

JULIEN DOYON

SIMULATION NUMÉRIQUE D'AGRÉGATS FRACTALS EN MILIEU DE MICROGRAVITÉ

Mémoire présenté
à la Faculté des études supérieures de l'Université Laval
dans le cadre du programme de maîtrise en physique
pour l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE, GÉNIE PHYSIQUE ET OPTIQUE
FACULTÉ DES SCIENCES ET DE GÉNIE
UNIVERSITÉ LAVAL
QUÉBEC

2011

© Julien Doyon, 2011

Résumé

Depuis quelques décennies, l'étude de l'agrégation fractale dans divers environnements est de plus en plus importante en raison de son omniprésence dans plusieurs domaines scientifiques. L'intérêt est d'ailleurs marqué dans les sciences de la microgravité où les agrégats montrent des propriétés physiques très intéressantes.

C'est dans cette optique que ce mémoire s'attarde aux simulations informatiques reliées à l'agrégation de particules en microgravité. Tout d'abord, la théorie entourant les fractales ainsi que les simulations numériques concernant l'agrégation a été abordée. La description des algorithmes numériques développés pour le projet est faite et les résultats recueillis à partir de ceux-ci sont exposés. Une rigoureuse analyse est ensuite présentée à partir des agrégats simulés.

Dans cette étude, différents modèles numériques d'agrégation de particules, favorisant une vitesse de simulation relativement élevée, sont décrits. De plus, les différents facteurs influençant l'agrégation de particules y sont analysés. Des explications aux phénomènes physiques sont suggérées et des commentaires sont faits au sujet des algorithmes numériques afin d'optimiser la simulation d'agrégats dans des travaux futurs.

Abstract

For a few decades, studies about fractal aggregation have been a major subject because of its relevance in many science's domain. This interest is particularly seen in the microgravity science where aggregates show some really interesting features in their structure.

This dissertation exposes some of the informatics models about particle aggregation in microgravity. First, theories about fractals and numerical simulations are explained. Then, the complete description of the numerical algorithm is presented and the results that are obtained by them are shown. A meticulous analysis is presented from these results.

In this study, different numerical models about particles aggregation that advantage a fast simulation time are described. Also, the factors influencing the aggregation of particles are analyzed. Explanations about physical phenomena are suggested and commentaries that would help to speed up the simulations are added for future works.

Avant-propos

Tout d'abord, je voudrais remercier mon directeur de recherche, Monsieur R. J. Slobodrian. Je tiens à mentionner que sans lui, l'ensemble de ce projet n'aurait pu être possible. Ses conseils, au cours des dernières années, m'ont beaucoup aidé à avancer. J'ai beaucoup aimé l'autonomie dont j'ai bénéficié pour faire en sorte de bien explorer le travail de recherche et les différentes difficultés que l'on peut affronter.

Je remercie aussi Claude Rioux avec qui j'ai passé des semaines inoubliables à Bordeaux et à Ottawa pour des vols paraboliques. Ce sont des expériences qui seront gravées à jamais dans ma mémoire. De plus, je voudrais remercier ma famille et mes amis qui m'ont encouragé tout au long de mon cheminement en physique ainsi que ma copine avec qui j'ai partagé mes problèmes comme mes réussites dans ce projet. Sans elle, ces dernières années auraient été beaucoup plus fastidieuses et laborieuses.

Enfin, j'aimerais remercier le programme ELIPS de l'Agence Spatiale Européenne pour m'avoir supporté financièrement dans mes recherches et qui m'a permis de me concentrer pleinement sur mon projet de recherche.

Table des matières

Résumé	i
Abstract	ii
Avant-propos	iii
Table des matières	iv
Liste des tableaux	vii
Liste des figures	ix
Introduction	1
1. Éléments de théorie	4
1.1 Fractale	4
1.1.1 Historique	4
1.1.2 Définition	6
1.1.3 Dimension fractale	9
1.1.4 Mesure de la dimension fractale à partir de la méthode de comptage de boîtes	11
1.2 Mouvement brownien	12
1.3 Agrégat fractal	15
1.3.1 Caractéristiques physiques	15
1.3.2 Croissance des amas	16
1.3.2.1 Accélération gravitationnelle	16
1.3.2.2 Forces électriques et magnétiques	17
1.3.2.3 Mouvement brownien	17
1.3.3 Propriétés des agrégats	18
1.3.3.1 Dimension fractale	18

1.3.3.2	Nombre de coordinations	18
1.3.3.3	Rayon de giration	19
1.3.3.4	Porosité	20
1.3.4	Méthodes de calcul	20
1.3.4.1	Méthode des moindres carrées	21
1.3.4.2	Coefficient de détermination	21
1.4	Algorithmes de simulation numérique	22
1.4.1	Agrégation limitée par la diffusion	22
1.4.2	Agrégation amas-amas	25
1.4.3	Agrégation sur réseau et hors réseau	26
1.4.4	Agrégation limitée par réaction	27
1.4.5	Agrégation balistique	28
1.4.6	Agrégation sous l'influence d'un puits de potentiel	28
2.	Methodologie	29
2.1	Historique de la simulation numérique au sein de l'équipe de recherche	29
2.2	Programme de simulation MATLAB®	30
2.3	Simulations numériques	32
2.3.1	Modèle d'agrégation non physique	32
2.3.2	Modèle d'agrégation physique	33
2.3.3	Modèle d'agrégation physique avec mouvement brownien	36
2.3.4	Modèle d'agrégation physique avec puits de potentiel	37
2.3.5	Modèle d'agrégation physique avec charges électriques	38
2.3.6	Accélération de l'algorithme	38
2.3.7	Outils numériques	40
2.3.7.1	Dimension fractale	40
2.3.7.2	Nombre de coordinations	41
2.3.7.3	Rayon de giration et distance moyenne entre une particule et le centre de masse	41
2.3.7.4	Porosité	42
2.3.8	Tests de simulation	42

2.3.8.1 Tests de détection de mur	42
2.3.8.2 Tests de détection entre particules ou agrégats	43
2.3.8.3 Tests visuels avec graphiques	43
2.3.8.4 Tests de conservation d'énergie	43
2.4 Méthodologie dans la récolte de résultats	44
3. Résultats	45
3.1 Observations globales des agrégats	45
3.1.1 Formes et densités des agrégats	45
3.1.2 Croissance des agrégats	46
3.2 Algorithme non physique	47
3.2.1 Observations	47
3.2.2 Influence du libre parcours moyen	48
3.2.3 Influence de la concentration de particules	49
3.2.4 Caractéristiques globales du modèle non physique	50
3.3 Algorithme physique en deux dimensions	51
3.3.1 Dimension fractale	51
3.3.2 Nombre de coordinations	54
3.3.3 Rayon de giration	56
3.3.4 Porosité	58
3.3.5 Temps de simulation	58
3.3.6 Caractéristiques globales du modèle physique en 2 dimensions	59
3.4 Algorithme physique avec probabilité d'agrégation	61
3.4.1 Influence de la probabilité d'agrégation	61
3.4.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec probabilité d'agrégation	62
3.5 Algorithme physique avec mouvement brownien	62
3.5.1 Influence du libre parcours moyen	63
3.5.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec mouvement brownien	65
3.6 Algorithme physique avec puits de potentiel autour de chaque particule	65

3.6.1	Influence du puits de potentiel	66
3.6.2	Caractéristiques globales du modèle physique avec puits de potentiels	67
3.7	Algorithme physique avec particules chargées et attraction seulement	68
3.7.1	Influence de la distribution des charges électriques	68
3.7.2	Caractéristiques globales du modèle physique avec charges électriques	68
3.8	Algorithme physique en trois dimensions	69
3.8.1	Particularité du modèle physique en trois dimensions	69
3.8.2	Caractéristiques globales du modèle physique en trois dimensions	71
	Conclusion	72
	Références	75

Liste des tableaux

Tableau 3.1 Résultats portant sur l'influence du libre parcours moyen

Tableau 3.2 Résultats portant sur l'influence de la dimension de l'enceinte

Tableau 3.3 Dimension fractale en fonction de la dimension de l'enceinte

Tableau 3.4 Nombre de coordinations en fonction de la dimension de l'enceinte

Tableau 3.5 Rayons de giration en fonction de la dimension de l'enceinte

Tableau 3.6 Porosités en fonction de la dimension de l'enceinte

Tableau 3.7 Nombre de coordinations en fonction de la probabilité d'agrégation

Tableau 3.8 Résultats en fonction de la probabilité de changement de direction

Tableau 3.9 Rayons de giration en fonction de la probabilité de changement de direction

Tableau 3.10 Résultats portant sur l'influence de la force du puits de potentiel

Liste des figures

Figure 1.1 Tapis de Sierpinski

Figure 1.2 Courbe de Lévy

Figure 1.3 Ensemble de Mandelbrot réalisé à l'ordinateur

Figure 1.4 Triangle de Sierpinski

Figure 1.5 Les 5 premières itérations dans la construction du triangle de Sierpinski

Figure 1.6 Courbe de von Koch

Figure 1.7 Détermination de la dimension d'un objet

Figure 1.8 Dimension d'objet à partir de N parties similaires

Figure 1.9 Agrégats couverts de carré de différentes dimensions

Figure 1.10 Graphique du logarithme du nombre de boîtes en fonction du logarithme de la dimension des boîtes

Figure 1.11 Mouvement brownien d'une particule

Figure 1.12 Petites particules frappant la grosse particule

Figure 1.13 Dendrites et fjords d'un agrégat

Figure 1.14 Particules maximums pouvant être reliées à une particule

Figure 1.15 Structure du thiocyanate de potassium tirée de la cristallographie

Figure 1.16 Exemple de ratio de vide (0,111)

Figure 1.17 Particule se déplaçant de manière brownienne dans une simulation par agrégation limitée par la diffusion

Figure 1.18 Agrégat obtenu par agrégation limitée par la diffusion

- Figure 1.19 Agrégation limitée par la diffusion sur une paroi
- Figure 1.20 Agrégation amas-amas en cours
- Figure 1.21 Agrégat final produit par agrégation amas-amas
- Figure 1.22 Agrégat sur réseau
- Figure 1.23 Agrégat hors réseau
- Figure 2.1 Interface de MATLAB
- Figure 2.2 Particules et agrégats numérotés
- Figure 2.3 Distribution aléatoire de particules dans une enceinte
- Figure 2.4 Temps de détection de particule (t_1), temps après une itération sans collision (t_2) et temps de collision avec le mur (t_3)
- Figure 2.5 Particules et agrégats à l'intérieur de cellules
- Figure 2.6 Deux particules étant en contact avec la particule centrale représentant le nombre de coordinations
- Figure 3.1 Différents agrégats de 150 particules provenant d'une agrégation amas-amas
- Figure 3.2 Évolution d'une distribution de particules dans une enceinte
- Figure 3.3 Agrégat de 25 000 particules simulé à partir de l'algorithme non physique
- Figure 3.4 Agrégat avec un libre parcours moyen court
- Figure 3.5 Agrégat avec un libre parcours moyen long
- Figure 3.6 Graphique de la dimension fractale en fonction du nombre de particules
- Figure 3.7 Graphiques de la dimension fractale en fonction du nombre de particules a) Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600
- Figure 3.8 Graphique du nombre de coordinations en fonction du nombre de particules

