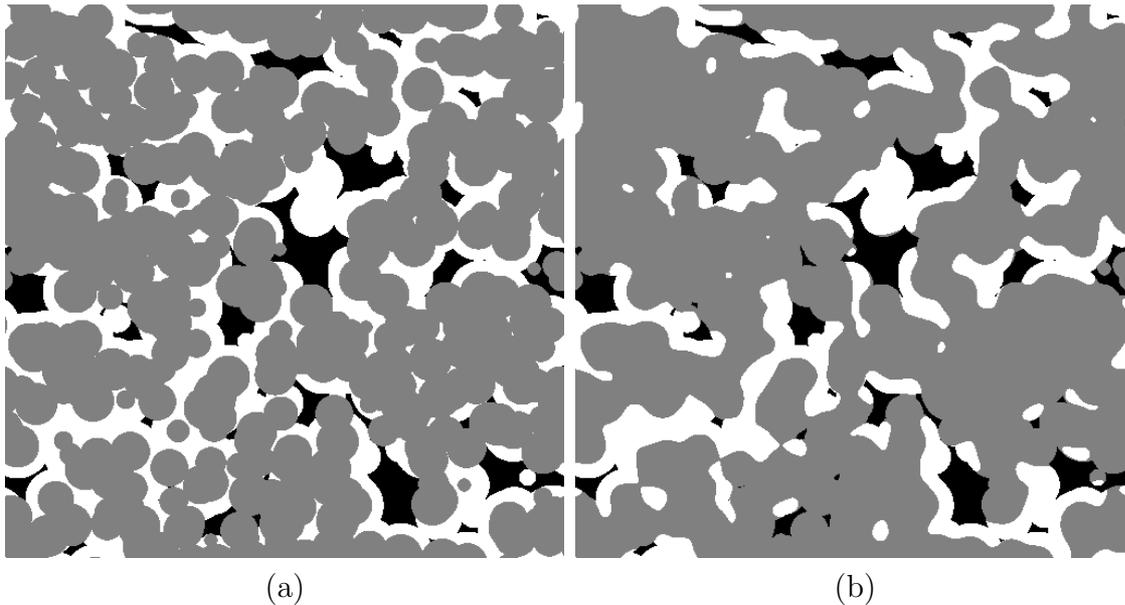


FIGURE 7.2 – (a) Coupe bidimensionnelle d’une réalisation du modèle 3D défini Eq. 7.1. (b) Coupe bidimensionnelle d’une réalisation du modèle Booléen à coques *régularisées*. En noir la phase poreuse B , en gris la phase céramique G et en blanc la mousse W . Les deux modèles sont générés à partir du même processus de points de Poisson afin de faciliter la comparaison visuelle. Les paramètres de ces modèles sont $\theta_X = 2.13 \times 10^{-5}$, $\theta_Y = 2.02 \times 10^{-5}$, $R_X = 20$ voxels, $R_Y = 30$ voxels et, pour (b), $\sigma = 5$ voxels.

L’utilisation de la pente à l’origine de cette dernière pourrait être utilisée pour obtenir une relation supplémentaire permettant de réduire d’encore une dimension l’espace des paramètres \mathcal{P} à caler. Cependant en raison de la faible représentativité de la phase B au sein du matériau (voir troisième colonne du Tab.4.9) nous n’utilisons pas cette relation.

Le calage est effectué numériquement en utilisant l’algorithme [131] afin de déterminer l’ensemble des paramètres (R_X, R_Y, σ) . La fonction objectif associée à cet algorithme est construite en calculant l’erreur quadratique entre la covariance $C_W(h)$ de la phase W estimée sur le matériau et $\tilde{C}_W(h)$ estimée sur une réalisation de taille $512 \times 512 \times 512$ voxels du modèle Booléen à coques *régularisées*. La minimisation de cette fonction objectif permet d’obtenir une microstructure optimisée présentée Fig. 7.3, le jeu de paramètres \mathcal{P} optimaux associés à cette microstructure s’écrit $\theta_X = 7.43 \times 10^{-7}$, $\theta_Y = 1.1 \times 10^{-5}$, $R_X = 31$ voxels, $R_Y = 12$ voxels et $\sigma = 17$ voxels.

