Chapitre 5
Implémentation du modèle théorique de la gravure chimique

Nous proposons dans ce chapitre une implémentation du modèle théorique décrit précédemment. Nous décrivons tout d'abord la représentation choisie pour les données du problème (forme du cristal, vitesses de déplacement), la structure de données utilisée pour l'implémentation du modèle et les opérations applicables à cette structure. Nous décrivons ensuite une structure de données utilisée pour l'implémentation du modèle et un exemple d'implémentation en dimension 2.

1 - Représentation du problème

La représentation choisie pour le problème est celle d'espace fibré trivial (trivial fiber bundle), dérivée de la notion d'espace fibré [BUTLER - PENDLEY 1989b].

1.1 - Notion d'espace fibré trivial

Un espace fibré trivial est un espace regroupant une variété différentielle Σ définissant dans notre cas la surface du cristal et un espace vectoriel V associé à chaque point de Σ. Dans notre cas, V est l'espace des vecteurs de déplacement des points de Σ.

Σ est appelée la base de l'espace et V la fibre de l'espace. Localement et globalement, cette association de deux espace est équivalente au produit cartésien $\Sigma \times V$.

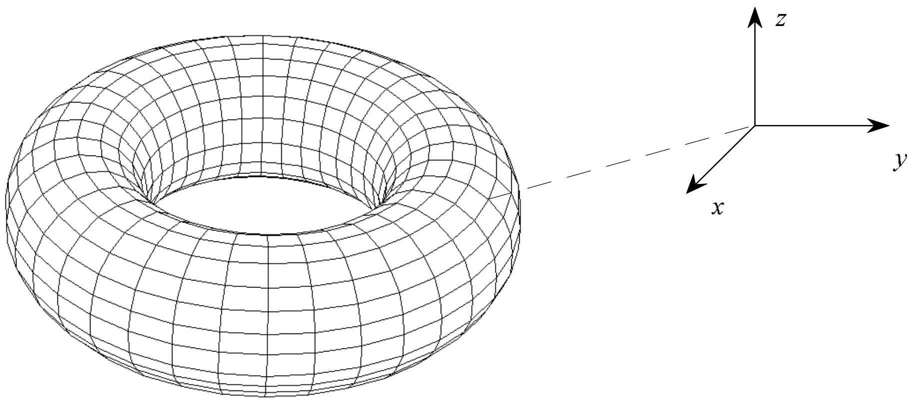


Fig 1 - Espace vectoriel V associé à tout point de la variété différentielle Σ

Les opérations applicables à un objet de ce type sont nombreuses (modifications de la base, modifications de la fibre,...) ; en particulier, on appellera **section** le choix d'un vecteur de la fibre pour chaque point de la base. Toute section de $\Sigma \times V$ est définie par une application de Σ dans V qui à tout point de Σ associe un vecteur de V.

La notion de fibre permet de représenter intuitivement le déplacement rectiligne des points de Σ : à tout point de Σ est associé un vecteur de V définissant sa vitesse. Une section fournit donc une représentation du problème à un instant donné : forme d'un cristal à cet instant et vitesses de déplacement des points de la surface.

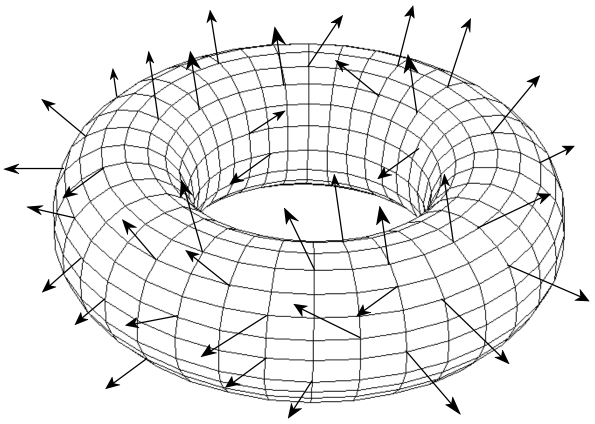


Fig 2 - Section de l'espace fibré trivial :
à chaque point de Σ est associé un vecteur de V.

1.2 - Implémentation de la structure sous forme d'acteurs

L'évolution temporelle de la forme d'un cristal est représentée par une suite d'objets dont chacun décrit son évolution dans un certain intervalle de temps. Les objets utilisés sont des acteurs [HEWITT 1971], [HEWITT 1973], [AGHA 1986] :

- chaque acteur est une entité non décomposable et lui seul peut modifier son état,
- chaque acteur peut communiquer directement avec les autres par l'envoi de messages ; c'est le seul mécanisme d'interactions entre acteurs,
- les seuls traitements possibles d'un message reçu par un acteur sont de le retransmettre à un autre acteur, de créer de nouveaux acteurs ou de modifier son propre état.

Le concept d'acteur fournit une représentation bien adaptée à l'évolution de la forme du cristal. Un acteur représente un cristal dont les points ont des trajectoires rectilignes dans un intervalle de temps précis. La borne inférieure de l'intervalle est l'instant de création de l'objet et la borne supérieure la limite de validité de l'objet. La forme du cristal que représente un objet peut être déduite dans l'intervalle de validité par simple déplacement de ses sommets.