Figure 3.9 Graphiques du nombre de coordinations en fonction du nombre de particules
a) Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600

Figure 3.10 Graphique du rayon de giration en fonction du nombre de particules

Figure 3.11 Graphiques du rayon de giration en fonction du nombre de particules a)
Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600

Figure 3.12 Graphique du temps de simulation en fonction du nombre de particules

Figure 3.13 Erreur de simulation provoquant un chevauchement de particules

Figure 3.14 Graphique du rayon de giration en fonction de la probabilité de changement
de direction

Figure 3.15 Agrégat en fonction du libre parcours moyen a) Libre parcours moyen long
b) Libre parcours moyen court

Figure 3.16 Agrégats simulés avec puits de potentiel a) Force du puits de potentiel faible
b) Force du puits de potentiel élevée

Introduction

Au cours du dernier siècle, beaucoup d'avancements ont eu lieu dans le domaine de l'agrégation fractale que ce soit les modèles informatiques ou les expériences effectuées. Cet engouement autour de ce sujet se traduit tout d'abord par son omniprésence, que ce soit à l'échelle du gigaparsec avec les galaxies et les amas de galaxies [1-2] ou bien à l'échelle du micromètre avec l'agrégation de particules [7] en passant par tous les ordres de grandeur (aérosol, formation des planètes, flocon de neige, etc.).

Un intérêt est d'ailleurs marqué dans le domaine de la formation planétaire [3-4] alors que la naissance des protoplanètes n'est pas définie avec une grande exactitude. À ce stade de formation, l'agrégation de particules est très présente et l'environnement permettant l'évolution d'une planète est très étudié. La compréhension de ces phénomènes est donc très utile, cependant ces phénomènes ne sont étudiés que depuis quelques décennies. De plus, la physique de l'état solide s'intéresse à ce nouvel état de la matière qu'est la matière fractale. En effet, la grande surface d'un agrégat fractal par rapport à son volume lui confère des propriétés intéressantes du point de vue de la conductivité thermique ou électrique [15], de même que l'absorption de gaz.

Tout d'abord, les premières expériences, qui ont mis en évidence la nature fractale des agrégats de particules, ont été réalisées par S.R. Forrest et T.A. Witten Jr, aux États-Unis à la fin des années soixante-dix [29]. Ces derniers ont conçu des expériences d'évaporation-condensation dans un gaz neutre et ont réussi à photographier les agrégats obtenus à l'aide de microscope électronique. Leur analyse a permis de démontrer la nature fractale des résultats recueillis.

Alors que l'ordinateur fait son apparition de façon plus marquée au cours des années 80, des algorithmes informatiques sont réalisés afin de pouvoir simuler ces agrégations

dans divers contextes. Dans le domaine de l'agrégation fractale, Witten et Sander sont parmi les premiers à se lancer dans la réalisation de codes qui serviront de base dans ce domaine notamment avec leur simulation sur l'agrégation limitée par la diffusion [19].

Quelques années plus tard, Paul Meakin améliore les modèles déjà existants avec un algorithme d'agrégation amas-amas qui se rapproche grandement des expériences effectuées en laboratoire [16-17]. Beaucoup de ses résultats serviront de base dans le futur pour les expériences de simulation numérique.

Au début des années 90, R.J. Slobodrian mène une équipe de recherche qui s'intéresse à l'agrégation fractale. Des expériences en état d'apesanteur à bord d'avions ainsi que des expériences au sol par évaporation-condensation ont été menées dans le but d'étudier ces phénomènes d'agrégation en présence de microgravité [11-21-22-23]. Or, ces expériences sont limitées en raison du champ de gravitation qu'exerce la Terre. En effet, la gravité exercée sur les agrégats fait effondrer ceux-ci sur eux-mêmes ce qui limite la taille des agrégats produits [9]. C'est pourquoi la recherche de temps d'apesanteur très élevé est souhaitée. C'est ainsi que plusieurs projets à bord de la station spatiale sont planifiés.

Alors que le projet ICAPS est sur le point d'être lancé à bord de la station spatiale et que les meilleurs résultats jamais obtenus sur Terre pourront être disponibles, il est très pertinent d'avoir des simulations numériques pour appuyer les théories par rapport à l'agrégation et à la formation des planètes. Les agrégats construits numériquement pourront ainsi être comparés avec ceux en microgravité pour ainsi solidifier les bases théoriques. C'est dans cette optique que ce mémoire traite de la simulation numérique d'agrégat fractal dans un milieu de faible gravité. Plusieurs buts ont été recherchés pendant ces travaux :

- Créer des agrégats fractals dans un environnement de microgravité à l'aide de modèle numérique physique et être en mesure de faire varier tous les paramètres qui pourraient entrer en jeu.
- Obtenir des algorithmes de simulation permettant une vitesse de calcul optimale dans le but de créer des agrégats contenant des milliers de particules.

- Effectuer une analyse rigoureuse afin d'avoir la description la plus complète possible de la forme de ces agrégats.

Dans ce mémoire, je discuterai tout d'abord d'éléments de théorie essentiels à la compréhension du projet. Les diverses simulations numériques réalisées antérieurement, la notion de fractale ainsi que les principales caractéristiques physiques d'agrégats fractals y sont exposées. Par la suite, la méthodologie sera abordée en explorant les différents algorithmes physiques conçus et utilisés afin d'obtenir des résultats au cours des deux dernières années. Les résultats d'agrégats fractals obtenus ainsi que l'analyse de ces derniers selon divers paramètres physiques seront discutés dans le but de tirer des conclusions.

Chapitre 1

Éléments de théorie

Dans ce premier chapitre, la théorie permettant de bien saisir le sujet de recherche sera exposée. Tout d'abord, le concept théorique de fractal sera discuté. Cette notion est très importante dans le domaine de l'agrégation étant donné que la principale particularité d'un agrégat est sa nature fractale. Le mouvement brownien y est également discuté sommairement en raison de son importance au sein du mouvement des particules. Par la suite, un sous-chapitre traite des caractéristiques physiques et mesurables des agrégats ainsi que des forces en présence lors d'agrégation de monomères. Enfin, l'historique et le fonctionnement des premiers algorithmes de simulation seront abordés montrant, en premier lieu, tous les progrès réalisés au cours des dernières années et, en second lieu, révélant la base des algorithmes qui seront utilisés au cours de ce projet.

1.1 Fractale

1.1.1 Historique

Pendant des milliers d'années, les connaissances mathématiques au sujet des objets fractals étaient pratiquement nulles. À l'époque des Grecs, les seules formes qui étaient étudiées étaient le cercle, le carré, le triangle, etc. Toutes les autres formes n'étaient pas considérées, car ils étaient de natures asymétriques et dites imparfaites. Ce n'est qu'au 17e siècle qu'on commence à étudier les fractales par l'entremise de Gottfried Leibniz qui

s'attarda particulièrement au concept de réciprocity et d'autosimilarité, mais sans approfondir davantage le sujet. Plusieurs autres mathématiciens s'intéressèrent aux fractales au début du siècle dernier. Parmi ces mathématiciens, on retrouve Weierstrass, Koch, Sierpinski, Lévy, Cantor, etc. [33]. Ceux-ci furent les premiers à mettre en évidence des fonctions continues, qui ne sont différentiables en aucun point, et à présenter les propriétés de figures fractales qu'ils avaient inventées (fig.1.1 et 1.2).

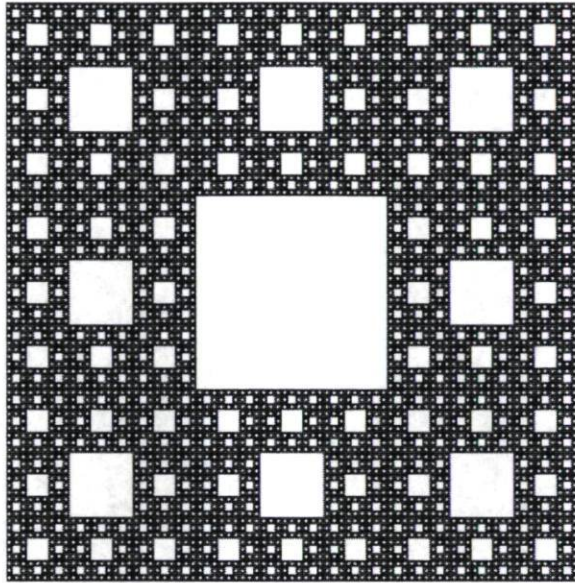


Figure 1.1 Tapis de Sierpinski

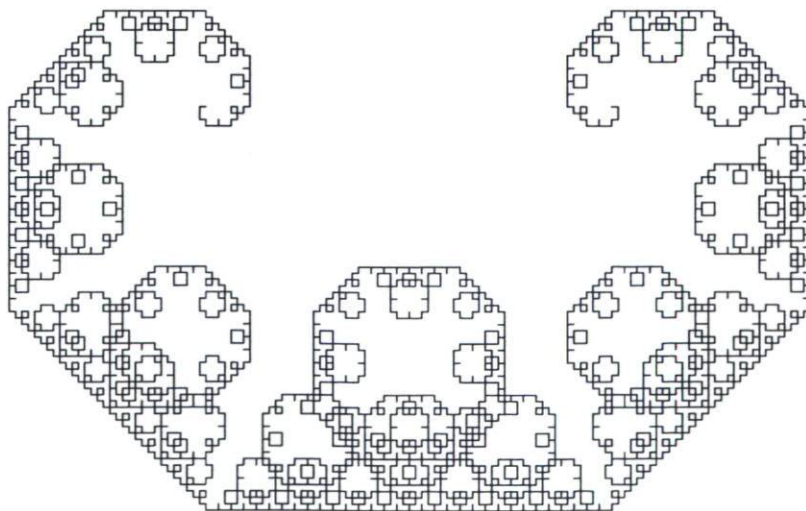


Figure 1.2 Courbe de Lévy

Ce n'est qu'en 1975 que le terme « fractale » fut inventé par Benoît Mandelbrot, expression venant de la racine latine « fractus » et signifiant brisé ou irrégulier [20]. Mandelbrot définit la notion de fractale comme étant tout objet ayant une dimension Hausdorff-Besicovitch plus élevée que sa dimension topologique. Il fut l'un des premiers à étudier les fractales dans une vision d'ensemble et non un seul modèle en particulier comme ses prédécesseurs. Il réussit à assembler tous les résultats et à l'expliquer dans son livre *The Fractals Geometry of Nature* qui servit de fondement pour des années à venir.