La validation est effectuée en comparant l’empreinte morphologique estimée sur le matériau segmenté et celle estimée sur le modèle optimisé. Les fractions volumiques sont comparées au Tab. 7.1. On y retrouve un bon accord entre les fractions volumiques estimées sur le matériau et celles obtenues sur le modèle. Une comparaison d’ordre supérieure est donnée Fig. 7.4 entre les covariances, les covariances croisées, les érosions linéaires ainsi que les granulométries estimées sur (ou entre) les phases du matériau segmenté et sur (ou entre) les phases du modèle. Les covariances du modèle (en tirets Fig. 7.4a) sont en accord avec celles du matériau (en traits pleins Fig. 7.4a). Les covariances croisées entre les phases du modèle (en ti-

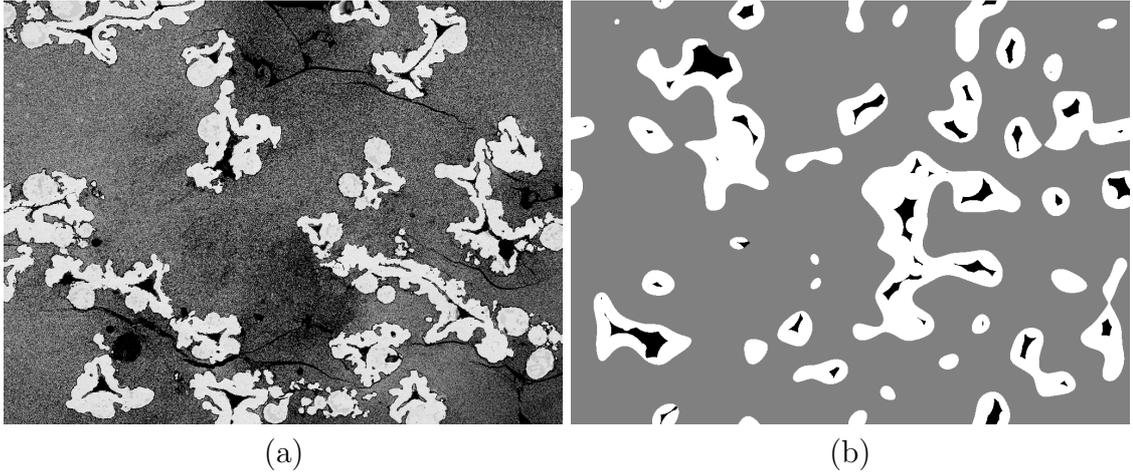


FIGURE 7.3 – Échantillon SF-LST-1 : (a) Image MEB originale de $646 \times 846 \mu\text{m}$. (b) Coupe bidimensionnelle ($646 \times 846 \mu\text{m}$) d'une réalisation du modèle Booléen à coques *régularisées*, optimisé pour cette échantillon.

Échantillon	$\tilde{f}_B \approx f_B$	$\tilde{f}_G \approx f_G$	$\tilde{f}_W \approx f_W$
SF-LST-1	$0.02 \approx 0.02$	$0.78 \approx 0.77$	$0.20 \approx 0.21$
DF-LST-1	$0.03 \approx 0.03$	$0.73 \approx 0.72$	$0.24 \approx 0.24$

TABLE 7.1 – Pour chaque échantillon : Fraction volumique \tilde{f}_i de la phase i estimée sur le modèle Booléen à coques *régularisées*, dont les paramètres sont optimisés pour l'échantillon. Cette fraction volumique est comparée à f_i , la fraction volumique de la phase i estimée sur le matériau segmenté.

rets Fig. 7.4b) restent elles aussi en accord avec celles du matériau (en traits pleins Fig. 7.4b) même si des différences notables sont observées entre C_{GW} et \tilde{C}_{GW} . Une différence plus importante est observée entre les courbes d'érosions linéaires et les granulométries estimées sur le matériau et sur le modèle.

