

Génération aléatoire 3D de VER à inclusions géométriques modulables inspirée de la dynamique moléculaire

S. Lemaitre^a, V. Salnikov^b, P. Karamian-Surville^c, D. Choi^d

a. Université de Caen Normandie, sophie.lemaitre@unicaen.fr

b. Université de Luxembourg, vladimir.salnikov@uni.lu

c. Université de Caen Normandie, philippe.karamian@unicaen.fr

d. Université de Caen Normandie, daniel.choi@unicaen.fr

Résumé :

La méthode RSA est très efficace pour des volumes d'inclusions allant jusqu'à 30 % environ. Toutefois, pour des volumes supérieurs d'inclusions, la méthode RSA devient prohibitive en temps de calcul. Nous proposons une alternative pour générer des VER 3D de type matrice renforcée par des inclusions à géométrie sphérique, cylindrique ou elliptique en utilisant une méthode inspirée de la dynamique moléculaire. Cette génération aléatoire garantit des inclusions disjointes deux à deux, pouvant au besoin être déformées, arrachées partiellement, ou pelliculées. L'intérêt de la génération proposée est sa capacité à engendrer aléatoirement et sans recouvrement des VER dont les taux d'inclusions sont supérieurs à 30 % du volume total. Le taux d'inclusion (à dimensions constantes pour chaque type d'inclusion) peut en effet atteindre 60 % du volume total.

Abstract :

The RSA method is very efficient for volume fractions of inclusions up to about 30%. However, for larger volume fractions of inclusions, the RSA method becomes prohibitive in time and can be stucked. We propose to generate 3D RVEs of matrix type reinforced with inclusions with spherical, cylindrical or elliptical geometry using molecular dynamics. This random generation guarantees non overlapping inclusions which can be deformed, partially distorted or coated. The interest of the proposed generation is its ability to randomly generate without overlapping RVE with volume fractions of inclusions greater than 30% of the total volume. The inclusion rate (constant dimensions for each type of inclusion) can reach 60% of the total volume.

Mots clefs : Génération aléatoire, Dynamique moléculaire, Matériau composite, Homogénéisation

1 Introduction

Nous décrivons une approche basée sur la dynamique moléculaire pour générer des Volumes Élémentaires Représentatifs (VER) afin d'estimer les propriétés effectives des matériaux composites. L'approche principale pour estimer ces propriétés est basée sur les techniques d'homogénéisation. Nous avons donc besoin d'un algorithme fiable, robuste, rapide et efficace pour engendrer des VER numériques et stochastiques. En particulier, nous nous focalisons au cas d'un mélange d'inclusions sphériques et cylindriques qui ne doivent pas se croiser ou se chevaucher.

Il existe plusieurs travaux sur la génération des VER pour différentes géométries d'inclusions : sphères ([1], [2]) ellipsoïdes ([3, 4]), "spherocylinders" (cylindres avec 2 demi-sphères attachés aux extrémités [5], [6]). Le point commun entre toutes ces géométries est que les positions relatives des inclusions se traduisent par une relation algébrique.

Pour générer un VER on peut adopter plusieurs approches plus ou moins efficaces pour des géométries variées. Historiquement, le premier algorithme est la méthode RSA (Random sequential adsorption voir par exemple [?, ?]). Cette méthode consiste à générer aléatoirement des géométries caractérisées par leur rayon, leur centre et leur axe et vérifier si ces géométries générées satisfont aux conditions imposées, comme la non intersection. Dans les faits, on part d'un VER vide et on commence à insérer les inclusions les unes après les autres et nous écartons celles qui ne vérifient pas les conditions requises. Ce processus est efficace tant que la fraction volumique des inclusions est suffisamment petite, sinon le processus de génération peut prendre beaucoup de temps ou même se bloquer alors que la fraction volumique cible pour les inclusions n'est toujours pas atteinte.

Une autre manière de procéder est d'exploiter la dynamique moléculaire (DM) : essentiellement les inclusions générées sont autorisées à interagir jusqu'à ce que la configuration désirée soit atteinte. Il faut distinguer deux techniques qualitativement différentes : la première que nous qualifierons par la suite de simulation événementielle "event driven", c'est-à-dire qui dépend des événements et la seconde que nous nommerons par simulation temporelle "time driven" laquelle dépend du temps. Pour la simulation événementielle "event driven" la méthode DM ne s'intéresse pas à la dynamique en elle-même, mais seulement à une configuration particulière lorsque certains événements se produisent. Cela peut être par exemple une collision entre les inclusions ou une interaction d'une inclusion avec la limite de la région considérée. Pour tous ces événements, les paramètres (coordonnées, vitesses, vitesses angulaires,...) des inclusions sont mis à jour et le processus est répété jusqu'à obtention de la configuration souhaitée. A contrario la simulation dépendante du temps "time driven" met à jour les paramètres à chaque étape. La première méthode est plus efficace à condition qu'il existe un moyen simple de calculer le temps nécessaire pour que l'événement se produise .

En pratique, c'est une tâche difficile même pour des formes géométriques simples comme les ellipsoïde ([4]), il faut prédire les moments où les collisions entre les inclusions se produisent de sorte qu'ils fournissent un modèle d'interaction cohérent.