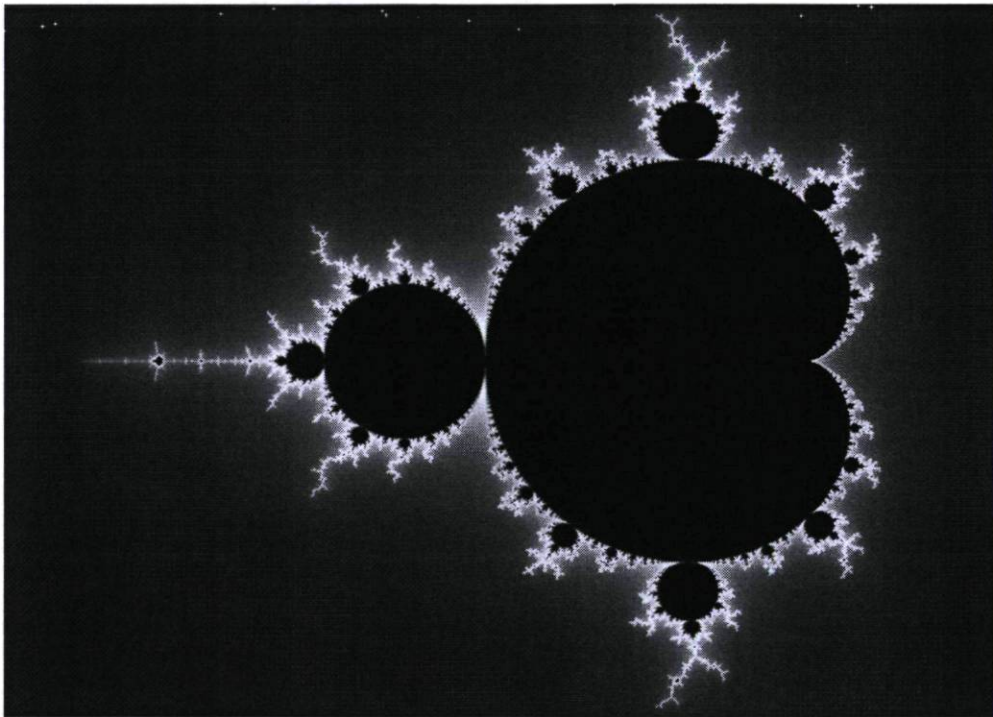


Figure 1.3 Ensemble de Mandelbrot réalisé à l'ordinateur

1.1.2 Définition

Bien qu'il existe des milliers de formes ou d'objets de nature fractale, la caractéristique qu'ils ont en commun est l'auto-affinité. Cela signifie que peu importe l'échelle de grandeur avec laquelle on observe ces objets, ceux-ci auront une allure ou une forme semblable, du moins, d'un point de vue statistique. De la même manière, si une partie d'un objet fractal est brisée, alors cette dernière sera aussi autosimilaire à toutes les échelles de grandeur [6]. De plus, une des caractéristiques fondamentales des objets fractals

est d'avoir une dimension qui est non entière. Cette propriété sera d'ailleurs étudiée plus profondément dans le sous-chapitre suivant.

D'un point de vue théorique, il existe deux types de fractales soit les fractales déterministes et les fractales non déterministes (ou aléatoire) [22-23]. Tout d'abord, les fractales déterministes sont construites à partir d'une forme quelconque, et celle-ci est répétée et reproduite par récurrence à des échelles plus petites ou plus grandes. Après plusieurs itérations, il est possible d'observer cette nouvelle figure qui possède une invariance d'échelle et de regarder sa forme initiale à plusieurs niveaux.

Comme son nom l'indique, l'objet fractal obtenu est déterministe, car, tant et aussi longtemps que les itérations seront faites de la même façon, les formes fractales créées seront prédictibles. Pour clarifier les propos précédents, prenons comme exemple le triangle de Sierpinski qui est l'une des formes fractales déterministes les plus connues (fig 1.4).

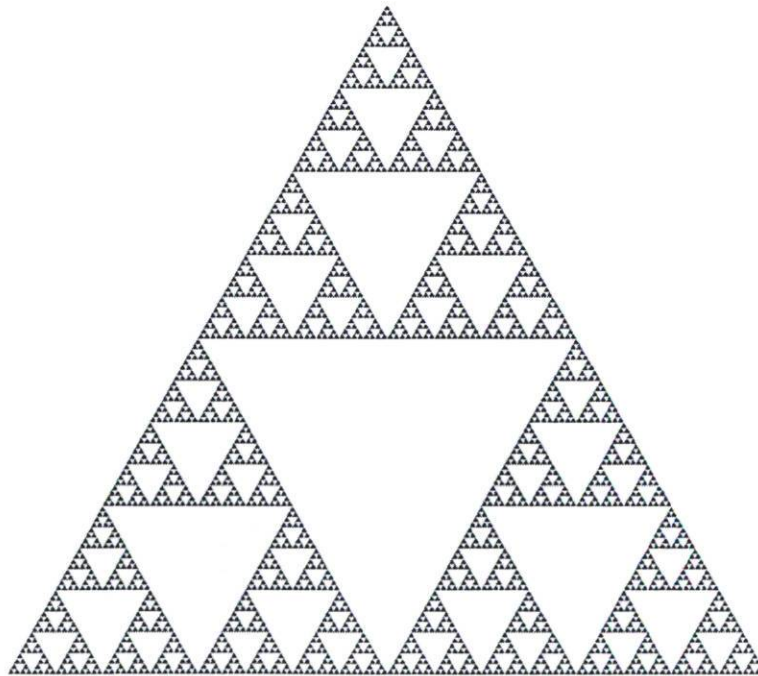


Figure 1.4 Triangle de Sierpinski

Un triangle est d'abord posé. Une première itération est alors effectuée en y ajoutant un autre triangle à l'intérieur du triangle initial, à partir de segments tracés à même les points milieux de chaque côté du triangle initial. Par la suite, une deuxième itération est effectuée

à l'intérieur de chaque triangle créé lors de l'itération précédente selon le même procédé. La routine se poursuit pour une infinité d'itérations. L'objet résultant sera donc autosimilaire et de nature fractale. Il sera toujours obtenu sous la même forme lorsque les étapes précédentes sont effectuées (fig. 1.5).



Figure 1.5 Les 5 premières itérations dans la construction du triangle de Sierpinski

Ensuite, les fractales aléatoires sont également produites par itération, mais cette fois-ci, comme son nom l'indique, un facteur aléatoire est introduit. C'est le cas notamment pour des courbes fractales telles que la courbe de von Koch (fig. 1.6). Celle-ci peut être à la fois une fractale déterministe, comme montrée sur la figure, et à la fois une courbe aléatoire.

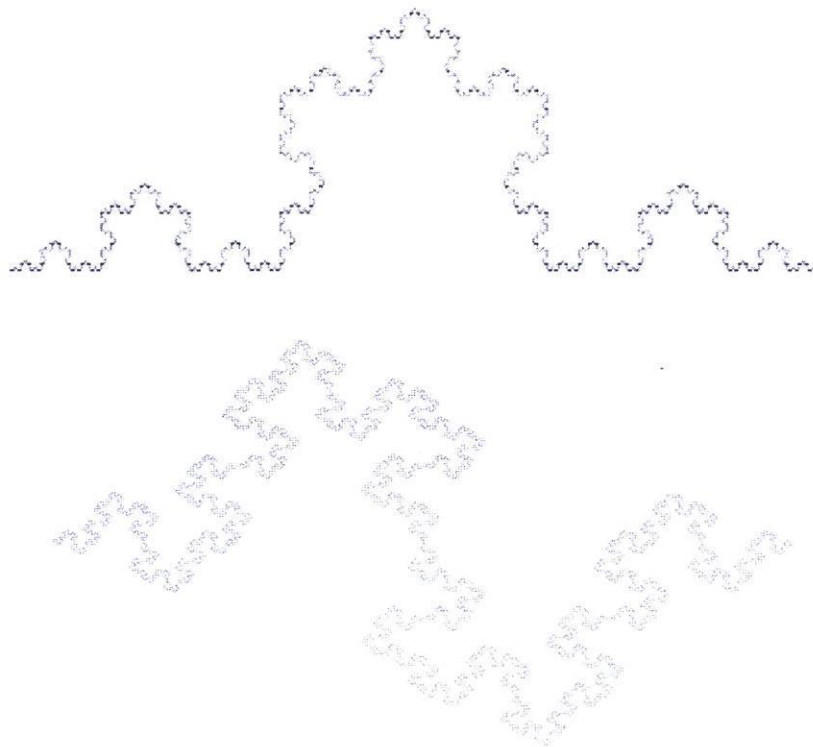


Figure 1.6 Courbes de von Koch déterministe et aléatoire

Dans le premier cas, les segments sont toujours ajoutés au-dessus du segment initial, mais dans le deuxième cas, il y a une probabilité que les segments soient au-dessus ou en dessous du segment initial. Dans une fractale aléatoire, l'objet final obtenu ne sera jamais le même et ne sera pas autosimilaire sur plusieurs ordres de grandeur. Par contre, ce dernier conservera son auto-affinité, statistiquement, sous les différentes échelles de grandeurs.

1.1.3 Dimension fractale

Dans un espace euclidien, la notion de dimension est appliquée en termes de nombre de degrés de liberté, c'est-à-dire le nombre de directions indépendantes nécessaire pour positionner un point dans l'espace. En effet, pour des formes très simples, il est facile de déterminer la dimension d'un objet comme dans la figure 1.7 :