Le choix qui est fait lors de l'optimisation quand à l'utilisation de la covariance de la phase W (uniquement) est motivé par la faible représentativité de la phase poreuse B (voir ϵ_B au Tab.4.9) au sein du matériau, rendant son utilisation difficile lors du calage. De plus, ce modèle est construit avec en tête l'objectif de prédire puis d'améliorer les propriétés de conductivité électronique du collecteur de courant. Cette propriété de transport a exclusivement lieu au sein de la phase céramique. La bonne connectivité de la phase céramique ne fait donc aucun doute puisqu'elle constitue $\approx 70\%$ du matériau. La conductivité électronique effective de la phase céramique est une propriété qui va donc primer pour estimer la propriété de transport d'électrons au sein du collecteur, et ce, devant la morphologie des isolants rencontrés (pores et mousse de NiCrAl enrobée par une couche isolante d'alumine). En conséquence de quoi, un modèle en première approximation de cette morphologie semble donc suffisant pour étudier la conductivité électronique du collecteur de courant.

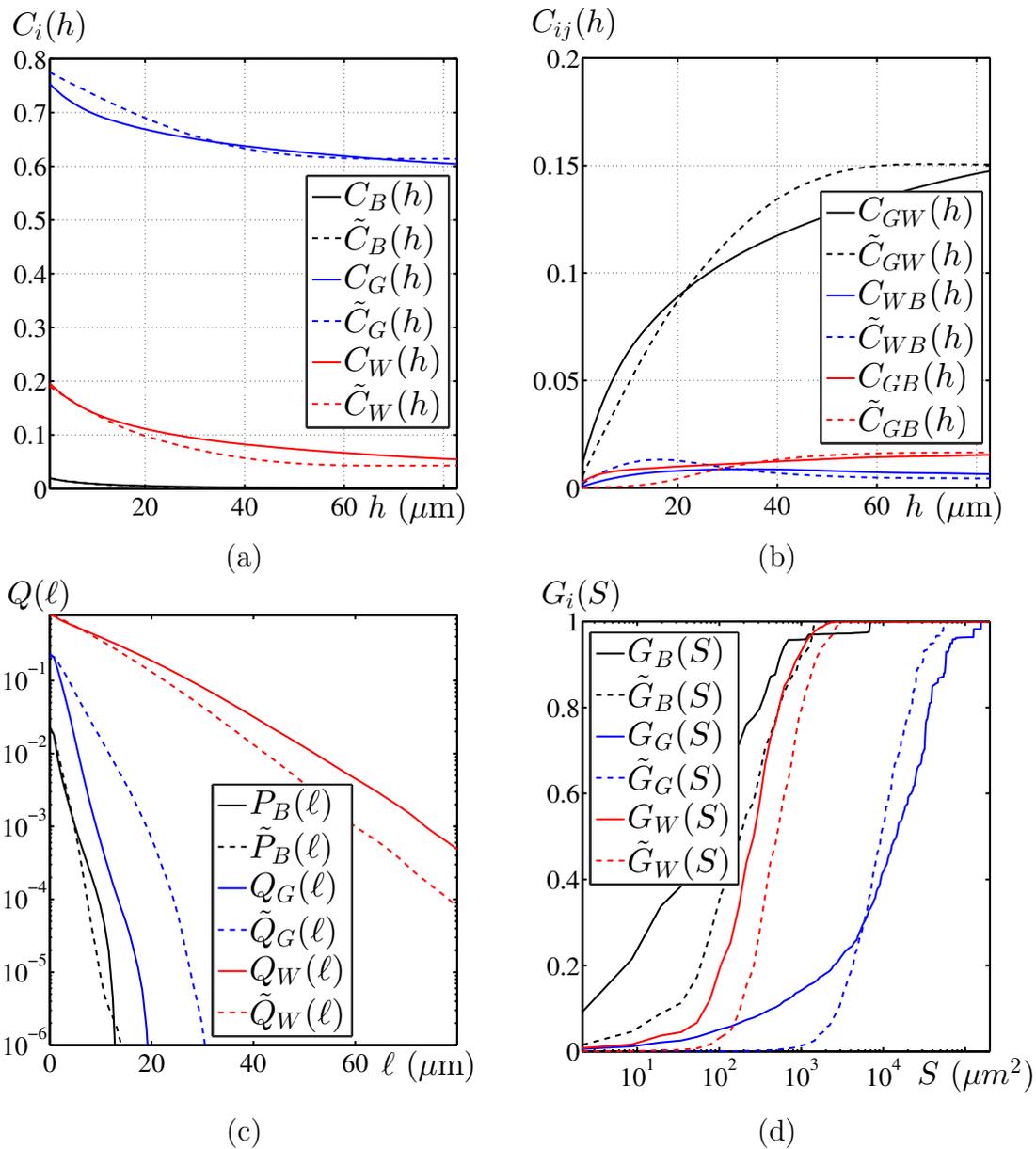


FIGURE 7.4 – Mesures de covariances (a), de covariances croisées (b), d'érosions linéaires (c) et de granulométries (d). Ces mesures sont estimées sur le matériau réel (traits pleins) et comparées à celles estimées sur le modèle Booléen à coques *régularisées* (tirets). Les mesures précédentes sont données pour chacune des phases, précisées en légende des graphiques. Le graphique (c) est présenté en échelle lin-log et le graphique (d) est présenté en échelle log-lin. Les résultats présentés ici concernent l'échantillon SF-LST-1.

7.1.3 Limites du modèle et améliorations