Dans ce papier, nous mettons en œuvre les méthodes mentionnées ci-dessus pour générer les VER avec des inclusions cylindriques et sphériques. Dans un premier temps nous discutons des critères d'intersection entre les sphères et les cylindres et les cylindres entre-eux. Une fois cette étape réalisée, nous pouvons mettre en place une stratégie de génération aléatoire d'inclusion basée sur la dynamique moléculaire.

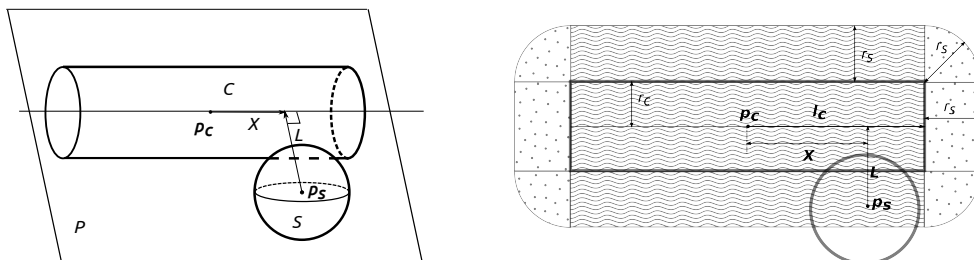
2 Critère d'intersection

Dans cette section, nous décrivons les conditions d'intersection des formes géométriques utilisées comme inclusions dans la génération des VER. Nous présentons ces conditions sous forme d'algorithmes permettant ainsi leur mise en œuvre. Dans chaque algorithme, nous détectons non seulement l'intersection mais nous spécifions aussi la nature de celle-ci (notations de la forme *sc1*, *sc2*, *cc1* ...). Nous les utilisons pour définir les lois d'interaction de la dynamique moléculaire, il faut donc distinguer plusieurs cas.

2.1 Intersection sphère - cylindre

Commençons par le cas d'intersection d'une sphère avec un cylindre. Tout au long de cet article, nous caractériserons une sphère S par son centre $\mathbf{p}_s \in \mathbb{R}^3$ et son rayon $r_s \in \mathbb{R}$, et nous la désignons par $S(\mathbf{p}_s, r_s)$. Les paramètres pour un cylindre $C(\mathbf{p}_c, r_c, \mathbf{l}_c)$ sont le centre noté $\mathbf{p}_c \in \mathbb{R}^3$, son rayon $r_c \in \mathbb{R}$ et la direction de l'axe de symétrie $\mathbf{l}_c \in \mathbb{R}^3$ - un vecteur qui n'est pas normalisé et codant ainsi l'information de la moitié de la longueur du cylindre. Dans ce qui suit, nous utiliserons la notation a pour le rapport de forme d'un cylindre $a = \frac{\|\mathbf{l}_c\|}{r_c}$.

Pour garantir qu'une sphère S ne croise pas un cylindre C , il faut vérifier deux conditions : il n'y a pas d'intersection ni avec la face du cylindre ni avec l'une des deux bases (disques extrêmes dans les sections orthogonales). Les deux quantités importantes sont donc le paramètre L désignant la distance de \mathbf{p}_s à l'axe de symétrie de C et le paramètre X qui désigne la distance de \mathbf{p}_c à la projection orthogonale de \mathbf{p}_s à l'axe, lesquels permettent de vérifier si \mathbf{p}_s est dans le domaine d'intersection (figure 1b).



(a) Vue 3D. Le plan P de la figure passe aux travers des axes de symétrie du cylindre \mathbf{l}_c et le centre de la sphère \mathbf{p}_s .

(b) Les zones ondulées et mouchetées correspondent respectivement aux intersections de type *sc2* et *sc3* – *sc4*.

FIGURE 1 – Intersection d'une sphère avec un cylindre

Nous donnons le principe de l'algorithme décrivant les étapes clés. L'intersection de type *sc2* est la plus naturelle, c'est lorsque la sphère et le cylindre se touchent. Les types *sc3* et *sc4* correspondent à la sphère qui coupe la base du disque du cylindre ; cela dépend si le centre de la sphère se trouve à l'intérieur ou non d'un cylindre infini. Le type *sc1* correspond à une situation dégénérée lorsque le cylindre est dans la sphère.

Algorithme 1. Entrée : $S(\mathbf{p}_s, r_s), C(\mathbf{p}_c, r_c, \mathbf{l}_c)$.

1. Evaluer $X = (\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_c) \cdot \mathbf{l}_c / \|\mathbf{l}_c\|$
2. si $(|X| > \|\mathbf{l}_c\| + r_s)$
 - (a) si $(\|\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s\| < r_s) \rightarrow$ intersection de type sc1, arrêt.
 - sinon \rightarrow pas d'intersection, arrêt
3. si $(|X| < \|\mathbf{l}_c\|)$
 - (a) Evaluer $L = \sqrt{(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_c)^2 - X^2}$
 - (b) si $(L < r_s + r_c) \rightarrow$ intersection de type sc2, arrêt.
 - sinon \rightarrow pas d'intersection, arrêt
4. si $(\|\mathbf{l}_c\| \leq |X| \leq \|\mathbf{l}_c\| + r_s)$
 - (a) Evaluer $L = \sqrt{(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_c)^2 - X^2}$
 - (b) si $(L < \sqrt{r_s^2 - (|X| - \|\mathbf{l}_c\|)^2} + r_c)$
 - i. si $(|L| < r_c) \rightarrow$ intersection de type sc3, arrêt.
 - ii. si $(|L| \geq r_c) \rightarrow$ intersection de type sc4, arrêt.
 - sinon \rightarrow pas d'intersection, arrêt.