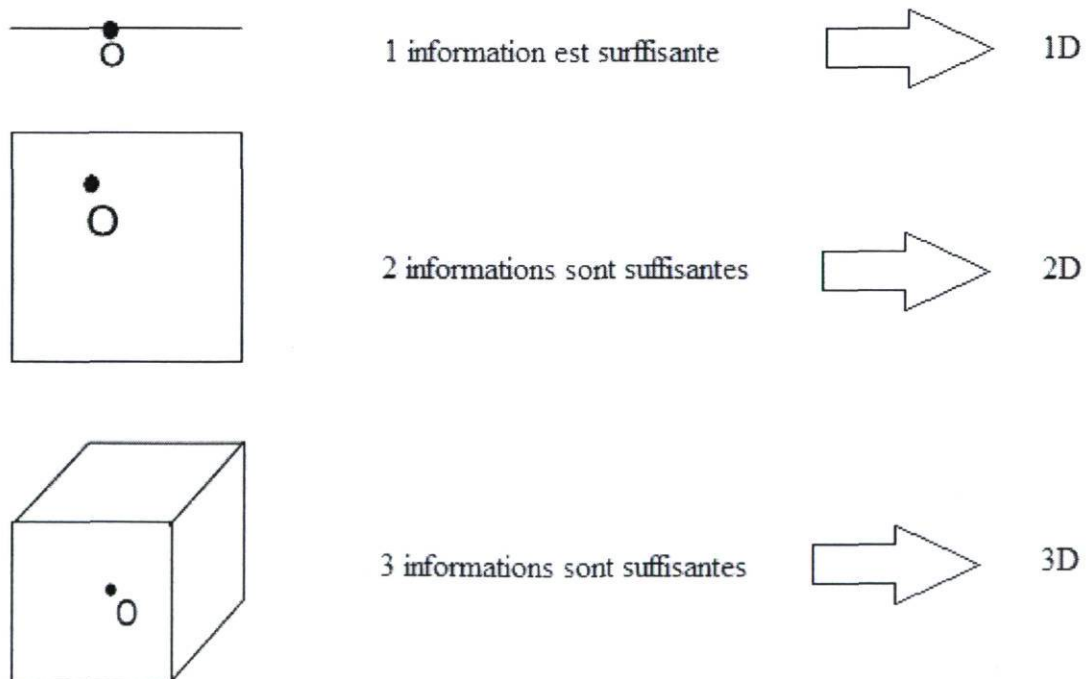


Figure 1.7 Détermination de la dimension d'un objet

Pour des objets autosimilaires et non aléatoires, il existe un moyen d'étudier la dimension de ces objets à partir de N parties similaires et un facteur de dilatation s :

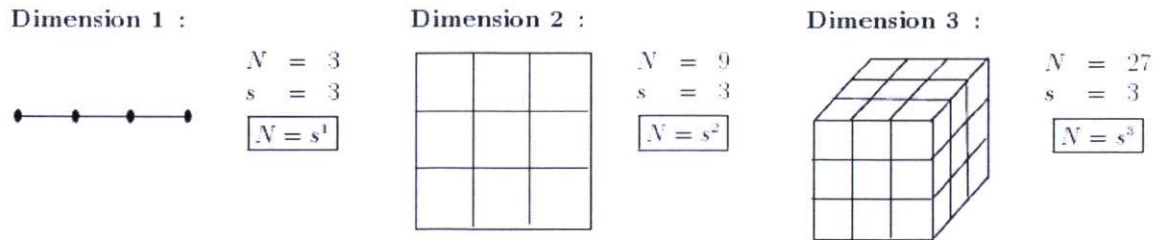


Figure 1.8 Dimension d'objet à partir de N parties similaires

On peut alors observer la corrélation suivante :

$$N = s^d \quad \text{Où } d \text{ est la dimension de l'objet.} \quad (1.1)$$

L'équation précédente peut donc être réécrite sous la forme suivante :

$$d = \frac{\log N}{\log s} \quad (1.2)$$

Cette équation nous donne donc une équation de dimension de similitude ou de dimension fractale dans le cas de structure fractale déterministe. Pour ce qui est des objets fractals aléatoires, des méthodes de calcul de dimension fractale ont été inventées comme la méthode par comptage de boîtes (box-counting en anglais) ou la méthode de rayon de giration. Dans le sous-chapitre suivant, la méthode de comptage de boîtes sera explicitée, car c'est celle-ci qui a été utilisée tout au long de ce projet.

1.1.4 Mesure de la dimension fractale à partir de la méthode de comptage de boîtes

Parmi les méthodes les plus efficaces pour calculer la dimension fractale d'un objet, la méthode par comptage de boîte est de loin la plus utilisée [6]. Cette méthode a l'avantage d'être simple, mais aussi d'être très rapide en donnant une valeur de dimension fractale relativement bonne. Le principe consiste à couvrir l'objet étudié avec une multitude de boîtes (ou de carré en deux dimensions) de même dimension et de compter le nombre de boîtes qui sont en contact avec la fractale (fig. 1.9). Ce nombre est gardé en mémoire avec la grandeur de la boîte utilisée.

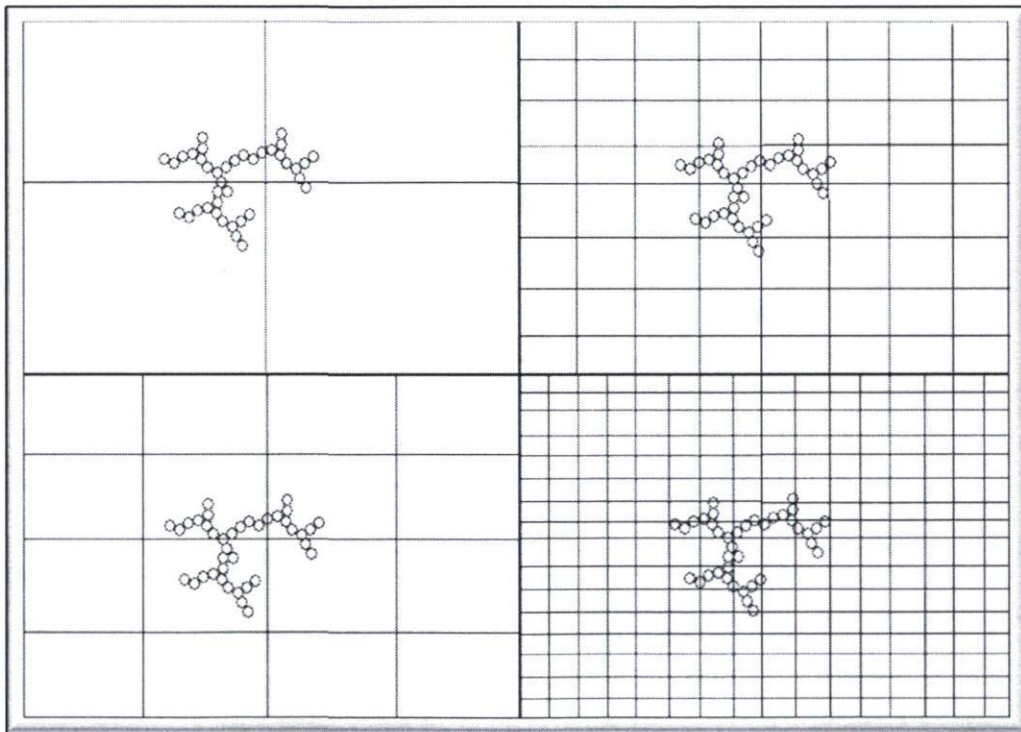


Figure 1.9 Agrégats couverts de carré de différentes dimensions

Par la suite, de nouvelles grilles avec des boîtes de différentes grandeurs sont utilisées et les mêmes opérations se déroulent. De cette manière, il est possible de tracer un graphique du logarithme du nombre de boîtes occupées en fonction du logarithme de la dimension linéaire de ces mêmes boîtes (fig.1.10). La dimension fractale est donc obtenue en calculant la pente de ce graphique. Cette méthode nous ramène donc à l'équation (1.2) qui avait été déterminée dans la sous-section précédente.

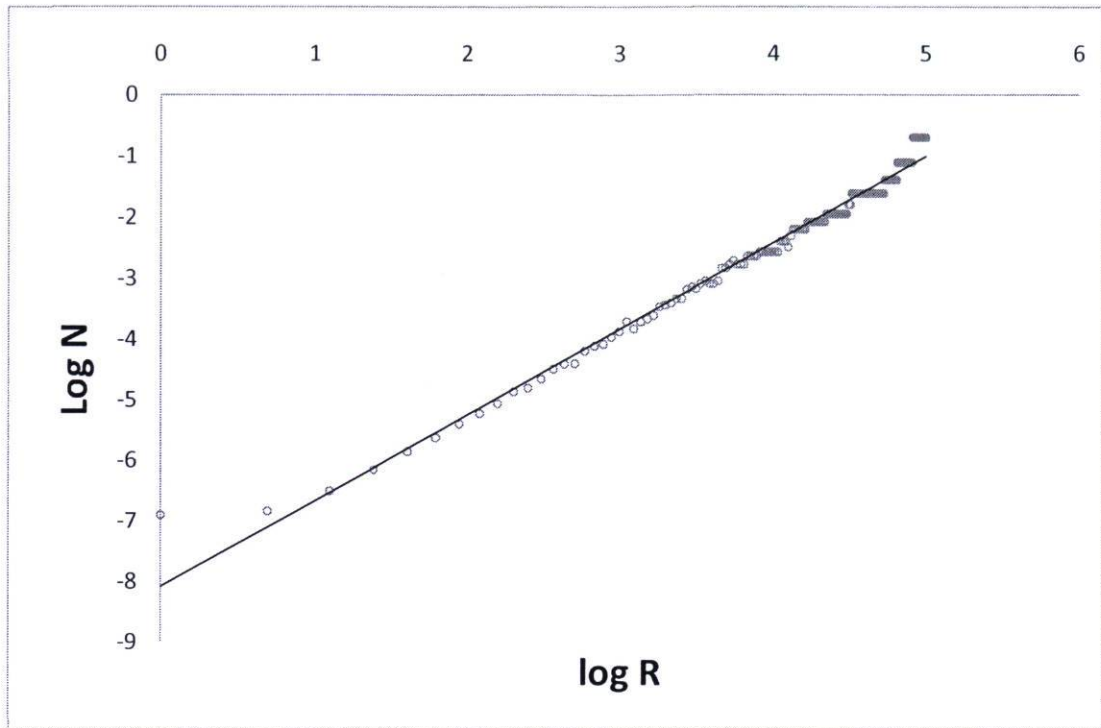


Figure 1.10 Graphique du logarithme du nombre de boîtes en fonction du logarithme de la dimension des boîtes

Néanmoins, cette méthode permet d'obtenir seulement une approximation, car la valeur de la pente obtenue est la meilleure droite passant par tous les points. De ce fait, la valeur calculée ne sera pas une valeur absolue et aura une certaine incertitude. Cependant, celle-ci demeure une valeur plutôt fiable.

1.2 Mouvement brownien

En 1827, le botaniste Robert Brown observa, avec son microscope, une particule de pollen qui nageait et qui effectuait un mouvement très particulier (fig. 1.11). Cette particule se déplaçait de façon complètement aléatoire et dans toutes les directions [28].