1.3 - Opérations applicables aux objets

Les opérations applicables aux objets sont celles applicables aux espaces fibrés. Outre la section déjà décrite, on distingue en particulier

- la construction de la base Σ d'un objet. Dans le simulateur que nous présentons, la surface du substrat est représentée par un polygone de $\Re^2$ ou un polyèdre de $\Re^3$.
- la définition de la fibre d'un objet. Un point de Σ se déplace dans le même espace que celui dans lequel Σ est plongée : $V = \Re^2$ si Σ est un polygone de $\Re^2$, $V = \Re^3$ si Σ est un polyèdre de $\Re^3$.
- la construction d'un espace fibré par association d'une base et d'une fibre
- les opérations booléennes (unions, intersections) et les coupes. Les opérations booléennes sont appliquées sur la base de deux espaces ayant la même fibre. La coupe d'un espace suivant un hyperplan de la base est appliquée sur la base d'un espace fibré et produit deux espaces ayant la même fibre.

exemple de sous-espace est la projection suivant une des composantes de la fibre.

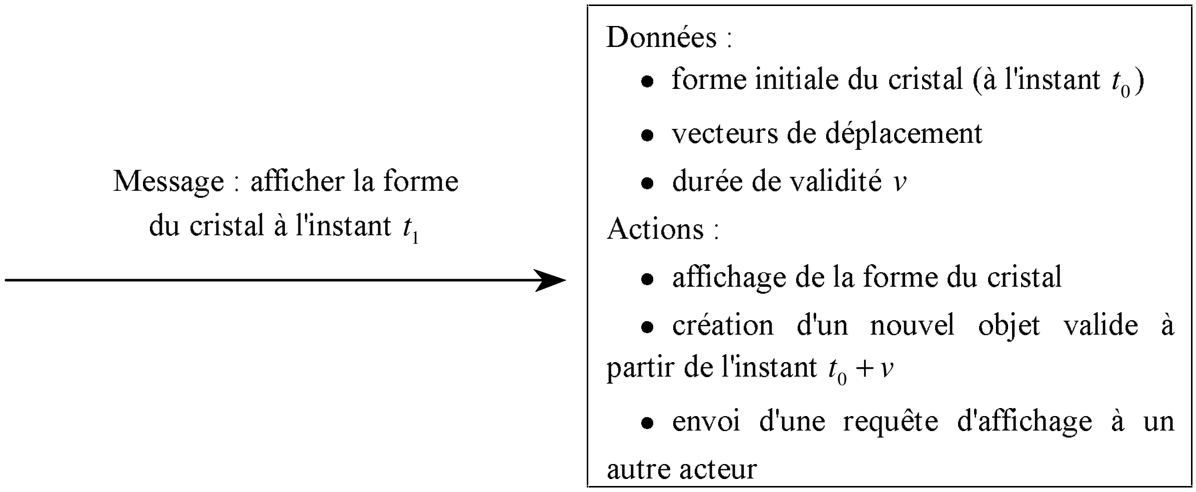
Ces opérations permettent de construire un modeleur et de lui adjoindre un système de visualisation où les objets graphiques (objets affichables) sont les sections d'espaces fibrés [BUTLER - PENDLEY 1989a].

2 - Programme de simulation de la gravure chimique

Nous donnons ici la structure générale d'un simulateur de la gravure chimique. Le simulateur permet, à partir des conditions initiales (géométrie du cristal et donnée de la vitesse des points), de décrire l'évolution de la forme du cristal au cours du temps.

2.1 - Fonctionnement général d'un acteur

Un acteur ne reconnaît qu'un seul type de message : l'affichage de la forme du cristal qu'il représente à un instant t. Le fonctionnement d'un acteur représentant une forme de cristal valide dans l'intervalle de temps $[t_0, t_0 + v[$ peut être représenté de la façon suivante :



Message : afficher la forme du cristal à l'instant t_1

Données :

- forme initiale du cristal (à l'instant t_0)
- vecteurs de déplacement
- durée de validité v

Actions :

- affichage de la forme du cristal
- création d'un nouvel objet valide à partir de l'instant $t_0 + v$
- envoi d'une requête d'affichage à un autre acteur

Fig 3 - Structure d'un acteur

- Si $t_1 \geq t_0 + v$, l'objet crée au besoin un ou plusieurs objets représentant la forme du cristal obtenu (ou des cristaux obtenus si le cristal original s'est scindé) et retransmet le message aux objets créés. La validité de chacun des objets créés débute à l'instant $t_0 + v$.