2.2 Intersection cylindre - cylindre

Passons maintenant à l'intersection de deux cylindres C_1 and C_2 . Contrairement à la situation précédente, nous avons quatre cas d'intersection à considérer, c'est-à-dire toutes combinaisons entre les faces des cylindres ou la base des disques engendrant les cylindres.

Une remarque importante (et non triviale) est comment distinguer ces cas en termes géométriques. Plus précisément, considérons les axes de symétrie l_1 et l_2 des cylindres. Soient \mathbf{pt}_1 et \mathbf{pt}_2 les points d'intersection des axes respectifs. Si les cylindres se croisent de manière non triviale (c'est-à-dire l'un n'est pas à l'intérieur de l'autre) mais \mathbf{pt}_1 n'est pas à l'intérieur C_1 et \mathbf{pt}_2 ne correspond pas à C_2 alors au moins une des bases de disque d'un des cylindres coupe l'autre cylindre.

S'il n'y a pas d'intersection par la face cylindrique d'un des cylindres, le résultat est automatique. Si les axes de symétrie sont coplanaires, l'énoncé est également trivial et découle de l'intersection entre rectangles dans le plan. Sinon, considérons l'intersection de cylindres infinis d'axe l_1 et l_2 . Ce sont des surfaces quadratiques de \mathbb{R}^3 et leur intersection est décrite par des équations algébriques. Comme la distance entre les axes est inférieure à la somme des rayons des cylindres, il y a des points appartenant à ces courbes dans le plan orthogonal à l_1 qui contient le segment $[\mathbf{pt}_1, \mathbf{pt}_2]$.

Par construction, ce plan est en dehors de C_1 . Un raisonnement analogue est valable pour l'autre cylindre. Mais puisque les cylindres se croisent, il y a également un point sur les surfaces de C_1 et C_2 appartenant à l'une de ces courbes. Ainsi, de par la continuité, la courbe doit couper au moins un des bords circulaires de l'une des bases du cylindre.

L'observation ci-dessus simplifie grandement le calcul puisque, pour détecter l'intersection, il suffit de vérifier les conditions algébriques explicites. Un décompte du nombre des opérations nécessaires montre clairement que ceci est beaucoup plus rapide que résoudre un problème de minimisation pour trouver la distance entre deux objets convexes. En outre, il permet de distinguer les différents types d'intersection. Nous donnons les détails sur ces conditions dans les algorithmes suivants.

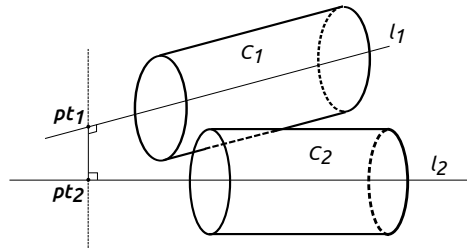


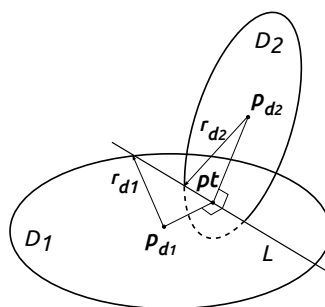
FIGURE 2 – Geometrie de l'intersection entre deux cylindres

Tout d'abord, considérons l'intersection entre deux disques dans \mathbb{R}^3 . Un disque D se caractérise par son centre \mathbf{p}_d , son rayon r_d et un vecteur normal \mathbf{n}_d , nous le notons $D(\mathbf{p}_d, r_d, \mathbf{n}_d)$. Pour vérifier l'intersection de nos disques, nous caractérisons la ligne commune des plans contenant les disques et on compare la distance des centres des disques avec leurs rayons respectifs.

Algorithme 2. Entrée : $D_1(\mathbf{p}_{d_1}, r_{d_1}, \mathbf{n}_{d_1}), D_2(\mathbf{p}_{d_2}, r_{d_2}, \mathbf{n}_{d_2})$

1. Evaluer le vecteur directeur de la ligne L d'intersection avec le plan contenant D_1 and D_2 :
 $\mathbf{n} = \mathbf{n}_{d_1} \times \mathbf{n}_{d_2}$.
2. Evaluer la projection commune du centre du disque à L : $\mathbf{pt} = \mathbf{p}_{d_1} + t\mathbf{v}$, où $\mathbf{v} = \mathbf{n} \times \mathbf{n}_{d_1}$,
 $t = \mathbf{n}_{d_2} \cdot (\mathbf{p}_{d_1} - \mathbf{p}_{d_2}) / (\mathbf{n}_{d_2} \cdot \mathbf{v})$.
3. si $(\|\mathbf{pt} - \mathbf{p}_{d_1}\| \leq r_{d_1}) \& (\|\mathbf{pt} - \mathbf{p}_{d_2}\| \leq r_{d_2})$
 si $(r_{d_1}^2 - \|\mathbf{pt} - \mathbf{p}_{d_1}\|^2 > r_{d_2}^2 - \|\mathbf{pt} - \mathbf{p}_{d_2}\|^2)$
 → intersection de type d1, arrêt
 sinon → intersection de type d2, arrêt
 sinon → pas d'intersection, arrêt

Dans la situation générique, seul un des disques rencontre le bord du cercle de l'autre (c'est la différence entre les cas $d1$ et $d2$).

