

## Modélisation géométrique des structures granulaires

Patrick Laug<sup>a</sup>, Houman Borouchaki<sup>b,\*</sup>, Azeddine Benabbou<sup>a</sup>, Jian Lu<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Institut national de recherche en informatique et en automatique, BP 105, 78153 Le Chesnay cedex, France

<sup>b</sup> Université de technologie de Troyes, BP 2060, 10010 Troyes cedex, France

<sup>c</sup> Department of Mechanical Engineering, The Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Kowloon, Hong Kong

Reçu le 1<sup>er</sup> février 2008 ; accepté après révision le 27 février 2008

Disponible sur Internet le 18 avril 2008

Présenté par Jean-Baptiste Leblond

### Résumé

Une structure granulaire est un assemblage de grains dont les tailles sont caractérisées par une distribution donnée. Un échantillon de ce type de structure est souvent modélisé par un rectangle rempli de disques en deux dimensions ou un parallélépipède contenant des boules en trois dimensions. La modélisation géométrique d'une telle structure consiste donc à déterminer une répartition « dense » de disques disjoints (ou de boules disjointes) respectant la distribution de tailles spécifiée. Dans cette note, un nouvel algorithme de génération de cette répartition de grains, fondé sur une approche frontale utilisée habituellement dans des méthodes de construction de maillages, est proposé. Par rapport aux méthodes existantes, de fortes améliorations en temps de calcul ainsi qu'en taux de remplissage (densité) sont obtenues. Par ailleurs, une méthode simple est introduite afin de transformer les grains circulaires en grains polygonaux généralement observés dans la réalité. Pour illustrer la méthode proposée, un exemple de modélisation de nanostructures métalliques est présenté. *Pour citer cet article : P. Laug et al., C. R. Mecanique 336 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

### Abstract

**Geometrical modeling of granular structures.** A granular structure is an aggregation of grains whose sizes are characterized by a given distribution. A sample of this kind of structure is often modeled by a rectangle filled with disks in two dimensions or a parallelepiped containing spherical balls in three dimensions. Therefore, the geometrical modeling of such a structure consists in determining a “dense” repartition of disjoint disks (or spherical balls) with respect to the specified size distribution. In this paper, a new sphere packing algorithm based on an advancing-front approach, commonly used in meshing methods, is proposed. Significant improvements in computing time and density have been obtained comparing to existing methods. In addition, we show that the generated circular grains can be transformed into polygonal (polyhedral) cells generally observed in reality. An example of a metallic nanostructure model is presented. *To cite this article: P. Laug et al., C. R. Mecanique 336 (2008).*

© 2008 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

**Mots-clés :** Milieux granulaires ; Nanostructures ; Modélisation géométrique ; Approche frontale ; Diagramme de Laguerre

**Keywords :** Granular media; Nanostructures; Geometrical modeling; Advancing-front approach; Laguerre diagram

\* Auteur correspondant.

Adresses e-mail : Patrick.Laug@inria.fr (P. Laug), Houman.Borouchaki@utt.fr (H. Borouchaki), Azeddine.Benabbou@inria.fr (A. Benabbou), Jian.Lu@inet.polyu.edu.hk (J. Lu).