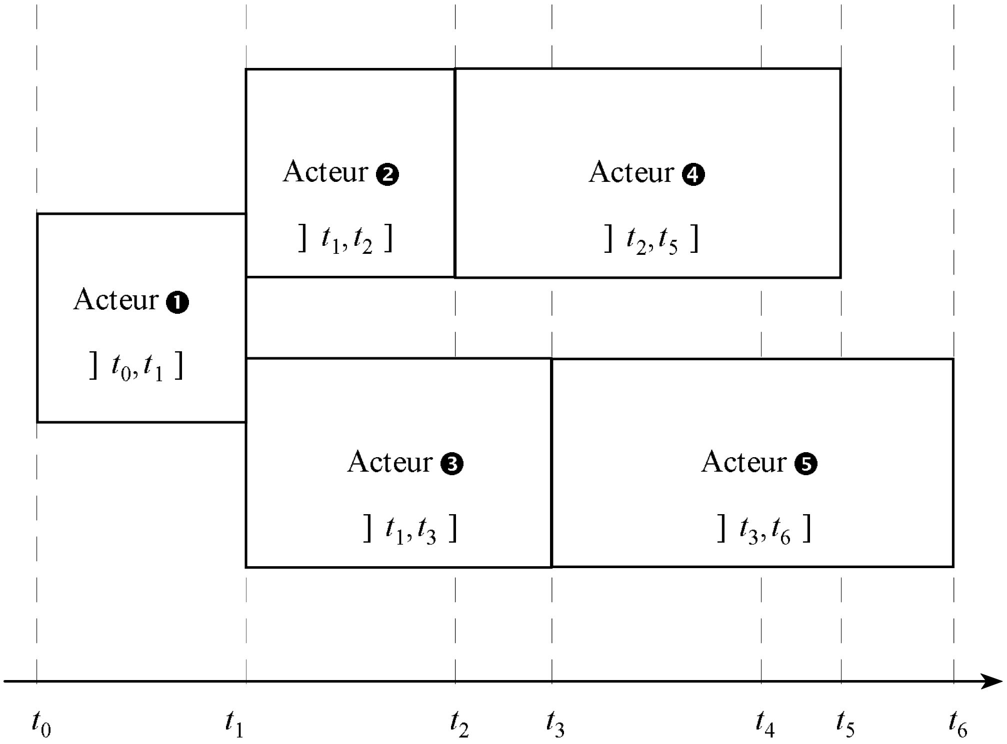


Fig 4 - Créations d'objets provoquées par la requête d'affichage de la forme à l'instant t_5

Nous supposons que le phénomène étudié ici est la gravure et donc qu'un objet peut :

- disparaître (le cristal a été entièrement dissout),
- donner naissance à un seul objet (la géométrie du cristal a changé et n'est plus calculable par simple déplacement des points sur leur trajectoire),
- donner naissance à plusieurs objets (le cristal s'est scindé en plusieurs cristaux dont les comportements deviennent indépendants).

ensuite les messages à ses successeurs.

2.2 - Evolution de la forme au cours du temps

La forme du cristal est calculée, pas-à-pas, à partir de la forme initiale. A chaque pas, la forme résultant de la gravure est construite en trois étapes :

- en tout sommet du cristal, les normales intermédiaires (voir chapitre précédent) sont construites. Ces normales sont calculées en fonction des normales extrêmes (normales des faces auxquelles appartient le sommet traité). La prise en compte d'un grand nombre de normales intermédiaires permet d'obtenir une bonne précision sur le résultat. En dimension 2, l'angle θ formé par les deux faces auxquelles appartient le sommet considéré est divisé en n angles identiques. Une constante $\theta_{\max}$, déterminant la précision globale de la méthode, définit le nombre n de divisions :

$$n = \left\lceil \frac{\theta}{\theta_{\max}} \right\rceil \qquad (n \text{ est le plus petit entier supérieur à } \frac{\theta}{\theta_{\max}})$$

De même, en dimension 3, un angle solide Θ est divisé en fonction d'une constante $\Theta_{\max}$ déterminant la précision de la méthode.

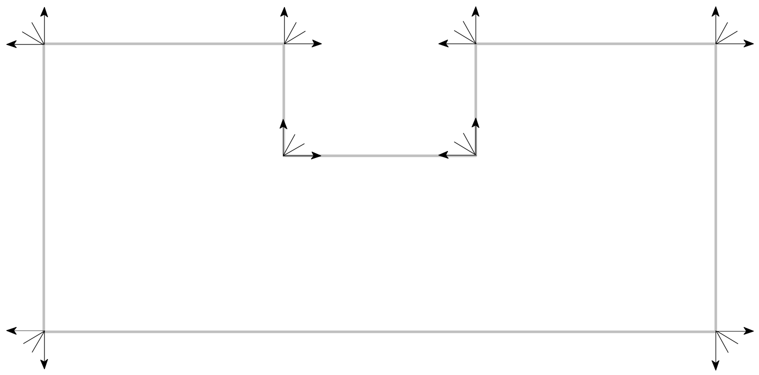


Fig 5 - Calcul des normales intermédiaires en chaque sommet par division des angles formés par les normales extrêmes. ($\theta_{\max} = \frac{\pi}{6} \Rightarrow n = 3$)

trajectoires.

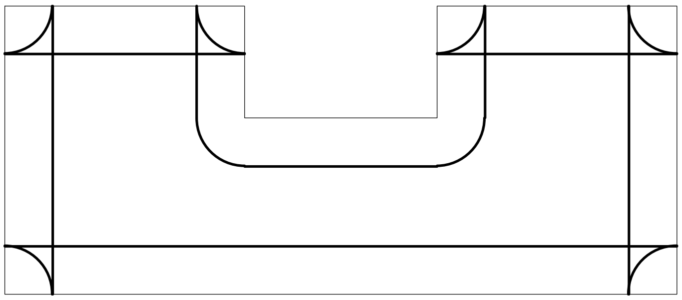


Fig 6 - Surface décrivant les déplacements possibles de tous les sommets.