FIGURE 3 – Géométrie d'intersection entre deux disques de type $d1$ (pour le type $d2$ intervertir le rôle des disques).

Passons à l'intersection d'un disque avec la surface latérale d'un cylindre. Nous ne considérerons uniquement que le point d'intersection de l'axe du cylindre avec le plan contenant le disque et nous vérifierons s'il se trouve à l'intérieur, proche ou loin du disque. Cet algorithme traitera uniquement les cas qui ne sont pas couverts par le précédent, c'est-à-dire que l'intersection est considérée uniquement si le disque ne touche pas le bord circulaire de la face latérale du cylindre.

Algorithme 3. Entrée : $C(\mathbf{p}_c, r_c, \mathbf{l}_c), D(\mathbf{p}_d, r_d, \mathbf{n}_d)$

1. Evaluer le point d'intersection de l'axe du cylindre avec le plan du disque : $\mathbf{a} = \mathbf{p}_c + t\mathbf{l}_c$,
où $t = \mathbf{n}_d \cdot (\mathbf{p}_d - \mathbf{p}_c) / (\mathbf{n}_d \cdot \mathbf{l}_c)$.
2. Evaluer le point du bord du disque qui est le plus proche de \mathbf{a} : $\mathbf{pt}_c = \mathbf{p}_d + r_d \frac{\mathbf{a} - \mathbf{p}_d}{\|\mathbf{a} - \mathbf{p}_d\|}$.
3. Evaluer la distance entre le centre du cylindre et la projection \mathbf{b} de \mathbf{pt}_c à ses axes : $X = (\mathbf{pt}_c - \mathbf{p}_c) \cdot \mathbf{l}_c / \|\mathbf{l}_c\|$, $\mathbf{b} = \mathbf{p}_c + X \cdot \mathbf{l}_c / \|\mathbf{l}_c\|$.
4. si ($|X| < \|\mathbf{l}_c\|$)

(a) si ($\ \mathbf{p}_d - \mathbf{a}\ > r_d$) & ($\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ < r_c$) → intersection de type cd1, arrêt,
(b) si ($\ \mathbf{p}_d - \mathbf{a}\ < r_d$) & ($\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ < r_c$) → intersection de type cd2, arrêt,
5. if ($\|\mathbf{a} - \mathbf{p}_d\| < r_d$) → intersection de type cd3, arrêt
6. si pas d'intersection de type cd1, cd2 ou cd3
→ pas d'intersection, ou intersection de type disque-disque , arrêt.

Le choix du type d'intersection dépend de la profondeur de pénétration du disque dans la face latérale du cylindre :

- le disque affleure la surface : *cd1*,
- il intercepte les axes de symétrie : *cd2*
- le cylindre dans son ensemble rentre dans le disque : *cd3*.

Enfin, nous présentons l'algorithme de vérification de l'intersection entre deux cylindres dans toute sa généralité. Nous utilisons ici la déclaration dès le début de la section nous permettant de distinguer les cas d'intersection par les disques de base et par les surfaces cylindriques. Aux types d'intersection décrits ci-dessus, nous ajoutons *cc1* correspondant aux deux surfaces cylindriques se croisant.

Algorithme 4. Entrée : $C_1(\mathbf{p}_{c_1}, r_{c_1}, \mathbf{l}_{c_1}), C_2(\mathbf{p}_{c_2}, r_{c_2}, \mathbf{l}_{c_2})$