## Abridged English version

During the past three decades, many researchers have been interested in tools and techniques for synthesizing nanomaterials and understanding their incredible properties. Experiments and researches prove that physical properties of nanostructures are different from those of bulk structures, and that nanocrystallization globally enhances the material behavior. Owing to the scientific and industrial interests in nanomaterials, investigations in grain refinement mechanisms in metals and alloys constitute one of the most advanced directions in the field of metallurgy. In this paper, we focus on the geometrical modeling of nanostructures issued from the SMAT “Surface Mechanical Attrition Treatment” process, in order to simulate their behavior by the finite element method. The principle of the SMAT process is to produce grain refinements by introducing a maximum of plastic deformations near the surface of the material [1]. The geometrical modeling of nanostructures is similar to the sphere packing problem which consists in filling a domain with spherical balls whose radii follow a given size distribution. In this modeling, grains (polygonal or polyhedral cells) are approximated by disks in 2D or spherical balls in 3D, the distribution provided by experiment must be respected, the disks (spherical balls) must neither overlap each other nor intersect the domain boundary, and must also be separated by grain boundaries having a specific thickness. For this purpose, a new filling constructive algorithm based on an advancing-front approach is proposed. Our algorithm is compared to existing constructive and dynamic methods [4,5]. Significant gains in computation time, as well as improvements in density, are observed and demonstrate the efficiency of the new method. However, the structure generated by the advancing-front based algorithm includes empty areas near front collisions. Therefore, a point relocation algorithm using the weighted Delaunay triangulation has been developed in order to balance the grain boundary thickness in the whole structure. Besides, using Laguerre diagrams, the circles (spheres) can be transformed into polygonal (polyhedral) cells whose shapes are very similar to the grains contained in many material structures.

## 1. Introduction

Le changement de la structure d'un matériau à l'échelle du micromètre ou du nanomètre influe très fortement sur son comportement à l'échelle macroscopique (celle de l'ingénieur). Il en résulte un intérêt considérable pour l'amélioration des propriétés physiques d'un matériau en agissant sur sa structure à petites échelles. Dans un matériau ordinaire, la structure est formée d'une multitude de petits volumes polyédriques appelés grains dont la taille varie généralement entre 2 et 20 micromètres, et qui sont séparés entre eux par des interfaces appelées joints de grains. En revanche, dans un matériau nanostructuré, la taille des grains est environ mille fois plus petite et la proportion des joints de grains est plus importante.

Il existe plusieurs méthodes pour réduire les tailles de grains d'un matériau : les méthodes dites de revêtement ou de déposition comme la PVD (*Physical Vapor Deposition*), la CVD (*Chemical Vapor Deposition*) et l'électrodéposition, les méthodes d'auto-nanocrystallisation comme la SPD (*Severe Plastic Deformation*) et le procédé SMAT (*Surface Mechanical Attrition Treatment*), et les méthodes mixtes qui utilisent d'abord des techniques de revêtement ou de déposition puis celles de nanocrystallisation par des procédés de déformation plastique. Parmi toutes ces méthodes, nous nous intéressons plus particulièrement au procédé SMAT [1], qui est purement mécanique et similaire à un grenailage introduisant un maximum de déformations plastiques sur la surface traitée. En effet, dans la plupart des cas, la rupture des matériaux s'opère en surface (fatigue, corrosion, etc.) et ce phénomène est très sensible à la structure et aux propriétés des matériaux. Ainsi, pour améliorer la qualité d'un matériau, sa surface est traitée avec une certaine profondeur qui peut varier en fonction des résultats souhaités. Plus précisément, le procédé SMAT consiste à bombarder la surface du matériau dans des directions aléatoires, avec des billes dont l'énergie cinétique est fournie par un générateur de vibrations. Les impacts multidirectionnels durant ce processus induisent un important taux de déformation en surface, ainsi qu'une augmentation de température (entre 50 et 100 °C pour le fer pur). Les déformations plastiques ainsi introduites divisent les grains proches de la surface du matériau traité, formant ainsi une structure granulaire passant de l'échelle du micromètre à celle du nanomètre. Pour montrer le lien entre le comportement macroscopique d'un matériau et sa structure à des échelles nanométriques, nous nous basons sur un schéma simplifié d'évolution de la limite élastique (résistance) d'un matériau en fonction de la taille des grains constituant sa structure. Ce schéma s'exprime par la formule de Hall–Petch [2]  $\sigma_y = \sigma_0 + k/\sqrt{d_g}$ , où  $\sigma_y$  est la limite élastique du matériau traité,  $\sigma_0$  celle du matériau ordinaire,  $k$  un coefficient dépendant du matériau et  $d_g$  la taille moyenne des grains. Ainsi, plus la taille

moyenne des grains  $d_g$  diminue (par nanostructuration), plus la limite élastique  $\sigma_y$  augmente, d'où une amélioration de la qualité du matériau.