Le calcul de la normale en chaque point de la nouvelle surface permet de mettre en évidence des points où l'hypothèse fondamentale *"les points se déplacent à normale constante"* n'est plus respectée.

- la surface est rendue cohérente par suppression des portions où la normale n'est pas conservée. La surface ainsi obtenue doit vérifier les propriétés caractéristiques des cristaux (surface sans bord et de classe C^1 par domaines).

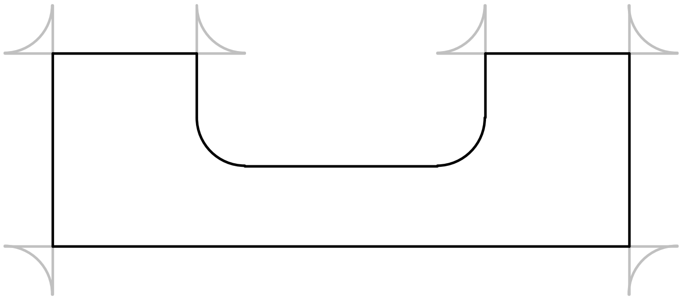


Fig 7 - Surface rendue cohérente (en gris : portions supprimées).

2.3 - Vitesse apparente d'un sommet

Nous introduisons ici la notion de vitesse apparente d'un sommet, qui permet de simplifier sensiblement l'évolution de la forme du cristal en évitant certains calculs inutiles. A partir de la deuxième évolution de la forme du cristal, les normales extrêmes en un sommet sont comparées avec les normales au sommet dont ce sommet est issu. Si les conditions sont identiques, il est inutile d'effectuer tous les calculs à nouveau.

Fig 8 - Normales extrêmes en un sommet définissant un angle sortant sur un polygone.

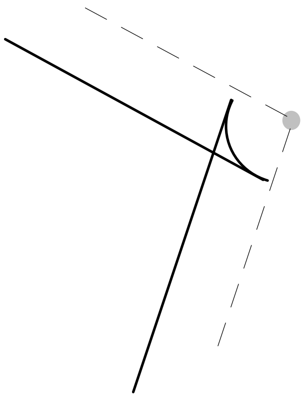


Fig 9 - Forme obtenue après le déplacement du sommet en fonction des directions des normales intermédiaires (en gris : sommet initial).

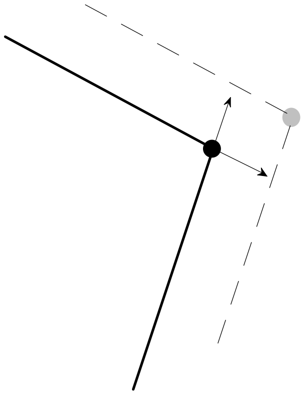


Fig 10 - Forme obtenue après simplification de la surface. Les conditions extrêmes (normales des faces auxquelles appartient le sommet) sont inchangées.

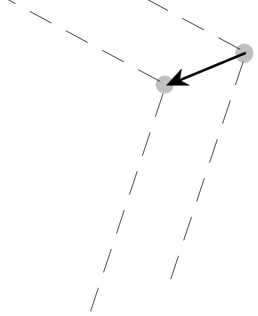


Fig 11 - Vitesse apparente du sommet.

2.4 - Détermination de la durée de validité d'un objet

Dès sa création, un objet calcule sa propre durée de validité. Il construit pas-à-pas la forme résultant du déplacement de ses points et détermine si la structure du cristal a changé. On parlera de changement de structure lorsque, après la phase de simplification de la forme du cristal, les vitesses apparentes des sommets ne permettent plus de calculer la forme suivante (changement du nombre de sommets, scission du cristal).

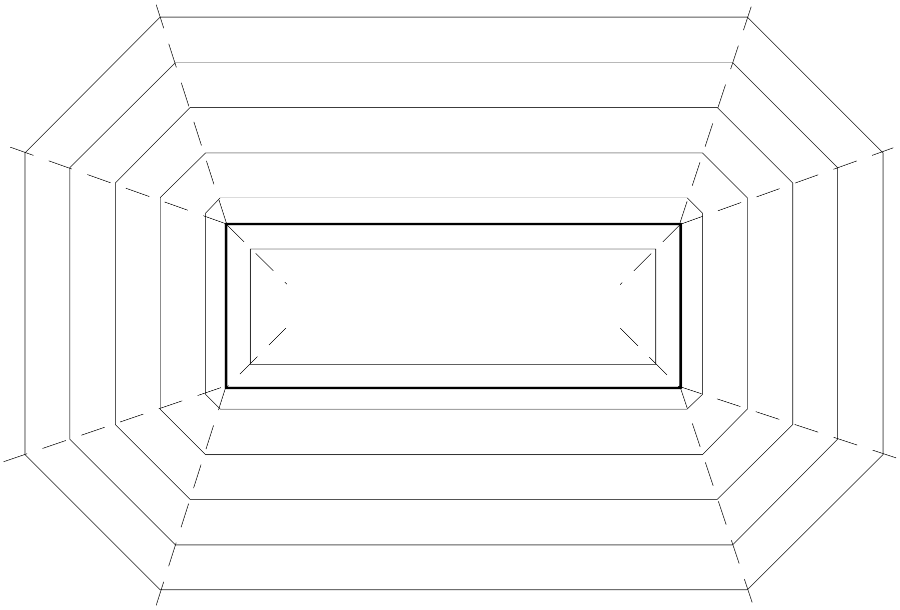


Fig 12 - Changement de structure pendant la simulation de la gravure d'un cristal initialement octogonal (en pointillés : trajectoires apparentes des sommets).