Pour commencer, le modèle ne prend pas en compte l'aspect fracturé du matériau dû à la lamination effectuée lors du processus de fabrication. En conséquence, les pores appartenant aux fractures n'étant pas différenciés des *vrais* pores lors de la segmentation, ils biaisent les fractions volumiques estimées. L'amélioration du procédé de segmentation afin d'extraire ces fractures (la caractérisation de ces dernières étant évidemment un prérequis à cette segmentation) permettrait d'améliorer ce problème.

Nous apercevons Fig. 7.3a des structures en forme de disques au sein de la phase W (mousse de NiCrAl) qui ne sont pas anecdotiques puisqu'on les retrouve abondamment sur l'ensemble des échantillons. Si leur fraction volumique est certes prise en compte lors de la segmentation, la présence de ces structures a un impact sur la répartition spatiale des pixels assignés à la phase W . Ces structures en forme de disque sont parfois isolées ou bien directement accolées aux structures plus chaotiques de la mousse. Nous ne les prenons pas en compte dans notre modèle. Il faudrait, pour ce faire, les extraire séparément lors de la segmentation afin d'étudier leur répartition spatiale ainsi que leur distribution en taille. Ceci permettrait d'ajouter (dans le modèle Booléen à coques *régularisées* 3D présenté Fig. 7.3b) un modèle Booléen de sphères dont le processus de points (visiblement non homogène) serait capable de reproduire ces formes géométriques.

7.2 Modèle à l'échelle de la céramique : Modèle de Gaussienne seuillée

7.2.1 Définition

Le matériau auquel nous nous intéressons est illustré Fig. 4.5f. Une image binaire, visuellement auto-duale et statistiquement proche de l'être est observée. Les frontières entre les deux phases sont relativement régulières. Ce matériau rappelle en fin de compte la phase solide du matériau anodique. Ce constat n'est pas un fait du hasard. En effet, les deux matériaux sont similaires si l'on fait abstraction du GCO. Nous nous orientons donc vers le modèle de Gaussienne seuillée défini Sec. 5.2 auquel est ajouté (comme pour les anodes) l'étape de régularisation de l'Eq. 6.27 afin d'obtenir des contours réguliers.