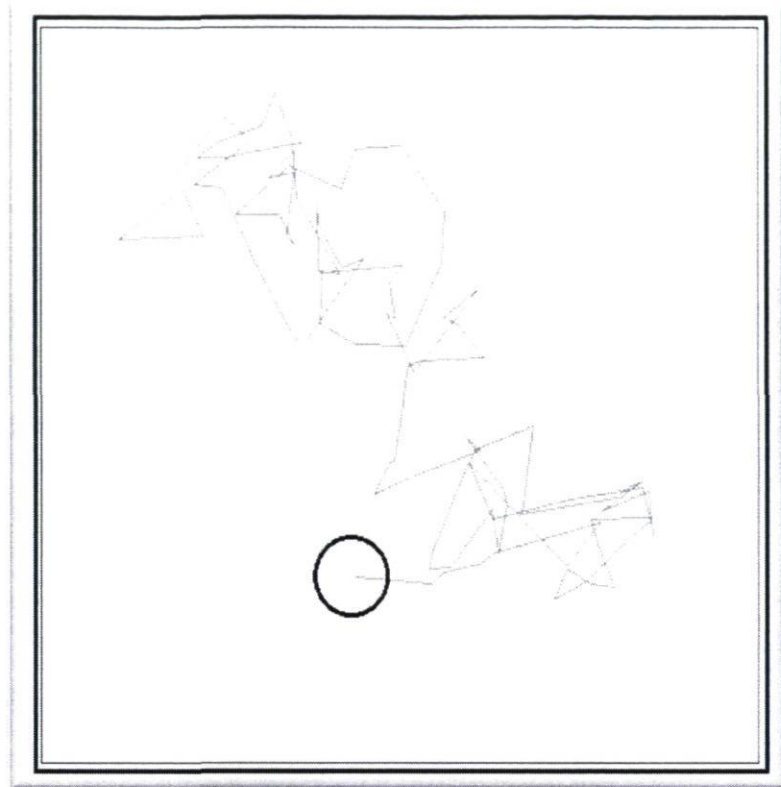


Figure 1.11 Mouvement brownien d'une particule

Ce mouvement très singulier, qui porte aujourd'hui le nom de ce botaniste, est le mouvement brownien et n'a pu être expliqué qu'un siècle plus tard par Albert Einstein. Celui-ci réussit à expliquer les mathématiques derrière le mouvement brownien, mais aussi à prouver indirectement la présence d'atomes et de molécules. Marian Smoluchowski réussit indépendamment à arriver aux mêmes solutions qu'Einstein en 1906.

Concrètement, le mouvement brownien peut être expliqué par la somme résultante des collisions exercées par de très petites et très nombreuses particules sur une grosse particule qui se traduit par un mouvement dans une direction quelconque. Ces petites particules forment le milieu dans lequel la grosse particule est submergée et c'est ces interactions qui induisent le mouvement très irrégulier de la grosse particule.

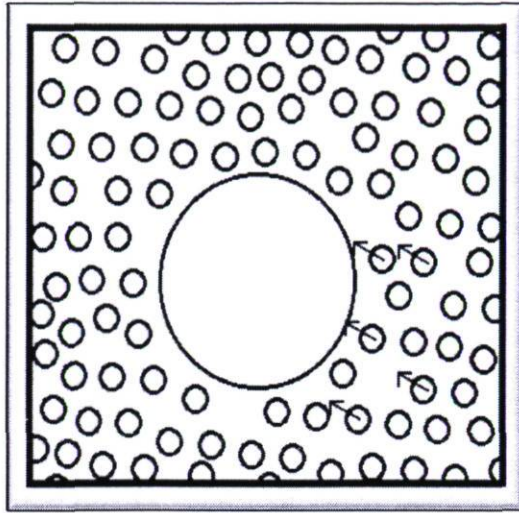


Figure 1.12 Petites particules frappant la grosse particule

Théoriquement, le mouvement brownien est un processus stochastique et est difficilement modélisable à cause de son caractère aléatoire. Pour définir le mouvement, une moyenne quadratique sur les positions de la particule à chaque instant t est calculée et elle est donnée par l'équation suivante :

$$\langle X^2(t) \rangle = \frac{1}{t} \int_0^t x^2(\tau) d\tau \quad (1.3)$$

Le mouvement quadratique moyen peut aussi être obtenu à partir des calculs d'Einstein comme suit :

$$\langle X^2(t) \rangle = 2dDt \quad (1.4)$$

où d est la dimension, D est le coefficient de diffusion et t est le temps écoulé entre la position de départ et celle finale.

En pratique, le déplacement des particules, provoqué par le mouvement brownien, peut être caractérisé par la moyenne d'une variable appelée libre parcours moyen. Ce dernier est observé expérimentalement et dépend directement de la pression de gaz présente à l'intérieur de l'enceinte où évoluent les particules. Le libre parcours moyen peut être défini comme :

$$l = \frac{1}{n\sigma} \quad (1.5)$$

où l est le libre parcours moyen, n la concentration de particules et σ la section efficace des particules.

1.3 Agrégat fractal

1.3.1 Caractéristiques physiques

Pendant la lecture de ce mémoire, le terme *agrégat* apparaîtra à plusieurs reprises. La définition propre utilisée est l'agglomérat de particules au sein d'un même amas où chaque particule est reliée aux autres par une force quelconque. Dans le cas qui nous concerne, ces agrégats sont fractals en raison de la méthode de croissance que nous utilisons, c'est-à-dire des agrégats formés par diffusion ou par agrégation amas-amas.

Les agrégats réalisés ont tous des caractéristiques physiques semblables soit des dendrites et des fjords [23]. Les dendrites sont en quelque sorte les bras des agrégats où celles-ci s'étendent dans toutes les directions à la manière des branches dans un arbre. Les fjords sont quant à eux les creux que l'on retrouve entre ces dendrites qui peuvent varier en grosseur en fonction des paramètres physiques implémentés au départ (fig. 1.13).

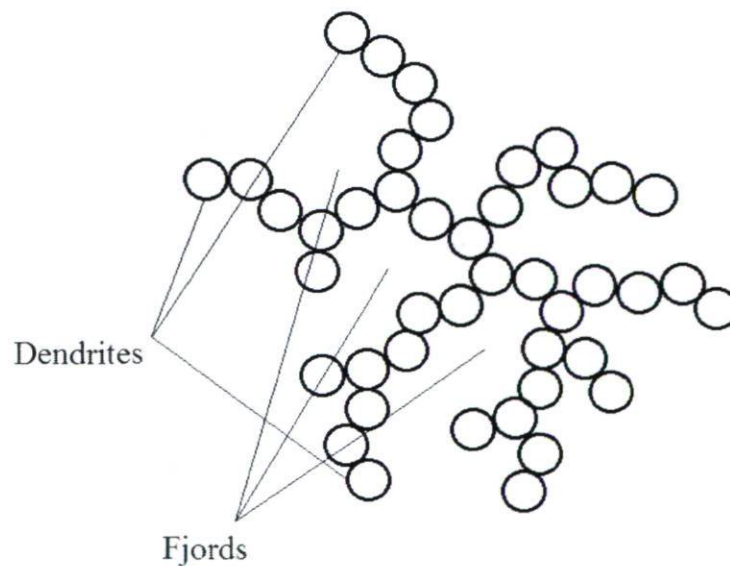


Figure 1.13 Dendrites et fjords d'un agrégat

Aussi, au sein d'un agrégat, il est observé qu'il existe deux types de zone soit la zone active et la zone morte. Dans la première, il s'agit de toute la surface aux extrémités des dendrites où les particules ont des chances très élevées de s'agréger à l'amas. La zone morte est quant à elle la zone située le plus à l'intérieur de l'agrégat où les particules ne pourront plus se rendre, ceci en raison du fait qu'il y a beaucoup plus de chance que les particules s'agrègent aux dendrites extérieures et non à l'intérieur des fjords.

Dans le cadre du projet de recherche de notre groupe, les agrégats formés ont une grosseur de la taille du micromètre où chacune des particules a un rayon de quelques micromètres seulement.

1.3.2 Croissance des amas

Les agrégats en formation évoluent en fonction de l'environnement dans lequel ils se retrouvent en particulier à cause de la physique entourant les agrégations [14]. Plusieurs facteurs nuiront ou aideront à la croissance des agrégats et ceux-ci seront détaillés au cours des sous-sections suivantes.

1.3.2.1 Accélération gravitationnelle

Tout d'abord, le niveau de gravité dans lequel les particules se déplacent a un impact sur la forme finale des agrégats. En présence d'un champ gravitationnel fort, les agrégats ont tendance à s'effondrer sur eux-mêmes limitant ainsi la grosseur des agrégats produits [23]. De façon concrète, des amas de rayons R_1 et R_2 , avec des accélérations gravitationnelles G_1 et G_2 , suivront la loi de Stokes selon :

$$R_1 * G_1 = R_2 * G_2 \quad (1.6)$$

Lorsque l'on pose la valeur terrestre (G_{Terre}) et une valeur d'accélération gravitationnelle qui se retrouvent en microgravité ($10^{-6} G_{\text{Terre}}$), on obtient une valeur de rayon en microgravité de :

$$R_{\text{microgravité}} = 10^6 R_{\text{Terre}} \quad (1.7)$$

Donc, pour des agrégats d'une taille de 100 μm sur Terre, on produirait des agrégats de 100 mètres en microgravité! C'est pourquoi plusieurs simulations numériques ont été effectuées par le passé en variant les accélérations gravitationnelles de manière à pouvoir étudier ce phénomène sur les amas.

1.3.2.2 Forces électriques et magnétiques

Au sein d'une distribution de particules, celles-ci peuvent posséder chacune des charges positives ou négatives amenant ainsi les agrégats à évoluer en fonction des forces électriques en présence [11-25-26]. Plusieurs particules possèdent aussi des propriétés ferromagnétiques qui produisent des effets magnétiques non négligeables, notamment les particules de fer, de cobalt et de nickel. La force magnétique présente a pour effet d'aligner les particules selon leurs dipôles respectifs pour ainsi donner des agrégats qui ressemblent plus à des chainettes. Les propriétés électriques et magnétiques des particules auraient été très présentes lors de la formation des planètes d'où l'intérêt des expériences et des simulations dans ce domaine.

1.3.2.3 Mouvement brownien

À l'échelle nanométrique et micrométrique, les particules peuvent être soumises à un mouvement brownien avec un libre parcours moyen différent en fonction des paramètres environnementaux. Ce mouvement brownien influence grandement la croissance des agrégats et la distribution des monomères dans l'amas final. Notamment, lorsque le libre

parcours moyen est très petit, la densité de particules est plus faible dans la structure de l'agrégat [18].

1.3.3 Propriétés des agrégats

Différentes propriétés physiques peuvent être observées au sein des agrégats, ce qui permet de comparer ces agrégats entre eux et de relever des similitudes ou des différences en fonction des paramètres introduits dans les simulations. À cause des formes fractales rencontrées et difficiles à caractériser, divers outils peuvent être utilisés afin de décrire la configuration physique des agrégats rencontrés. Cette sous-section fait l'inventaire de ces différentes caractéristiques qui peuvent être calculées pour ainsi mieux étudier les agrégats formés.

1.3.3.1 Dimension fractale

L'une des caractéristiques les plus étudiées à propos des agrégats est la dimension fractale, celle-ci étant très explicite quant à la représentation de l'agrégat ainsi formé et nous donne une meilleure idée sur la distribution de la matière au sein de l'amas. Cette valeur ne suffit pas à décrire les caractéristiques topologiques d'un agrégat, mais demeure un outil indispensable quant à la densité de matière dans un amas. Cette propriété est calculée à partir de la technique de comptage de boîtes expliquée précédemment.