Fig 13 - Changement de structure causé par une scission du cristal (en pointillés : trajectoires apparentes des sommets).

Le nombre de pas pendant lesquels la forme d'un objet est calculable à partir des vitesses apparentes des sommets est appelé durée de validité de l'objet.

3 - Simulation de la gravure en dimension 2

Nous présentons ici un programme de simulation de la gravure en dimension 2 utilisant le concept d'acteurs. La représentation du problème (forme du cristal et vitesses de déplacement des points du cristal) est celle que suggère la notion d'espace fibré trivial :

- la base de l'espace, définissant la forme du cristal, est représentée par un polygone. Cette représentation simplifiée est justifiée par les conditions expérimentales : la forme initiale du cristal à graver est en général un polygone.

- la fibre de l'espace, définissant les trajectoires des points de la base, est l'espace dans lequel évolue le cristal. Une section de la fibre est déterminée par une application qui à un vecteur unitaire (normale en un point) associe le déplacement du point considéré.

3.1 - Description du simulateur réalisé

Le simulateur que nous présentons a été réalisé sur une station NeXT, sous l'environnement NEXTSTEP. Le langage utilisé (objective C) permet d'implémenter le problème sous forme d'acteurs. Un objet est créé par l'association d'un polygone (forme du cristal) et d'une application de la sphère unitaire S dans $\Re^2$ qui à la direction de la normale associe un vecteur déplacement. A sa création, un objet reçoit également un message lui demandant d'afficher à un instant donné la forme du cristal qu'il représente.

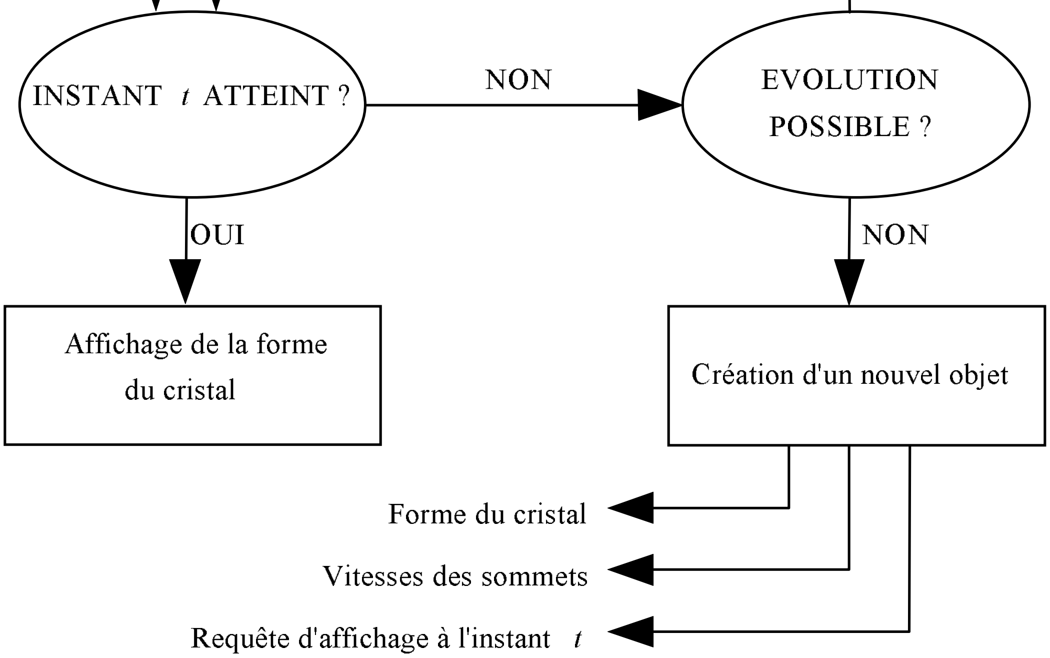


Fig 14 - Schéma de création des acteurs

La partie la plus délicate de la simulation est la détermination de la durée de validité d'un acteur. Le calcul de la durée de validité à partir de la création s'effectue, pour un objet dont l'affichage à l'instant *t* est requis), de la façon suivante :

```
Validité := 1
Déplacer les sommets du polygone
Simplifier le polygone obtenu

TANT QUE la structure du polygone ne change pas ET l'instant t n'est pas atteint FAIRE
    ³Validité := Validité + 1
    ³Déplacer les sommets du polygone
    ³Simplifier le polygone obtenu

SI l'instant t n'est pas atteint ALORS
    ³Créer un nouvel objet
```