7.2.2 Validation

Ce modèle étant direct, il ne nécessite pas à vrai dire d'étape de calage de paramètres. Nous parlons, par abus de langage, de *calage* pour définir l'étape permettant de spécifier un modèle tout à fait générique à un échantillon donné. Dans notre cas, cette étape est obtenue par le calcul de la fonction de poids $w(h)$ (Eq. 5.13). Où $\rho(h)$ est obtenu à partir de la covariance $C_W(h)$ estimée sur le matériau par inversion de l'Eq. 5.12. Une fois calculée, la fonction de poids est régularisée selon l'Eq. 6.27. Le résultat final de la génération du modèle de Gaussienne seuillée associé à l'échantillon LST-1 est présenté Fig. 7.5. Nous faisons référence à la Sec. 6.4 pour plus de détails pratiques concernant la génération d'un modèle de Gaussienne seuillée.

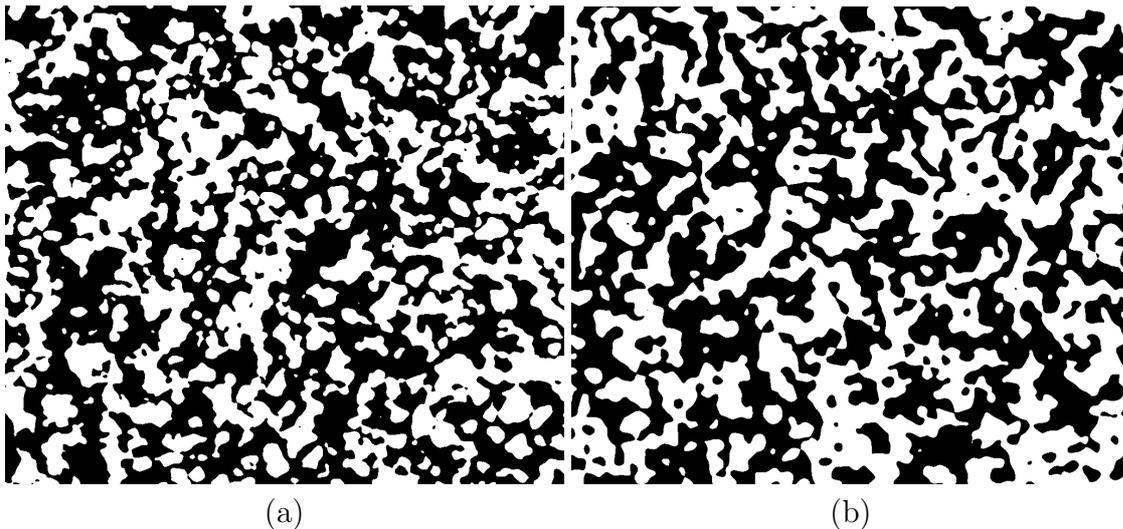


FIGURE 7.5 – Échantillon LST-1 : (a) Image MEB segmentée de taille $883 \times 1024 \mu\text{m}$. (b) Coupe bidimensionnelle ($883 \times 1024 \mu\text{m}$) d'une réalisation du modèle de Gaussienne seuillée optimisé pour cet échantillon.

Échantillon	$\tilde{f}_B \approx f_B$	$\tilde{f}_W \approx f_W$
LST-1	$0.51 \approx 0.51$	$0.49 \approx 0.49$
LST-2	$0.50 \approx 0.50$	$0.50 \approx 0.50$

TABLE 7.2 – Pour chaque échantillon : Fraction volumique \tilde{f}_i de la phase i estimée sur le modèle de Gaussienne seuillée, dont les paramètres sont optimisé pour l'échantillon. Cette fraction volumique est comparée à f_i , la fraction volumique de la phase i estimée sur le matériau segmenté.