1.3.3.2 Nombre de coordinations

Au cours de la croissance des amas de particules, les monomères offrent une certaine surface de contact où peuvent avoir lieu une collision et donc un lien entre les particules. Le nombre de coordinations est le nombre de liens qu'une particule a avec d'autres particules. Évidemment, le nombre de monomères qui peuvent être liés à une seule particule est limité en raison d'une surface de contact limitée aussi. Dans un contexte de

monomères sphériques de même rayon, le nombre maximal de particules lié à une seule particule est théoriquement de six (en deux dimensions).

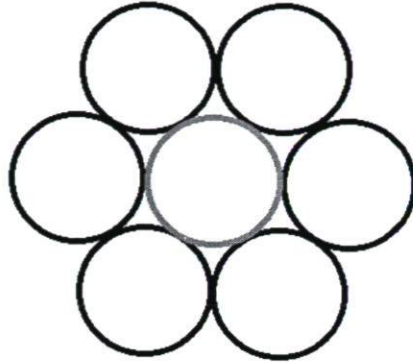


Figure 1.14 Particules maximums pouvant être reliées à une particule

En pratique, le nombre de coordinations oscille entre un et quatre. Cette méthode de calcul est largement utilisée dans le monde atomique notamment en chimie moléculaire, cristallographie (fig. 1.15) et en physique de l'état solide.

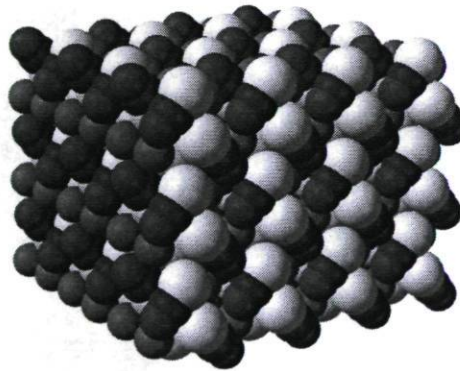


Figure 1.15 Structure du thiocyanate de potassium tirée de la cristallographie

1.3.3.3 Rayon de giration

Le rayon de giration d'un objet est un paramètre pour mesurer la dimension de celui-ci en calculant la racine carrée moyenne de la distance entre les différentes parties de l'objet et le centre de masse de ce dernier. Dans le cadre de l'étude d'agrégats fractals, le rayon de giration est mesuré à partir de chacune des positions du centre des particules en présence et le centre de masse de l'agrégat [22] :

$$R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N d_n^2 \quad (1.8)$$

Où R_g est le rayon de giration, N est le nombre de particules et d_n est la distance qui sépare la nième particule avec le centre de masse. Le rayon de giration est une caractéristique fondamentale pour quantifier la grandeur d'un agrégat et ainsi la comparer avec d'autres agrégats créés dans des environnements différents.

1.3.3.4 Porosité

Une autre façon de mesurer la distribution de la matière au sein d'un agrégat est de mesurer la valeur de porosité. Dans la physique des matériaux, la porosité est le rapport du volume du vide à l'intérieur d'un amas et du volume total de l'agrégat. Cette valeur donne donc un pourcentage pour quantifier le vide à l'intérieur d'un agrégat. Dans l'exemple ci-dessous, le pourcentage de vide est donc 0,111 ou 1/9.

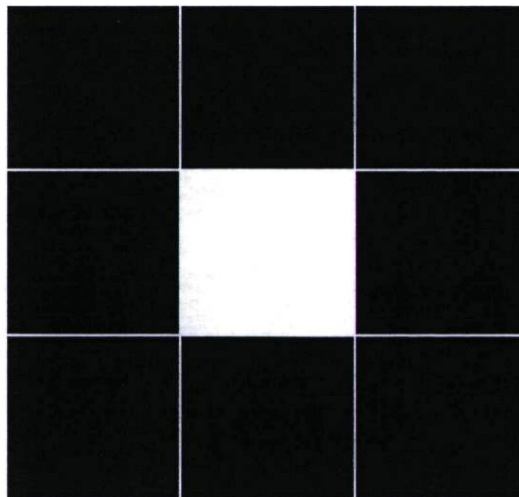


Figure 1.16 Exemple de ratio de vide (0,111)

1.3.4 Méthodes de calcul

Parmi les nombreux résultats qui peuvent être recueillis, différents calculs sont effectués afin de tirer des courbes tendances parmi les valeurs ou de donner un indicateur

permettant de vérifier la corrélation entre les valeurs. Les prochaines sous-sections exposent brièvement la théorie derrière ces calculs.

1.3.4.1 Méthode des moindres carrés

À cause de la nature aléatoire des simulations, les propriétés physiques des agrégats sont parfois difficiles à mesurer. Plusieurs analyses, où des dizaines de résultats sont recueillis, révèlent certaines tendances qui méritent d'être mises en évidence. Pour cette raison, des méthodes de calculs ont été élaborées afin de tracer des courbes tendances parmi les résultats recueillis. La méthode la plus utilisée est celle des moindres carrés. Elle permet de tracer la meilleure pente parmi une série de points et ainsi permettre d'analyser les principales tendances [22]. La pente $y = ax + b$ de cette courbe de tendance est donnée par :

$$a = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \text{ et } b = \bar{y} - a\bar{x} \quad (1.9)$$

Où x et y sont les valeurs concernées, \bar{x} et \bar{y} sont la moyenne de chacune des séries de valeurs.

1.3.4.2 Coefficient de détermination

Afin de pouvoir vérifier si les courbes tendances tracées sont importantes et pertinentes quant à la prédiction de futurs résultats, un coefficient de détermination (R^2) est obtenu [34]. Ce dernier peut être obtenu à partir de la formule suivante :

$$R^2 = \frac{\sum_i (f_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2} \quad (1.10)$$

Où y_i est une valeur i dans l'échantillon, \bar{y} est la moyenne des valeurs de l'échantillon et f_i est la valeur associée au modèle proposé. Ainsi, le coefficient de détermination sera toujours situé entre 0 et 1. On jugera que la courbe tendance est bonne si cette dernière valeur est près de 1.

1.4 Algorithmes de simulation numérique

La prochaine sous-section introduit les différents modèles informatiques développés au cours des trois dernières décennies au sujet de l'agrégation de particules de taille micrométrique. Les particularités de chaque algorithme seront analysées. Il y aura aussi une analyse de la méthode de simulation utilisée, de la rapidité de simulation, des paramètres modifiables et des propriétés physiques obtenues à l'aide du modèle numérique.

1.4.1 Agrégation limitée par la diffusion

En premier lieu, l'un des premiers modèles à avoir fait son apparition dans le domaine de l'agrégation de particules fut le modèle d'agrégation limitée par diffusion proposé par Witten et Sander en 1981 [19]. Le phénomène physique étudié était l'influence d'un environnement avoisinant pour un point donné dans l'espace. Ce phénomène est régi par les équations de Laplace et décrit la diffusion de particules.

Ce modèle numérique plaçait tout d'abord une particule centrale. Cette dernière était bombardée de toutes les directions avec d'autres particules de façon aléatoire. Celles-ci effectuaient un mouvement brownien jusqu'à ce qu'elles se collent à l'agrégat en formation (fig 1.17). Les particules lancées étaient placées initialement sur un rayon de cercle autour de l'agrégat qui variait en fonction de la taille de ce dernier. Quoique très simpliste, ce modèle informatique permettait d'obtenir rapidement des agrégats (fig. 1.18) que l'on peut observer un peu partout dans la nature. Un fait demeure que peu importe la taille des agrégats obtenus, il a été constaté qu'il existe une invariance d'échelle évidente à toutes les échelles de grandeur.

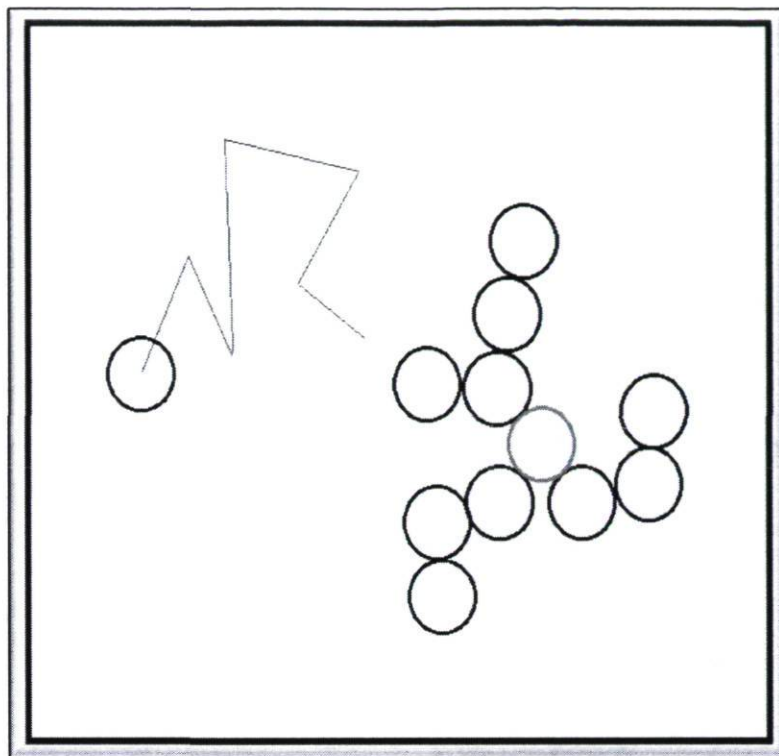


Figure 1.17 Particule se déplaçant de manière brownienne dans une simulation par agrégation limitée par la diffusion

Différentes variantes de cet algorithme ont par la suite été introduites comme l'agrégation par diffusion limitée sur une paroi ou sur un mur [31]. Ceci permettait en outre d'étudier le phénomène de déposition de particules sur des surfaces quelconques dans un environnement où le mouvement brownien est présent (fig. 1.19).

Aussi, des algorithmes de simulation d'agrégation limitée par la diffusion ont été écrits où le mouvement des particules est de nature balistique [18]. Les mêmes structures physiques ont été rencontrées parmi les résultats recueillis, mais les scientifiques de l'époque ont obtenu des agrégats beaucoup plus compacts.