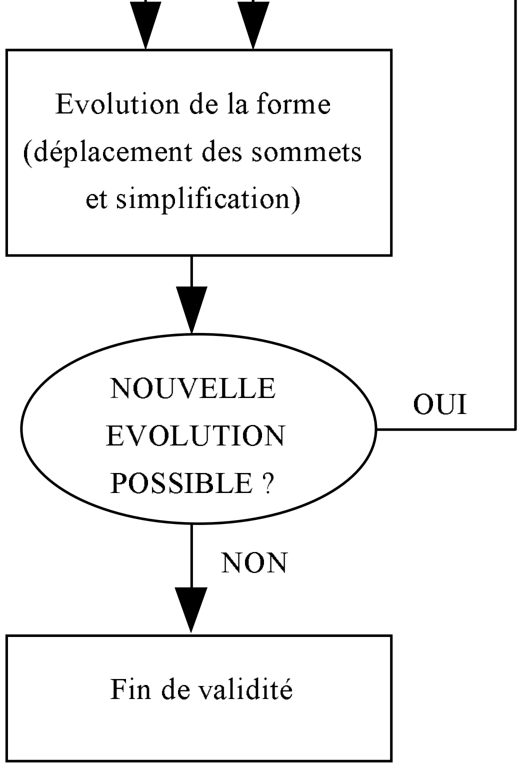


Fig 15 - Détermination de sa durée de validité par un acteur

La phase de simplification de la forme obtenue après le déplacement des sommets (pour rendre la nouvelle forme cohérente) nécessite un parcours coûteux de la structure. La simplification se déroule en trois étapes :

- détection des arêtes où la normale n'est plus cohérente (différence entre la normale calculée et la valeur précédente de la normale, ayant servi à calculer la vitesse de déplacement des points),

- création des intersections entre arêtes (comparaison des arêtes deux à deux et division éventuelle des arêtes),

- suppression des cycles du polygone comportant au moins une arête incohérente. Celle phase permet d'obtenir une forme cohérente pour la représentation des cristaux (surface sans bord).

portion arrondie.

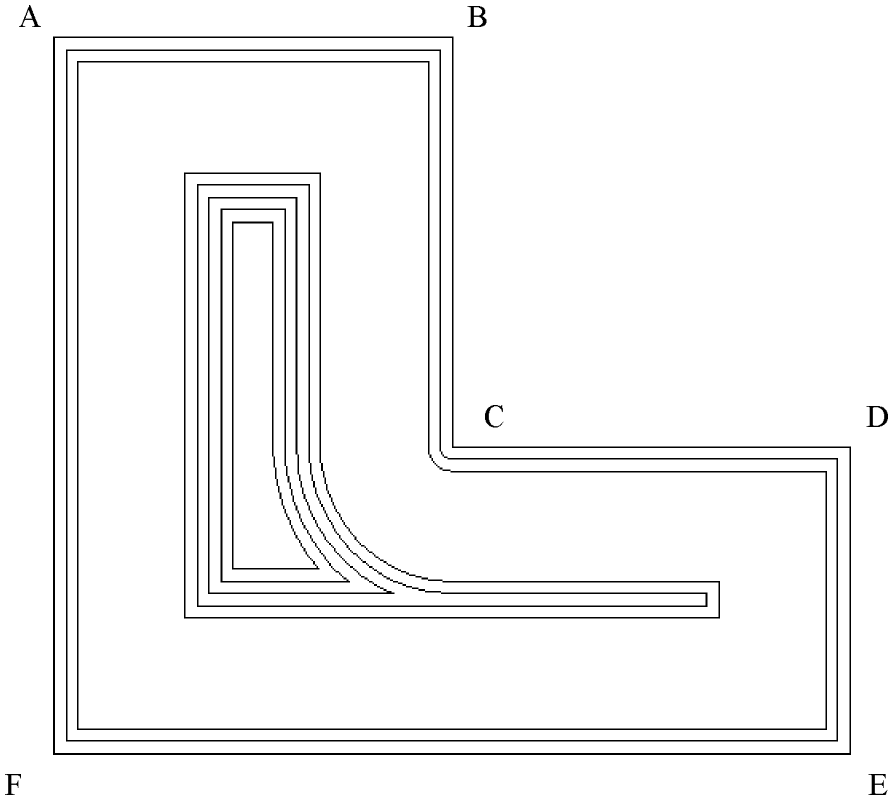


Fig 16 - Simulation de la gravure isotrope d'un cristal comportant un angle rentrant et 5 angles sortants.

La valeur de $\theta_{\max}$ choisie pour cette simulation est $\frac{\pi}{18}$. La division de l'angle rentrant ($\frac{\pi}{2}$) crée donc 9 arêtes sur lesquelles la normale varie par pas de $\frac{\pi}{18}$.