1. Evaluer le vecteur normal colinéaire à l'axe de symétrie des cylindres :

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{l}_{c_1} \times \mathbf{l}_{c_2}}{\|\mathbf{l}_{c_1} \times \mathbf{l}_{c_2}\|}$$
2. Evaluer la distance entre l'axe de symétrie des cylindres : $\rho = |(\mathbf{p}_{c_1} - \mathbf{p}_{c_2}) \cdot \mathbf{n}|$
3. si $\rho > r_{c_1} + r_{c_2} \rightarrow$ pas d'intersection, arrêt.
 sinon
 - (a) Evaluer les normales aux plans contenant \mathbf{n} et les axes l_1 et l_2 des cylindres respectifs : $\mathbf{n}_1 = \mathbf{n} \times \mathbf{l}_{c_1}, \mathbf{n}_2 = \mathbf{n} \times \mathbf{l}_{c_2}$.
 - (b) Evaluer les points réalisant la distance entre les axes : $\mathbf{p}t_1 = \mathbf{p}_{c_1} + t_1 \mathbf{l}_{c_1},$
 $\mathbf{p}t_2 = \mathbf{p}_{c_2} + t_2 \mathbf{l}_{c_2},$ où
 $t_1 = (\mathbf{p}_{c_2} - \mathbf{p}_{c_1}) \cdot \mathbf{n}_2 / (\mathbf{l}_{c_1} \cdot \mathbf{n}_2),$
 $t_2 = (\mathbf{p}_{c_1} - \mathbf{p}_{c_2}) \cdot \mathbf{n}_1 / (\mathbf{l}_{c_2} \cdot \mathbf{n}_1).$
 - (c) si $(|t_1| \leq 1) \& (|t_2| \leq 1) \rightarrow$ intersection de type cc1, arrêt
 sinon
 - i. avec l'algorithme 3, vérifier l'intersection de C_1 avec les disques $D((\mathbf{p}_{c_2} + \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, \mathbf{l}_{c_2})$ et $D((\mathbf{p}_{c_2} - \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, -\mathbf{l}_{c_2})$
 - ii. avec l'algorithme 3, vérifier l'intersection de C_2 avec les disques $D((\mathbf{p}_{c_1} + \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, \mathbf{l}_{c_1})$ et $D((\mathbf{p}_{c_1} - \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, -\mathbf{l}_{c_1})$
 - iii. avec l'algorithme 2, vérifier intersection de
 $D((\mathbf{p}_{c_1} + \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, \mathbf{l}_{c_1})$ avec $D((\mathbf{p}_{c_2} + \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, \mathbf{l}_{c_2}),$
 $D((\mathbf{p}_{c_1} + \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, \mathbf{l}_{c_1})$ avec $D((\mathbf{p}_{c_2} - \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, -\mathbf{l}_{c_2}),$
 $D((\mathbf{p}_{c_1} - \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, -\mathbf{l}_{c_1})$ avec $D((\mathbf{p}_{c_2} + \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, +\mathbf{l}_{c_2}),$
 $D((\mathbf{p}_{c_1} - \mathbf{l}_{c_1}), r_{c_1}, -\mathbf{l}_{c_1})$ avec $D((\mathbf{p}_{c_2} - \mathbf{l}_{c_2}), r_{c_2}, -\mathbf{l}_{c_2}).$
 - iv. s'il n'y a pas d'intersection selon les trois critères précédents.
 \rightarrow pas d'intersection, arrêt.

Plusieurs remarques sont à faire sur les algorithmes ci-dessus. Tout d'abord, dans leur mise en œuvre, il faut être très attentif aux cas dégénérés, comme par exemple le fait que les axes de symétrie des cylindres sont proches et peuvent se toucher ou bien être parallèles, ou encore, les centres des inclusions peuvent être proches au point de coïncider. De telles situations pourraient conduire à des valeurs aberrantes engendrant des anomalies de calcul. Nous ne nous attardons pas sur ces cas de figure en détail dans les algorithmes car ils correspondent à des configurations géométriques explicites et leur description rend l'exposé trop technique et sans réelle contribution à la méthode. Deuxièmement, en ayant des informations supplémentaires, on peut optimiser un peu les algorithmes à l'exclusion de certains points correspondant à des cas particuliers.

3 Génération aléatoire : Dynamique Moléculaire

Les algorithmes présentés dans la section précédente permettent de formuler explicitement la méthode de génération des VER stochastiques avec des inclusions sphériques et cylindriques sans chevauchement. Comme précisé précédemment, une sphère se caractérise par son centre \mathbf{p}_s et son rayon r_s , le cylindre par son centre \mathbf{p}_c , son rayon r_c et la direction de l'axe de symétrie \mathbf{l}_c . Supposons que les fractions de

volume f_s , f_c ainsi que le nombre n_s , n_c de sphères et de cylindres soient donnés, fixons également le rapport d'aspect $a = \|l_c\|/r_c$ de tous les cylindres. Cela définit alors la taille de toutes les formes géométriques. La génération aléatoire d'une sphère revient à générer trois nombres réels caractérisant le centre \mathbf{p}_s , et celle d'un cylindre, six nombres réels caractérisant le centre \mathbf{p}_c et l'axe l_c .

Dans cette partie nous mettons en œuvre la simulation temporelle de la dynamique moléculaire dite "time driven". Le principe est le suivant : toutes les inclusions sont générées simultanément en ne prenant pas en compte les intersections entre inclusions. Nous introduisons alors, des forces d'interaction, lesquelles sont attribuées à chaque couple d'inclusions s'intersectant. La dynamique régie par ces forces est décrite par un système d'équations différentielles ordinaires, qui sont résolues numériquement afin d'obtenir une configuration relaxée, c'est-à-dire une configuration où les inclusions ne se chevauchent pas. (Les inclusions sont également affectées par les forces d'amortissement qui sont censées ralentir le système et faire en sorte d'obtenir la configuration recherchée.)

Avant d'entrer dans les détails, expliquons le choix de cette stratégie par rapport à d'autres choix possibles. Nous aurions pu appliquer le modèle présenté dans [4] dans le contexte des ellipsoïdes. Le problème majeur est qu'il faudrait formuler un algorithme efficace de calcul du temps de collision. Nous avons vu dans la section 2 que la condition d'intersection pour les cylindres peut être vérifiée de manière algébrique, cependant, contrairement aux ellipsoïdes, il n'existe pas de moyen aussi efficace de caractérisation, en termes de zéros d'une certaine fonction (à notre connaissance du moins). Ceci veut donc dire que l'utilisation des cylindres dans un contexte de collision pour la dynamique moléculaire induite par événement conduirait à résoudre un problème de minimisation, ce qui complique la tâche à chaque étape. De plus, le problème de collision pour deux cylindres rigides est également plus complexe à gérer. C'est ce qui nous a conduit à développer une nouvelle approche plus efficace et qui ne se résume pas à simplement intégrer les équations différentielles ordinaires. L'autre option possible est de modifier l'algorithme RSA en utilisant des mouvements aléatoires des inclusions. La difficulté réside dans la gestion des géométries complexes, un mouvement aléatoire ne suffira pas à exclure toutes les intersections. Une modification possible de cette méthode est de considérer plusieurs mouvements aléatoires pour réorganiser la configuration - cela mène à une approche plutôt classique conduisant à minimiser une certaine fonctionnelle à définir tout en utilisant la méthode de Monte Carlo ([7]) pour trouver les extrema.