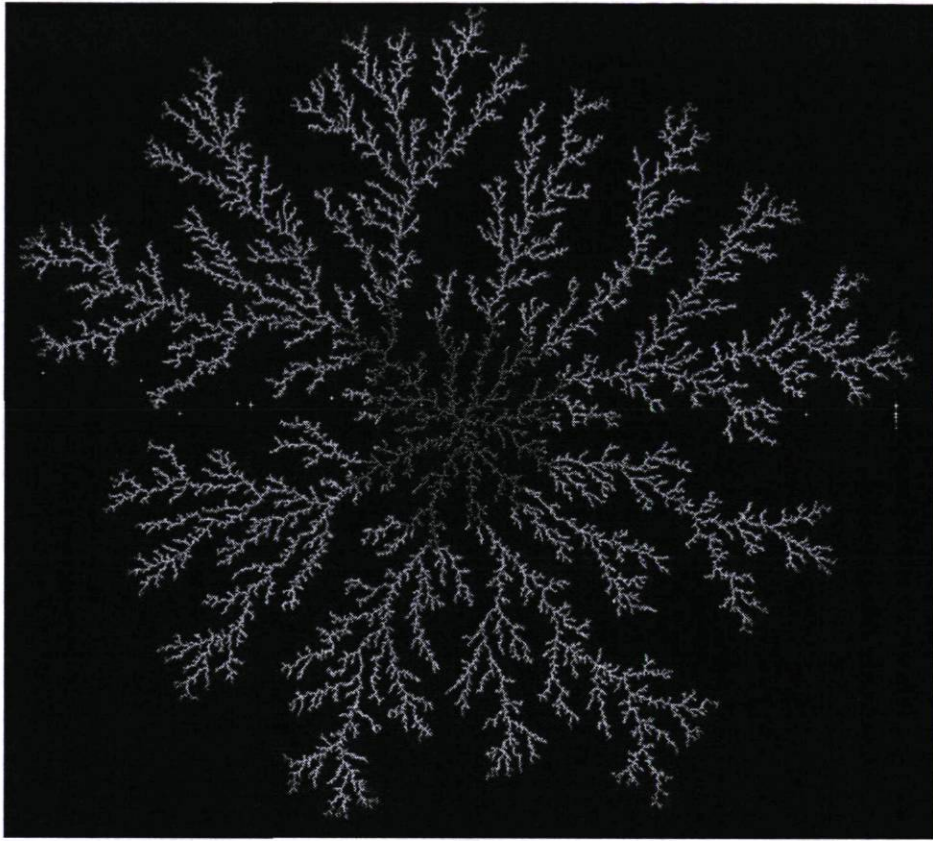


Figure 1.18 Agrégat obtenu par agrégation limitée par la diffusion

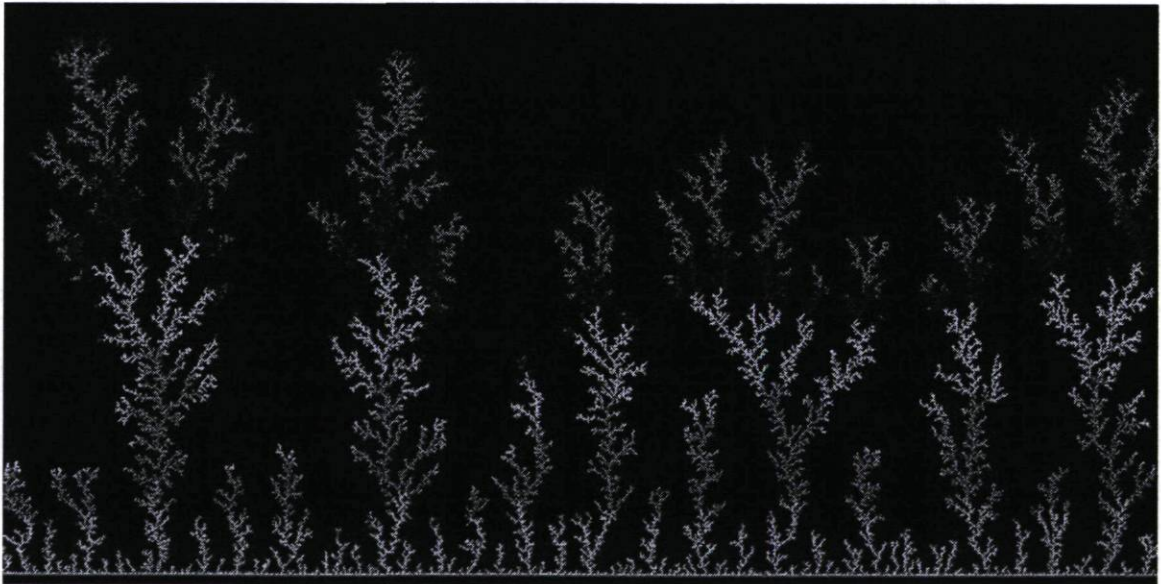


Figure 1.19 Agrégation limitée par la diffusion sur une paroi

1.4.2 Agrégation amas-amas (particules-amas)

Peu de temps après, de nouveaux modèles furent créés afin de pouvoir simuler des phénomènes physiques différents et plus axés sur ce que l'on obtenait en laboratoire [6-17]. L'agrégation amas-amas (en anglais : Cluster-Cluster Aggregation (CCA)) fut l'un de ces modèles qui pouvaient simuler des agrégats qui se rapprochaient le plus de ce qui était créé expérimentalement.

L'algorithme consiste à poser un certain nombre de particules aléatoirement dans une enceinte et à choisir une particule au hasard parmi celles-ci. Cette dernière doit ensuite diffuser dans toutes les directions jusqu'à ce qu'elle fasse contact à une autre particule et reste liée à cette dernière. Le même manège se répète jusqu'à l'obtention d'un agrégat contenant tous les monomères posés initialement.

Ce modèle était à la fois très simple et très complet, mais il était limité, dans les années 80, à la puissance des ordinateurs qui ne permettait pas d'avoir un grand nombre de particules. Malgré tout, de très bonnes analyses ont pu être effectuées. L'un des principaux développeurs de cet algorithme était Paul Meakin qui étudia toutes les particularités et le potentiel de création d'agrégats que pouvait offrir l'agrégation amas-amas [16].

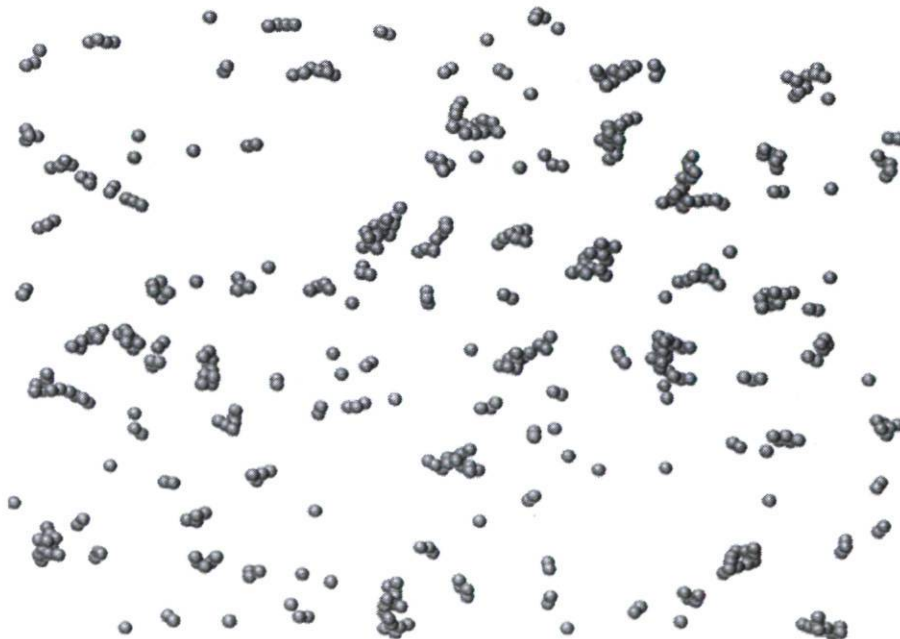


Figure 1.20 Agrégation amas-amas en cours

L'étude sur le sujet a permis de caractériser des agrégats bidimensionnels ainsi que tridimensionnels en étudiant certains paramètres ajustables, dont la longueur du libre parcours moyen et la probabilité d'agrégation lors de contact [12].

Les agrégats obtenus par agrégation amas-amas avaient différentes configurations en fonction de ces nombreux paramètres et il a été démontré que les agrégats étaient clairement fractals. En étudiant les différentes propriétés physiques modifiables, il a donc été prouvé que la dimension fractale était proportionnelle à la longueur du libre parcours moyen.

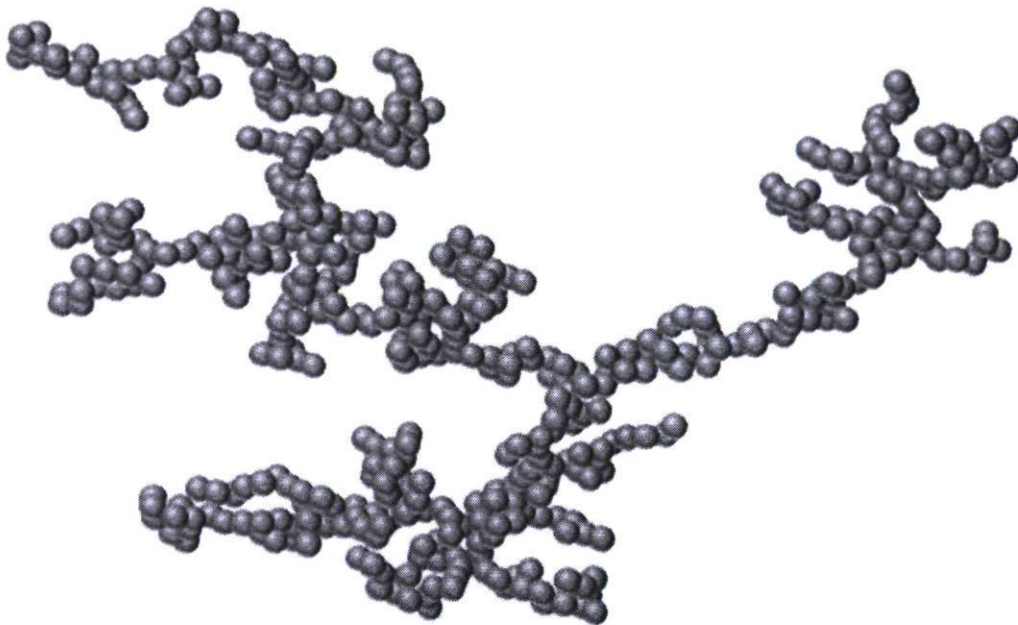


Figure 1.21 Agrégat final produit par agrégation amas-amas

1.4.3 Agrégation sur réseau et hors réseau (on-lattice et off-lattice)

Les tout premiers modèles, autant l'agrégation limitée par la diffusion que l'agrégation amas-amas, utilisaient un algorithme d'agrégation sur réseau et hors réseau [6]. Dans le premier cas, les particules sont placées sur une matrice ou un réseau où chaque particule est positionnée dans une ligne et une colonne. Ceci fait en sorte que la position des monomères est un nombre entier et que les mouvements de particules se font

uniquement de façon verticale ou horizontale. L'agrégation de deux particules ou agrégats se fait donc lorsque deux particules sont placées l'une à côté de l'autre dans le réseau (fig. 1.22).