La forme initiale ($t = 0$) et les formes du cristal à $t =$ 1, 2, 11, 12, 13, 14 et 15 sont représentées. Les formes à $t =$ 0, 13, 14 et 15 correspondent à la création d'un acteur :

- à l'instant $t =$ 0, un objet est créé pour représenter la forme initiale du cristal. La première évolution ($t =$ 1) fait apparaître une portion arrondie issue du sommet C. La trajectoire des sommets créés par la division de l'angle en C reste rectiligne jusqu'à l'instant $t =$ 12 compris. La durée de validité de ce premier acteur est donc 12.

Dans le second exemple présenté, la simulation de la gravure sur le cristal conduit à la scission de ce dernier juste après l'instant $t = 5$. A partir de $t = 6$, les deux nouveaux cristaux évoluent de façon indépendante.

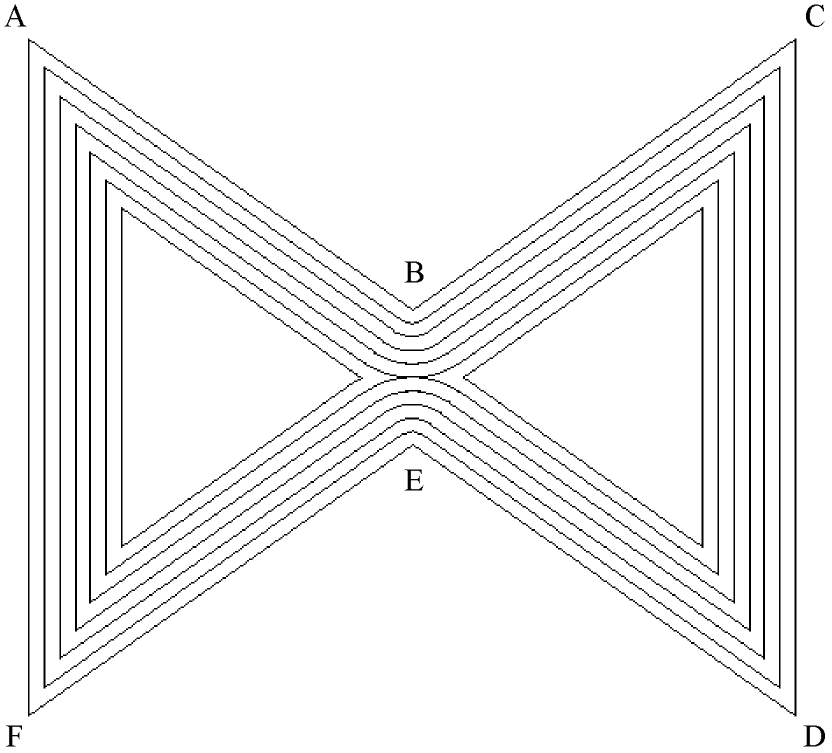


Fig 17 - Simulation de la gravure isotrope d'un cristal aboutissant à une division du cristal.

3.3 - Simulation de la gravure d'un cristal comportant des faces masquées

Pour prévoir l'evolution de la forme d'un cristal au voisinage d'un bord de masque (sommet appartenant à une arête masquée et une arête non masquée), nous avons distingué deux types d'arêtes (masquées ou non masquées) et avons affecté une vitesse nulle aux sommets d'une arête masquée. Nous allons montrer que cette distinction permet de modéliser la surgravure de façon naturelle.

Fig 18 - Forme initiale à $t = 0$ (en trait épais : arête masquée).

- à l'instant $t = 1$, les arêtes non masquées se sont déplacées, tandis que la face masquée est restée inchangée (les sommets ont une vitesse nulle). Les arêtes verticales qui apparaissent maintiennent la cohérence de l'ensemble (surface sans bord).

Fig 19 - Première étape de la gravure ($t = 1$) se traduisant par un déplacement des faces non masquées.

- à l'instant $t = 2$, la présence des arêtes verticales provoque l'apparition d'une portion arrondie et de la première surgravure. La simplification de la forme représenté ici n'est pas terminée : la partie masquée comporte des arêtes pendantes.

Fig 20 - Début de la surgravure et appartion d'arêtes pendantes sur la partie masquée du cristal ($t = 2$).

- la simplification de la forme précédente permet d'obtenir une forme cohérente et de continuer la simulation. On notera que, bien que les sommets de l'arête masquée aient initialement une vitesse nulle, la vitesse apparente de ces sommets ne l'est pas. Cette notion de vitesse apparente permet de continuer la simulation jusqu'à ce que la partie masquée ait entièrement disparu.

Fig 21 - Forme simplifiée ($t = 2$). Les flèches représentent la vitesse apparente des extrémités de l'arête masquée.

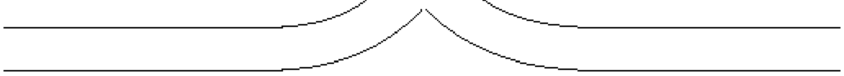


Fig 21 - Résulat de la simulation sur une arête AB masquée (en gris)

Le comportement de la gravure ainsi défini est en accord avec les résultats expérimentaux et avec ceux de la méthode de Wulff-Jaccodine.