Passons maintenant à la description de l'interaction des inclusions. Comme nous l'avons souligné précédemment, nous évaluons les forces pour deux inclusions qui se croisent. Dans notre modèle, les forces seront de nature élastique linéaire, c'est la valeur de la force proportionnelle à la longueur du chevauchement. La direction sera choisie de sorte que les forces se répulsent.

Par exemple pour deux sphères $S_1(\mathbf{p}_{s_1}, r_{s_1})$, $S_2(\mathbf{p}_{s_2}, r_{s_2})$: si $\|\mathbf{p}_{s_1} - \mathbf{p}_{s_2}\| < r_{s_1} + r_{s_2}$, la force agissant sur S_1 est $\mathbf{F}_{s_1} = -(\|\mathbf{p}_{s_1} - \mathbf{p}_{s_2}\| - r_{s_1} - r_{s_2}) \frac{\mathbf{p}_{s_1} - \mathbf{p}_{s_2}}{\|\mathbf{p}_{s_1} - \mathbf{p}_{s_2}\|}$. La force agissant sur la seconde sphère est l'opposée : $\mathbf{F}_{s_2} = -\mathbf{F}_{s_1}$.

Pour les forces agissant sur les cylindres, il faut préciser le point d'application, puisque leur mouvement tient également compte de la rotation. La table 1 récapitule toutes les forces qui peuvent agir sur un cylindre en fonction du type d'intersection à partir des algorithmes 1-4, en utilisant les mêmes notations que dans la section 2. Les forces décrites agissent toujours sur le premier cylindre ou son homologue correspondant. La force agissant sur l'autre objet est opposée et a le même point d'application.

Pour calculer la force entre chaque couple d'objets, il faut appliquer l'algorithme 1 ou 4 et choisir l'expression correspondante dans la table. En continuant la remarque de la section précédente, il est à noter

	force \mathbf{F}_c	point d'application \mathbf{pt}_c
sc1	$2\mathbf{l}_c \frac{\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s}{\ \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s\ }$	\mathbf{p}_c
sc2	$-\sqrt{(r_s + r_c)^2 - L^2} \frac{\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }}{\ \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }\ }$	$\mathbf{p}_s + (r_s - \sqrt{(r_s + r_c)^2 - L^2}) \frac{\mathbf{F}_c}{\ \mathbf{F}_c\ }$
sc3	$-(\ \mathbf{l}_c\ + r_s - X) \frac{X}{ X } \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }$	$\mathbf{p}_c + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ } - L \frac{\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }}{\ \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }\ }$
sc4	$(\sqrt{r_s^2 - (X - \ \mathbf{l}_c\)^2} + r_c - L) \frac{\mathbf{pt}_c - \mathbf{p}_s}{\ \mathbf{pt}_c - \mathbf{p}_s\ }$	$\mathbf{p}_c + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ } - r_c \frac{\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }}{\ \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_s + X \frac{\mathbf{l}_c}{\ \mathbf{l}_c\ }\ }$
cc1	$(r_{c1} + r_{c2} - \rho) \frac{\mathbf{pt}_1 - \mathbf{pt}_2}{\ \mathbf{pt}_1 - \mathbf{pt}_2\ }$	$(\mathbf{pt}_1 + \mathbf{pt}_2)/2$
cd1	$-(\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ - r_c) \frac{\mathbf{b} - \mathbf{pt}_c}{\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ }$	$\mathbf{p}_d + r_d \frac{\mathbf{a} - \mathbf{p}_d}{\ \mathbf{a} - \mathbf{p}_d\ }$
cd2	$-(\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ - 2r_c) \frac{\mathbf{pt}_c - \mathbf{b}}{\ \mathbf{b} - \mathbf{pt}_c\ }$	$\mathbf{p}_d + r_d \frac{\mathbf{a} - \mathbf{p}_d}{\ \mathbf{a} - \mathbf{p}_d\ }$
cd3	$2r_c \frac{\mathbf{p}_c - \mathbf{p}_d}{\ \mathbf{p}_c - \mathbf{p}_d\ }$	\mathbf{a}
d1	$-(r_{d2} - \ \mathbf{pt}_c - \mathbf{p}_{d2}\) \frac{\mathbf{n}_{d1}}{\ \mathbf{n}_{d1}\ }$	$\mathbf{p}_1 + t\mathbf{v}$
d2	$-(r_{d1} - \ \mathbf{pt}_c - \mathbf{p}_{d1}\) \frac{\mathbf{n}_{d2}}{\ \mathbf{n}_{d2}\ }$	$\mathbf{p}_1 + t\mathbf{v}$

TABLE 1 – Nature des forces en fonction de la nature de l'intersection type

que les intersections des types cd1-cd3 et d1-d2 peuvent être combinées, cela signifie qu'il faudra peut-être considérer simultanément les forces provenant de ces types d'intersection.