Une validation de ce modèle est obtenue à l'ordre 0 grâce aux fractions volumiques parfaitement reproduites par le modèle (Tab.7.2). La covariance est elle aussi retrouvée dans le modèle (Fig. 7.6a). Ce résultat est en fait sans surprise puisque cette covariance est utilisée dans le *calage* du modèle. Le résultat le plus surprenant est la très bonne concordance des granulométries des deux phases, toutes deux estimées sur les images segmentées (traits pleins Fig. 7.6c) et comparées à leurs homologues estimées sur le modèle (pointillés Fig. 7.6c). En effet, cette mesure n'est pas utilisée lors de la génération du modèle mais se trouve très bien reproduite par ce dernier. L'érosion linéaire est quant à elle moins bien retrouvée (Fig. 7.6b) puisque l'on observe dès $h = 0.2 \mu\text{m}$ un écart entre la courbe estimée sur le matériau et celle estimée sur le modèle.

Ce modèle est donc satisfaisant d'un point de vue visuel et d'un point de vue morphologique.

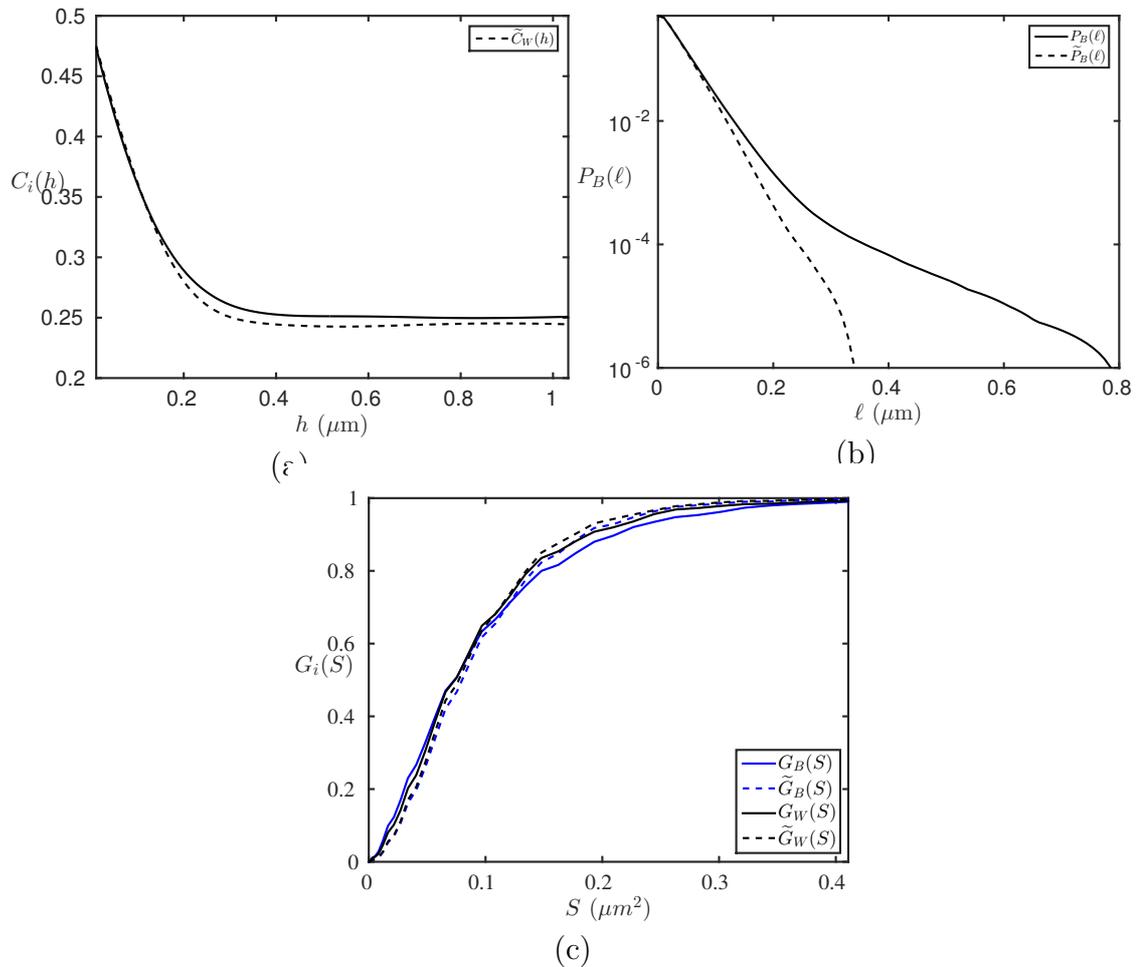


FIGURE 7.6 – Mesures de covariances (a), d'érosions linéaire (b) et de granulométries (c). Ces mesures sont estimées sur le matériau réel (traits pleins) et comparées à celles estimées sur le modèle de Gaussienne seuillée (tirets). Les mesures précédentes sont données pour chacune des phases, précisées en légende des graphiques. Le graphique (b) est présenté en échelle lin-log et le graphique (c) est présenté en échelle log-lin. Les résultats présentés ici concernent l'échantillon LST-1.

7.3 Conclusions et perspectives

Dans ce chapitre, une modélisation de la morphologie du collecteur de courant du projet Evolve est proposée. Ce matériau présente deux échelles distinctes qui sont foncièrement différentes du point de vue de leur morphologie. Au départ de la modélisation, des images segmentées de ce matériau ainsi que des empreintes morphologiques estimées sur les matériaux segmentés sont disponibles (Chapitre 4).