Pour simuler les propriétés mécaniques des matériaux issus du procédé SMAT, qui permet d'obtenir une nanostructure sur une épaisseur de 10 à 100 micromètres et formée de grains dont la taille varie entre 10 et 15 nanomètres, il est nécessaire de modéliser géométriquement ce type de structures granulaires.

## 2. Modélisation géométrique

Un échantillon nanostructuré peut être décrit par un rectangle en deux dimensions ou par un parallélépipède en trois dimensions, contenant des disques ou des boules de rayons définis par une distribution donnée. Les disques<sup>1</sup> représentent les grains, et les espacements entre ceux-ci les joints de grains. Dans la réalité, selon les observations par microscopie, les grains ressemblent plutôt à des cellules de Voronoï ou plus généralement de Laguerre. Cette modélisation des grains par des disques<sup>1</sup> présente un double avantage, d'une part une simplification des calculs géométriques, et d'autre part une bonne approximation de problèmes complexes où les calculs avec des formes réelles de grains seraient très difficiles à réaliser. Plus précisément, cette modélisation simplifiée d'une nanostructure consiste à remplir le domaine avec des disques<sup>1</sup> de telle manière que la distribution des rayons soit respectée, que les grains soient séparés par des joints de grains d'épaisseur spécifiée, que la structure soit la plus dense possible, et que l'assemblage des disques<sup>1</sup> soit le plus irrégulier possible (absence de périodicité). Cet agrégat de disques<sup>1</sup> peut éventuellement être transformé (via des techniques de triangulation de Delaunay pondérée) en une structure composée de cellules de Laguerre [3], représentant ainsi de manière plus réaliste la géométrie des grains dans ces structures.

Il existe deux grandes familles de techniques [4,5], dynamiques et constructives, pour le remplissage d'un domaine granulaire. Les techniques dynamiques sont basées sur des bougés et/ou des changements de taille des particules. Les mouvements de ces particules peuvent être calculés soit par des modèles purement géométriques soit par des modèles dynamiques, dans lesquels chaque particule est dotée d'une ou de plusieurs propriétés physiques lui permettant de trouver une position d'équilibre en fonction de ses interactions avec les autres particules. Les méthodes dynamiques sont généralement très coûteuses en temps de calcul, car souvent la position et/ou la taille de chaque grain doit être calculée tout au long du processus de remplissage. Cet inconvénient explique que ces méthodes soient moins utilisées que les techniques constructives. Dans ces dernières, les calculs considérés sont purement géométriques, et les positions et les tailles des grains peuvent être conservées tout au long du processus de remplissage.

Nous proposons une nouvelle approche constructive, fondée sur une variante de la méthode frontale utilisée habituellement pour générer des maillages de qualité de domaines quelconques.

### 2.1. Approche frontale dans le contexte du maillage

En supposant qu'une discrétisation du contour d'un domaine donné soit déjà construite, la méthode frontale offre un moyen puissant pour la construction d'un maillage aussi régulier que possible de ce domaine. En effet, elle utilise le fait que des entités du maillage sont déjà construites et place les points internes d'une manière optimale par rapport à ces entités. Ces dernières sont initialement fournies par la discrétisation de la frontière du domaine, et doivent faire partie du maillage final. La méthode consiste principalement à appliquer de façon itérative les trois procédures suivantes : définir un front constitué de quelques entités du maillage, placer des points internes d'une manière optimale par rapport à ce front, et connecter les nouveaux points générés aux autres entités du maillage déjà existantes. La première procédure est cruciale dans la mesure où la convergence de la méthode en dépend. Quant aux deux autres procédures, elles agissent sur la régularité du maillage.