4 Illustrations

Comme le titre le laissait entendre, la motivation principale de ce travail est de construire des échantillons de VER pour le calcul des propriétés effectives des matériaux composites. Les méthodes de calcul que nous utilisons sont basées sur les techniques d'homogénéisation en utilisant la Transformée de Fourier rapide¹ ou la méthode des éléments finis.

Ici, nous devons mentionner que les méthodes décrites dans cet article sont très bien adaptées à de telles applications. Tout d'abord, les algorithmes sont très flexibles en ce qui concerne les données d'entrée. Par exemple, au lieu d'utiliser les sphères et les cylindres identiques comme nous l'avons fait pour des tests d'efficacité, on peut également introduire toute loi déterministe ou probabiliste pour les paramètres relatifs à la géométrie des inclusions. Le calcul que nous effectuons pour étudier les propriétés effectives des composites montre que de telles modifications ne brident pas l'efficacité des méthodes. En outre, le format de sortie des algorithmes est sous forme vectorielle, permettant, d'une part, la voxellisation et ainsi avoir une discrétisation naturelle de l'échantillon analysé et, d'autre part, conserver une trace des orientations des inclusions (voir figure 4).

On peut également introduire des déformations au niveau des inclusions, détecter les bords et affecter diverses propriétés, ajouter des défauts, etc. La figure 5 montre la section d'un VER avec des cylindres ondulés et des sphères et une interphase surlignée entre la matrice et les inclusions. En outre, à partir d'un VER pixélisé, nous pouvons facilement construire un maillage pour effectuer des calculs par la méthode des éléments finis.

Les méthodes présentées sont très flexibles à bien des égards. Par exemple dans la description des méthodes, nous avons potentiellement autorisé les contacts tangents entre les inclusions (ce qui est raisonnable pour nos applications), mais il est possible de les éviter en modifiant simplement les distances

1. Pour la mise en œuvre des méthodes inspirées par le travail de [2] et des résultats récents de [8], [9]

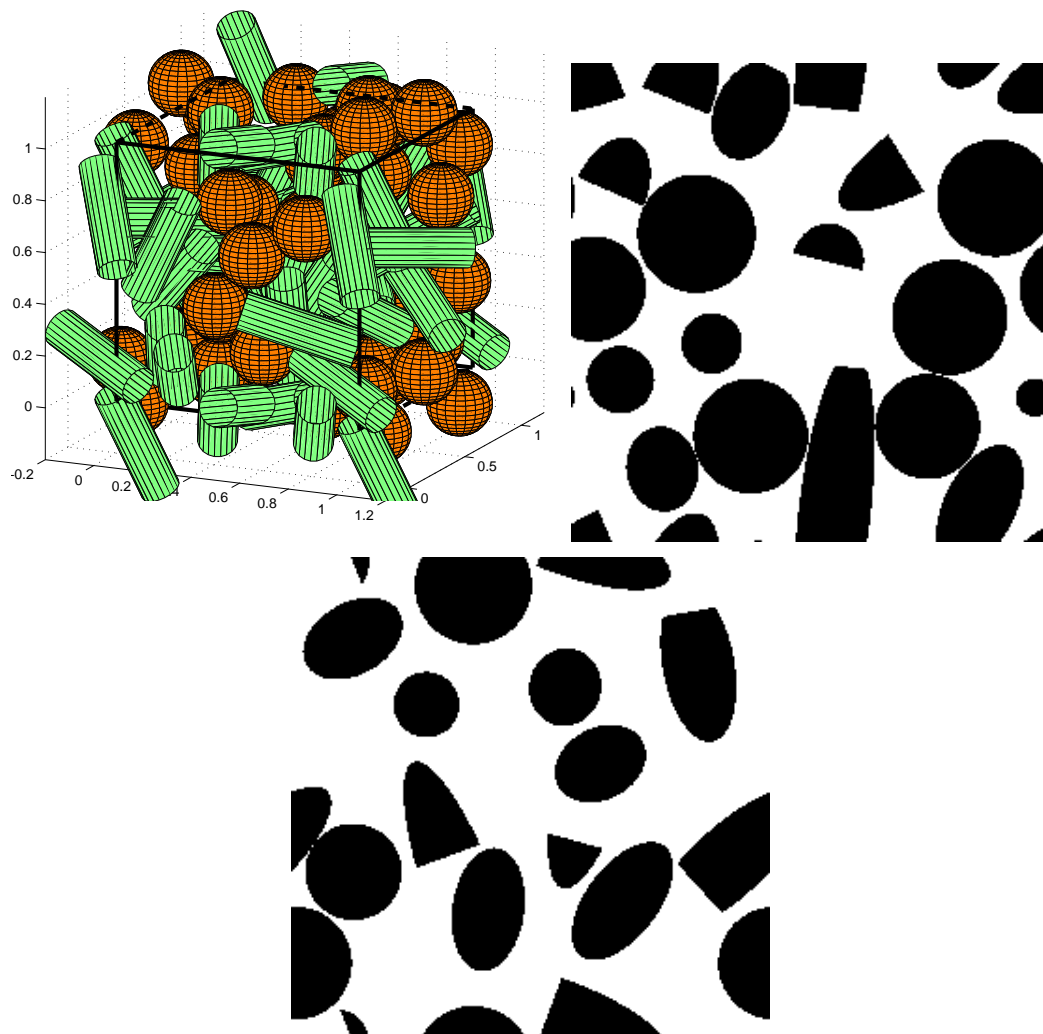


FIGURE 4 – Exemple de VER généré par l’algorithme basée sur la dynamique moléculaire pour une fraction volumique totale de 40% : vue 3D et une paire de planches pixelisée de l’image 3D