À l'échelle de la mousse, nous sommes en présence d'un matériau à trois phases extrêmement complexe du point de vue de sa morphologie et en particulier pour la mousse. Les érosions linéaires présentent un comportement compatible avec la modélisation de la phase solide par un modèle Booléen à grain primaire convexe. C'est ce qui est proposé avec le modèle Booléen à coques *régularisées*. Ce modèle est basé sur des modèles Booléens de sphères astucieusement combinés. Nous ajoutons à cette combinaison une étape de régularisation permettant de conserver la nature singulière de la phase poreuse tout en lissant les contours entre la mousse (NiCrAl) et la phase céramique (LST-Pores). Ce modèle dispose d'un nombre relativement faible de paramètres et permet de modéliser en première approximation le matériau à l'échelle de la mousse.

À l'échelle de la céramique, la problématique est beaucoup plus simple. Tout d'abord, il s'agit d'un matériau binaire. De plus, la microstructure observée ressemble assez fortement aux microstructures d'anodes précédemment étudiées (Chapitre 3) au nombre de phases près. Le modèle de Gaussienne seuillée à fonction de poids régularisée déjà utilisé pour les anodes en Sec. 6.4 est réutilisé ici. Ce modèle *a-paramétrique* est validé à l'échelle de la céramique autant d'un point de vue visuel que du point de vue de l'empreinte morphologique.

Un modèle aléatoire du collecteur de courant a été développé à chacune de ses échelles caractéristiques. Ces modèles devront être utilisés afin de prédire les propriétés de transport liées au collecteur (comme pour les anodes au Chapitre 11). Ceci nécessitera l'homogénéisation des propriétés du collecteur à l'échelle de la céramique. Le résultat pourra alors être utilisé à l'échelle de la mousse afin d'en calculer les propriétés de transport. Dans un second temps, il sera possible de déterminer une microstructure virtuelle optimale, du point de vue des propriétés de transport (comme pour les anodes au Chapitre 12).