Parmi les méthodes frontales, les variantes proposées diffèrent principalement par le fait que l'on remplit un domaine vide ou que l'on modifie un premier maillage grossier du domaine. Dans le premier cas, le front représente la frontière entre la partie du domaine déjà maillée et le reste du domaine encore vide, alors que dans le second cas le front sépare des éléments jugés « bons » des autres éléments. Dans chacun des cas, les points internes sont définis de la même manière afin de vérifier un certain critère de taille d'éléments assurant la régularité du maillage. Chaque point interne généré dans le premier cas est connecté uniquement à l'élément du front qui a permis de le définir, alors que

<sup>1</sup> Disques en deux dimensions ou boules en trois dimensions.

des connexions supplémentaires peuvent être établies dans le second cas, suivant le critère utilisé pour insérer le point dans le maillage. Dans la première approche, la validation d'un nouvel élément généré se fait via la recherche d'intersections éventuelles avec des entités voisines. Dans la seconde approche, le front doit être correctement identifié et géré afin de garantir la convergence de la méthode.

## 2.2. Schéma de notre algorithme et lien avec l'approche frontale

L'approche frontale adoptée dans notre cas est celle où le front représente la frontière entre la partie du domaine déjà maillée et son complémentaire encore vide. Dans l'analogie entre cette approche frontale de maillage et notre algorithme de remplissage, un nœud du maillage devient un disque, un segment devient un couple de disques tangents entre eux, et un triangle formé à partir d'un segment devient un assemblage de trois disques tangents entre eux. Une particularité de notre algorithme réside dans le fait que le rayon du troisième disque est spécifié de manière aléatoire selon une distribution donnée. Cet algorithme est donné par le schéma :

*Construire un front initial défini par une chaîne de couples de disques tangents entre eux et aussi tangents à la frontière du domaine.*

*Tant que le front n'est pas vide, faire :*

1. *Choisir un rayon de manière aléatoire tout en respectant la distribution spécifiée.*
2. *Choisir un élément du front (couple de disques représenté par un segment).*
3. *Définir la position du nouveau disque par rapport à l'élément du front sélectionné.*
4. *Analyser les conflits, c'est-à-dire les intersections éventuelles du nouveau disque avec les disques déjà générés.*
5. *S'il n'y a aucun conflit, générer le disque, actualiser le front (supprimer le segment du front choisi et ajouter deux nouveaux segments) et reprendre l'algorithme en 1.*
6. *Sinon, choisir un autre segment du front et reprendre en 3.*
7. *Si aucun segment du front ne permet de générer un nouveau disque, alors considérer le segment initial choisi, et parmi les disques en conflit sélectionner celui qui maximise la densité par rapport à l'assemblage. Actualiser le front (supprimer le segment initial ainsi que d'éventuels segments connectant le disque sélectionné à ceux formant le segment initial, et ajouter éventuellement un nouveau segment résultant) et reprendre en 2.*

Dans la première étape de notre algorithme, un front initial est créé au voisinage de la frontière du domaine. Ensuite, le remplissage s'effectue par fronts successifs vers l'intérieur. Chaque front est constitué d'un ensemble de segments orientés et est doté d'un niveau. Pour la convergence de la méthode, le remplissage à partir d'un front de niveau  $n$  n'est amorcé que lorsque tous les fronts de niveaux inférieurs à  $n$  sont complètement saturés. À titre d'illustration, la Fig. 1 montre quelques itérations du remplissage par avancée de front d'un échantillon rectangulaire.