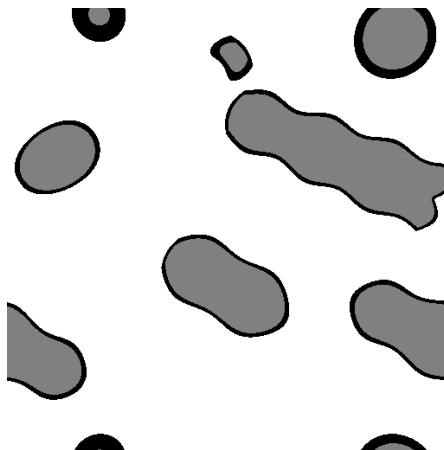


FIGURE 5 – Exemple d’une section d’un VER avec des inclusions ondulées, l’interphase étant surlignée.

d'interaction en inclusions. On peut également construire des géométries plus complexes en autorisant d'autres types d'intersections, ce qui est facile à vérifier car toutes les informations liées à la géométrie de l'échantillon sont codés sous une forme vectoriel. Le plus précisément dans les méthodes de dynamique moléculaire, on peut imposer des contraintes comme la conservation des distances ou des angles entre certaines inclusions. En raison de la forme naturelle des équations d'évolution, ces restrictions peuvent être mises en œuvre en utilisant un formalisme bien développé des systèmes mécaniques sous contraintes et à l'aide des multiplicateurs Lagrange ([10])

5 Conclusion

La conception des VER à l'aide de la dynamique moléculaire se révèle pertinente et efficace et ce pour des fractions volumiques élevées. La méthode DM vient compléter la méthode RSA. Elle permet une génération robuste, fiable, rapide et efficace des VER pour des fractions volumiques, des géométries de taille et d'orientation fixés, et ce, sans chevauchement. Les adaptations présentées dans ce papier offrent une multitude de possibilités en fonction des applications souhaitées. Les VER ainsi conçus servent au calcul des propriétés effectives des composites utilisant tant les éléments finis que les schémas numériques basées sur la FFT ([11], [12], [13],[14]).

Remerciements

Nous remercions le CRIANN pour ses ressources informatiques.

Références

- [1] J. Segurado, J. Llorca, A numerical approximation to the elastic properties of sphere-reinforced composites, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50 (2002) 2107–2121.
- [2] E. Ghossein, M. Lévesque, A fully automated numerical tool for a comprehensive validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced composites, *International Journal of Solids and Structures* 49 (2012) 1387–1398.
- [3] W. Man, A. Donev, F. Stillinger, M. Sullivan, W. Russel, D. Heeger, S. Inati, S. Torquato, P. Chaikin, Experiments on random packings of ellipsoids, *Physical Review Letters*, 94 (2005) 198001.
- [4] E. Ghossein, M. Lévesque, Random generation of periodic hard ellipsoids based on molecular dynamics : A computationally-efficient algorithm, *Journal of Computational Physics*. 253(2013), 471–490.
- [5] S. Williams, A. Philipse, Random packings of spheres and spherocylinders simulated by mechanical contraction, *Physical Review E*, 67 (2003) 051301.
- [6] J. Zhao, S. Li, R. Zou, A. Yu, Dense random packings of spherocylinders, *Soft Matter*, 8 (2012) 1003-1009.
- [7] N. Metropolis, S. Ulam, *J. Amer. statistical assoc.*, 44, 247, 335–341, 1949.
- [8] J.C. Michel, H. Moulinec and P. Suquet, A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phasecontrast, *Int. J. Numer. Meth. Engng* 2001 ; 52 :139 ?160 (DOI : 10.1002/nme.275).
- [9] V. Monchiet, and G. Bonnet, A polarization-based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast, *Int. J. Numer. Meth. Engng* (2011).

-
- [10] G. Lagrange, *Analytical Mechanics*, “GTTT”, 1950.
- [11] E. Ghossein, M. Lévesque, A fully automated numerical tool for a comprehensive validation of homogenization models and its application to spherical particles reinforced composites, *International Journal of Solids and Structures*, 49 (2012) 1387–1398.
- [12] J.C. Michel, M. Moulinec et P. Suquet, A computational scheme for linear and non-linear composites with arbitrary phase contrast, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52 (2001) 139–160.
- [13] V. Monchiet et G. Bonnet, A polarization based FFT iterative scheme for computing the effective properties of elastic composites with arbitrary contrast, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 89 (2012) 1419–1436.
- [14] V. Salnikov, D. Choi, P. Karamian-Surville, On efficient and reliable stochastic generation of RVEs for analysis of composites within the framework of homogenization, *Computational Mechanics*, 55 (2015) 127–144.