4 - Perspectives de simulation de la gravure en dimension 3

Au vu des bons résultats obtenus en dimension 2, il semble naturel de passer à la dimension supérieure. Le fonctionnement général du simulateur décrit précedemment reste applicable en dimension 3. Le passage en dimension 3 fait apparaître deux difficultés :

- le temps de calcul lors de la phase de simplification de la surface (en particulier lors de la recherche des auto-intersections). Malgré de possibles optimisations permettant de ne comparer que des objets ayant une chance de comporter une intersection, cette phase reste la plus lente.

- la division d'un angle solide Θ en angles solides tous égaux et inférieurs à un Θ_{max} donné. Ce problème s'apparente à la recherche d'une distribution homogène de points sur une sphère. Ce dernier problème est bien connu, en particulier dans le domaine du rendu (synthèse d'images).

Ces deux difficultés ne remettent toutefois pas en cause l'applicabilité du modèle proposé.

BUTLER D. M. - PENDLEY M. H. (1989a)

"The visualization management system approach to visualization in scientific computing", *Computers in Physics* vol 3, pp 40-44

BUTLER D. M. - PENDLEY M. H. (1989b)

"A visualization model based on the mathematics of fiber bundles", *Computers in Physics* vol 3, pp 45-51

HABER R. B. - LUCAS B. - COLLINS N. (1991)

"A Data Model for Scientific Visualization with Provisions for Regular and Irregular Grids", *Proceedings of Visualization '91*, pp 298-305

HEWITT C. (1971)

"Description and Theoretical Analysis (usig schemata) of Planner : A language for proving theorems and manipulating models in a robot", PhD Thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1971. Report Number AITR258

HEWITT C. (1973)

"The ACTOR Formalism", *IJCAI Conference 1973*, pp 235-245

Conclusion

Nous avons présenté dans cette thèse deux approches distinctes pour modéliser la gravure chimique des cristaux :

- une approche géométrique permettant d'étendre en dimension 3 le modèle bidimensionnel utilisé jusqu'à présent. Les limitations de la méthode décrite sont de deux ordres : un temps de calcul important et une applicabilité réduite aux cas les plus fréquemment rencontrés dans la pratique.

- une approche théorique, permettant de modéliser la gravure en termes d'évolution de surfaces et de trajectoires. En dimension 2, le modèle proposé est en accord avec les expérimentations et le modèle géométrique évoqué plus haut. Nous avons montré que ce nouveau modèle peut être appliqué au problème le plus général en dimension 3.

Le modèle théorique proposé répond aux besoins de la simulation de la gravure (géométrie initiale du cristal quelconque, masquage de certaines faces). Les résultats de simulations obtenus en dimension 2 permettent d'espérer de bons résultats en dimension 3. Nous donnons dans cette thèse plusieurs indications pour ce passage à la dimension 3.

Tous les modèles étudiés utilisent la vitesse de déplacement des faces du substrat gravé. Ces vitesses ne sont pour l'instant connues que pour un très petit nombre de matériaux et pour des bains d'attaque bien précis (solvant employé et température). Le développement de logiciels de simulation de la gravure exploitables industriellement nécessitera donc une meilleure connaissance de ces vitesses. De plus, plusieurs des problèmes rencontrés lors de l'étude d'un modeleur solide adapté à la modélisation géométrique de la gravure n'ont pas pu être résolus (en particulier les problèmes liés aux incertitudes numériques). Une étude plus approfondie nous aurait entraînés trop loin du cadre de ce travail.

Index des auteurs cités

du temps. La première méthode que nous proposons est une extension en 3D de la construction géométrique due à Wulff et Jaccodine, basée sur l'analyse de résultats expérimentaux. Nous montrons qu'un sommet 3D peut être représenté par une composition de demi-espaces, dont chacun se déplace suivant une vitesse correspondant à son orientation. Nous étudions ensuite les limitations de cette méthode, liées à son implémentation. La seconde méthode que nous proposons s'appuie sur un modèle théorique original. Nous établissons tout d'abord une propriété applicable aux surfaces de classe C1 sur lesquelles la vitesse d'un point ne dépend que de la normale en ce point. Nous montrons ensuite qu'il est possible d'approcher la forme d'un cristal polyédrique par une surface de classe C1 et ainsi de lui appliquer le résultat précédent par passage à la limite. Pour représenter la forme du cristal et la trajectoire des points de sa surface, nous utilisons la notion d'espaces fibrés. Nous présentons enfin une implémentation sous forme d'acteurs de cette méthode en 2D et montrons comment la méthode peut être étendue en 3D.

Mots-clés :

Cristal, Dissolution, Modélisation, Simulation

Abstract :

This thesis presents two approaches to 3D modelization of chemical crystal etching. Given the initial shape of a crystal and its physical properties, we can simulate the evolution of the crystal shape. The first method is a 3D extension of the geometric construction due to Wulff and Jaccodine. It is based on experimental results. We show that a 3D vertex can be depicted by unions or intersections of half-spaces, each of them moving with its own velocity. This velocity only depends on the orientation of the half-space. Our second method is based on a new theoretical model. First, we caracterize C1 surfaces on which the points have a velocity only depending on the normal vector. Then we show that it is possible to approximate the shape of a polyhedral crystal by a C1 surface. To represent the crystal shape and the trajectories of its points, we use the notion of fiber spaces. We finally give an implementation, using actors, of the 2D method and show how it can be extended to 3D.