Pour générer un nouveau disque, son rayon doit être choisi aléatoirement selon la distribution spécifiée. Cette distribution est donnée par un histogramme associant des fréquences d'apparition à des intervalles de tailles de grains. Ainsi, au  $i$ -ème intervalle  $[R_{1i}, R_{2i}[$ , où  $R_{1i}$  et  $R_{2i}$  sont ses rayons extrêmes, est associée la probabilité  $P_i$  d'apparition d'un grain dont le rayon appartient à l'intervalle  $i$ , avec  $\sum P_i = 1$ . Pour choisir un rayon de manière aléatoire, uniforme dans chaque intervalle, il suffit de partitionner l'intervalle  $[0, 1[$  en segments de longueurs  $P_i$  et d'utiliser un générateur de nombre aléatoire uniforme dans  $[0, 1[$ .

L'analyse et la détection des intersections (conflits) constituent une tâche cruciale et souvent très coûteuse en temps de calcul. En effet, chaque nouveau disque ne peut être créé que s'il n'entre pas en conflit avec des disques existants ou avec la frontière du domaine. Pour localiser la recherche des éventuelles intersections, on pourra placer les disques dans une grille (selon le principe utilisé dans le tri par paquets ou *bucket sort*). Cette localisation de l'analyse des conflits rend la complexité de notre algorithme linéaire par rapport à l'aire du domaine à remplir, indépendamment de la largeur de la distribution.

## 3. Équilibrage de la structure

Le remplissage par la méthode frontale conduit souvent à une hétérogénéité de la densité locale dans la structure (certains endroits étant plus denses que d'autres, en particulier au niveau des chocs de fronts). Ce phénomène peut avoir une incidence directe sur les résultats physiques des simulations des structures granulaires. En effet, dans une

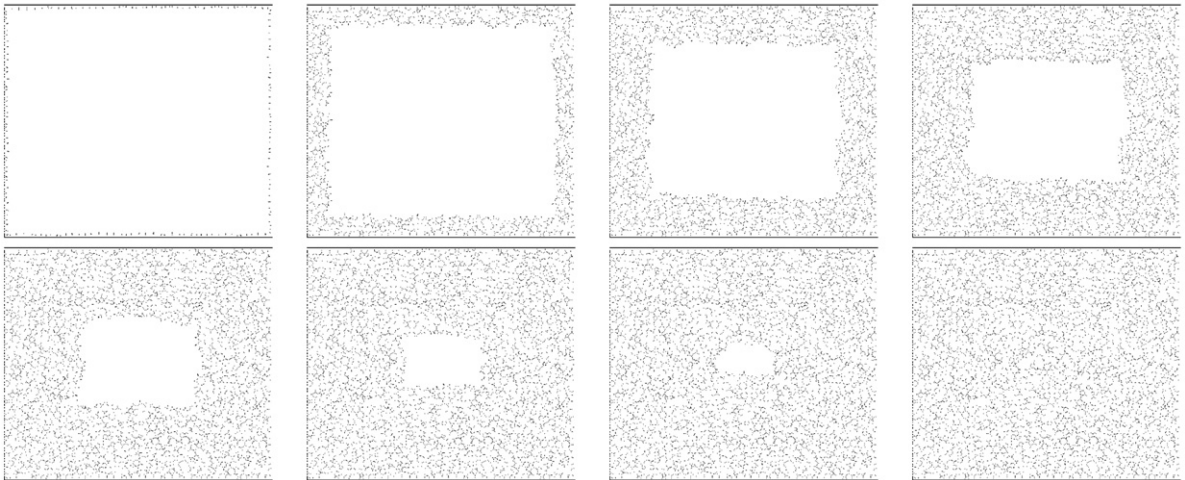


Fig. 1. Remplissage avec des grains circulaires par la méthode frontale.

Fig. 1. Filling with circular grains using the advancing-front method.

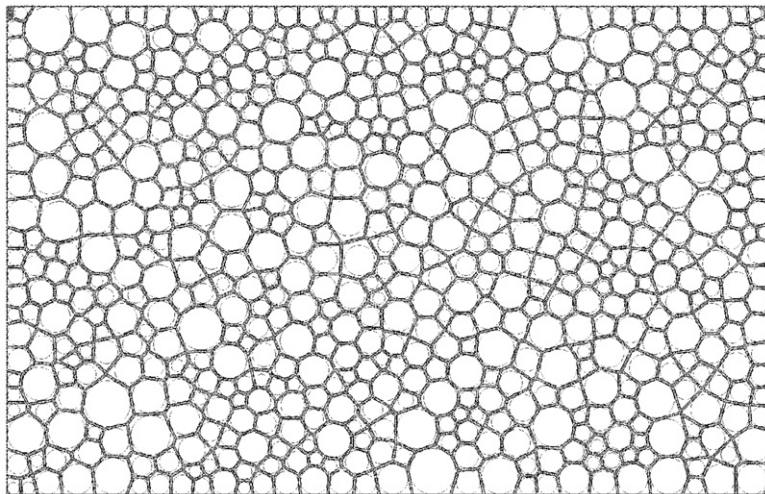


Fig. 2. Assemblage de grains polygonaux séparés par des joints d'épaisseur constante.

Fig. 2. Aggregation of polygonal grains separated by grain boundaries with constant thickness.

nanostructure, les parties vides sont considérées comme des joints de grains. Or la proportion et la distribution de ces joints de grains sont des caractéristiques essentielles du comportement de la structure (obstacle à la propagation des dislocations par exemple). Pour atténuer cette anisotropie introduite, cet espace vide doit être équiréparti sur l'ensemble de la structure.

Nous partons du principe que « pour bien répartir le vide dans toute la structure, il suffit de bien le répartir localement autour de chaque particule ». Ainsi, nous avons besoin de connaître la configuration locale autour de chaque point (centre de particule), c'est-à-dire les positions et les rayons des particules voisines. Pour cela, nous utilisons la triangulation de Delaunay pondérée TDP (le dual du diagramme de Laguerre) du nuage de points constitué par les centres des particules. Pour équilibrer la structure, l'idée principale consiste à considérer les boules des points et à repositionner ces points par rapport aux fronts définis par tous les segments frontaliers de leurs boules. Si le point  $p$  est le centre d'un disque, et si  $s_i$  désigne le  $i$ -ème segment frontalier de la boule de  $p$ , alors il existe une position unique  $p_i$  telle que ce disque soit tangent aux disques représentés par  $s_i$ . L'approche consiste à déplacer pas à pas le point  $p$  vers le barycentre  $p^*$  des points  $p_i$  valides (qui ne sont pas en conflit avec des disques existants).

#### 4. Exemple

On considère un échantillon rectangulaire de fer pur nanostructuré de dimensions  $250 \text{ nm} \times 160 \text{ nm}$  ayant une distribution de tailles de grains variant entre 4 et 16 nm et un joint de grains d'épaisseur constante 0,8 nm. La Fig. 2 illustre l'agrégat des grains générés, ces derniers étant représentés soit par des cercles soit par des polygones de Laguerre. La structure est générée en 0,03 secondes sur un Pentium M 1.4 GHz et comprend 753 grains avec une compacité de l'ordre de 80 %.

#### Références

- [1] K. Lu, J. Lu, Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment, *Materials Science and Engineering A* 375–377 (15 July 2004) 38–45.
- [2] K.S. Kumar, H. Van Swygenhoven, S. Suresh, Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys, *Acta Materialia* 51 (19) (25 November 2003) 5743–5774.
- [3] H. Borouchaki, N. Flandrin, C. Bennis, Diagramme de Laguerre, *C. R. Mecanique* 333 (10) (2005) 762–767.
- [4] K. Bagi, An algorithm to generate random dense arrangements for discrete element simulations of granular assemblies, *Granular Matter* 7 (2005) 31–43.
- [5] B.D. Lubachevsky, F.H. Stillinger, Geometric properties of random disk packings, *Journal of Statistical Physics* 60 (5–6) (September 1990) 561–583.