Dans le cas de l'agrégation hors réseau, la position des particules peut prendre n'importe quelle valeur non entière et ces particules peuvent se déplacer dans n'importe quelle direction. Les agrégations se font lorsque les rayons de deux monomères se chevauchent (fig. 1.23).

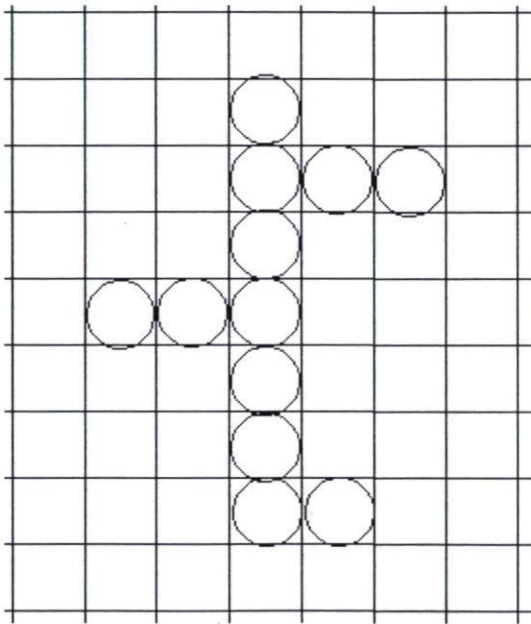


Figure 1.22 Agrégat sur réseau

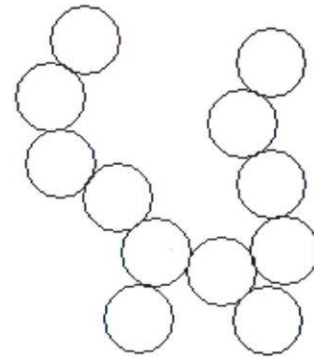


Figure 1.23 Agrégat hors réseau

1.4.4 Agrégation limitée par réaction

Le modèle d'agrégation amas-amas a indubitablement été repris et retravaillé de toutes les manières afin d'y ajouter d'autres paramètres. Entre autres, le modèle d'agrégation limitée par réaction a repris le concept en ajoutant une probabilité d'agrégation lors du contact entre particules, c'est-à-dire qu'il y a une probabilité prédéterminée que la particule s'agrège au contact des autres particules ou agrégats [32].

Physiquement, cette probabilité sert à simuler des champs de force autour de particules qui peuvent repousser ou attirer celles-ci dans certains cas comme dans celui des forces de Van der Waals. C'est d'ailleurs cette force qui unit les particules entre elles. Pour des modèles numériques dans lesquels la vitesse des particules n'est pas fixée, cette probabilité peut modéliser le fait qu'une agrégation n'a pas toujours lieu lorsque la vitesse n'est pas suffisamment élevée.

1.4.5 Agrégation balistique

Un autre modèle pouvant être appliqué à l'agrégation amas-amas a été créé sous le nom d'agrégation balistique. Comme son nom l'indique, les particules en jeu ont des trajectoires balistiques et ne sont donc pas soumises au mouvement brownien. Les particules se déplacent continuellement en ligne droite et rebondissent sur les parois des murs jusqu'à ce que des agrégats soient créés.

1.4.6 Agrégation sous l'influence d'un puits de potentiel

Parmi les modèles les plus récents, les scientifiques se sont mis à s'intéresser aux forces pouvant intervenir entre les particules lors de l'agrégation. Dans cette optique, des simulations numériques ont été conçues introduisant des puits de potentiel autour des particules [25-26]. Lors des simulations, la particule entrant dans un rayon donné autour d'une autre particule sera alors agrégée automatiquement à celle-ci. Cet algorithme est intéressant lors de l'étude des effets électriques induits par des particules. D'ailleurs, d'autres algorithmes ont été utilisés avec un puits de potentiel et des valeurs de charge pour chaque particule.

Chapitre 2

Méthodologie

Au cours de ce deuxième chapitre, les étapes menant aux principaux algorithmes numériques seront exposées. Tout d'abord, un bref historique des travaux réalisés au sein de notre équipe de recherche est abordé afin de mettre en perspective les progrès réalisés depuis le début des recherches. Par la suite, il y aura une description suivie d'une explication du logiciel utilisé pour compiler le code. La partie essentielle de ce chapitre concerne la méthode par laquelle les algorithmes ont été écrits notamment pour simuler les différents types d'environnements. Les particularités de chaque simulation sont décrites de manière à pouvoir mieux analyser les agrégats simulés. Les algorithmes des outils de calcul permettant l'analyse des agrégats sont eux aussi décortiqués. Enfin, les différents tests qui permettent de valider la robustesse des codes numériques selon les différents paramètres seront discutés.

2.1 Historique de la simulation numérique au sein de l'équipe de recherche

Au cours des dernières années, le groupe de recherche de monsieur Slobodrian a réalisé plusieurs expériences sur l'agrégation de particules en microgravité. Notamment, plusieurs expériences d'évaporation-condensation ainsi que des expériences à bord d'avions ont été réalisées. Parmi ceux qui les ont réalisés, quelques-uns se sont intéressés à la modélisation numérique pour pouvoir comparer leurs résultats expérimentaux. En outre, Mario Cossette a étudié, au début des années 90, l'agrégation limitée par la diffusion [21].

Son modèle, très simple, permettait d'obtenir de bonnes mesures de dimension fractale sur les agrégats simulés. Des comparaisons ont donc pu être effectuées sur des agrégats produits en laboratoire. La principale difficulté résidait dans le fait que la dimension fractale de ces derniers était très difficile à obtenir précisément.

Quelques années plus tard, Martin Gauthier s'attaque aussi à cette problématique, mais avec un modèle numérique beaucoup plus complet et élaboré [22]. Ses simulations sont de type agrégation limitée par la diffusion et de type agrégation amas-amas et avaient comme objectif spécifique de reproduire l'agrégation dans un contexte d'évaporation-condensation. Il pouvait modifier plusieurs paramètres : le nombre de monomères, la dimension euclidienne, le rayon des particules, l'amplitude du mouvement brownien, le type de force attractive, l'amplitude de la force attractive, etc. Avec ses nombreux résultats, il a pu faire d'excellentes comparaisons avec les agrégats qu'il produisait par évaporation-condensation.

Par la suite, les effets de la force de gravité ont été étudiés par Pascal Deladurantaye [23]. Il a développé un programme tenant compte de la gravité et des forces entre les particules pour ainsi étudier ces effets. Une probabilité d'agrégation a été ajoutée et posée de manière à tenir compte de la grosseur des agrégats et des états qui ne sont pas stables gravitationnellement.

2.2 Programme de simulation MATLAB®

Durant ce projet de recherche, le programme de simulation utilisé pour écrire le code numérique est MATLAB® de la compagnie MathWorks. Le langage MATLAB a été développé à la fin des années 70 par Cleve Moler et repris par l'ingénieur Jack Little qui le recode en C voyant ainsi une opportunité de commercialisation. C'est ainsi que Jack Little, Cleve Moler et Steve Bangert fondent en 1984 la compagnie Mathworks et livrent la première version du logiciel MATLAB. L'un des avantages de ce langage de programmation est qu'il est très facile à apprendre et très simple en écriture par rapport à

d'autres langages. De plus, sa rapidité d'exécution n'est pas à négliger, car celle-ci, contrairement à d'autres, est très appréciable.

En ce qui concerne l'interface, MATLAB est très conviviale notamment en séparant l'écran en plusieurs fenêtres. Il y a donc une fenêtre dans laquelle le code est écrit, une fenêtre où sont stockées les valeurs des variables et une autre fenêtre où l'on entre des valeurs et où des résultats peuvent être affichés.

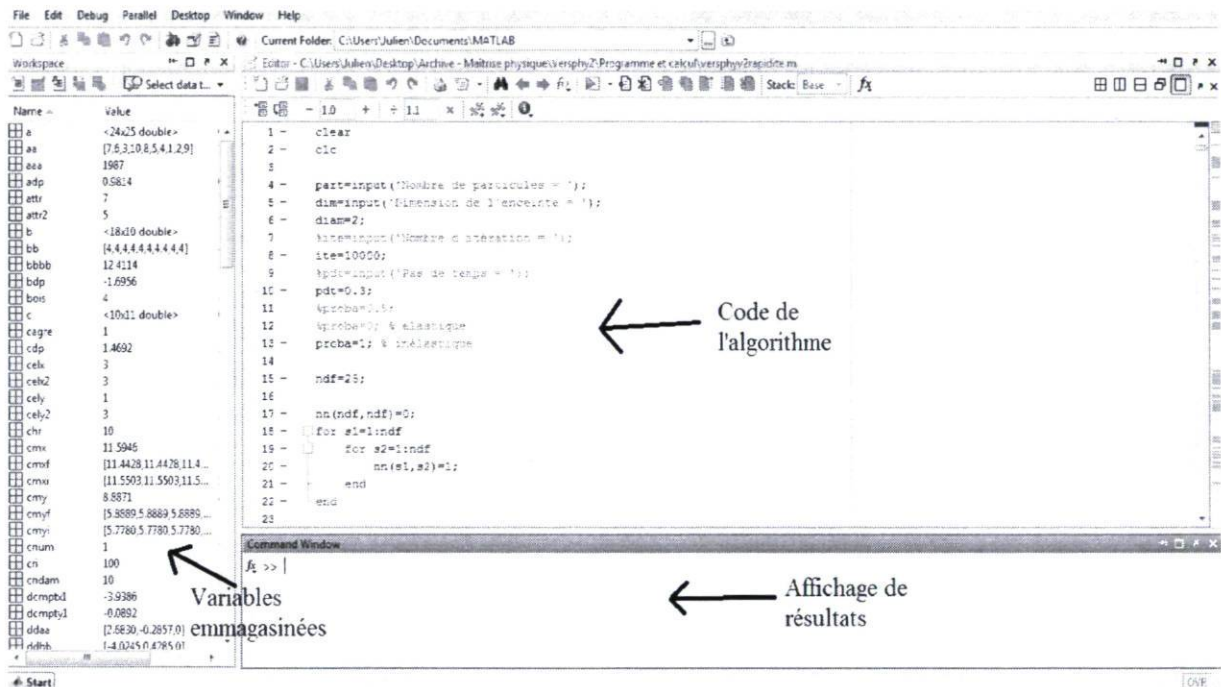


Figure 2.1 Interface de MATLAB

L'affichage graphique est un aspect qui se révèle très intéressant. En effet, il permet d'afficher en temps réel les simulations et de faire des rotations d'agrégats obtenus. De plus, MATLAB s'avère très utile lors de la manipulation de vecteurs ou de matrices, car le programme les reconnaît et peut appliquer les règles mathématiques qui les concernent. Enfin, MATLAB permet d'accéder facilement aux variables, ce qui est un atout non négligeable avec le type de simulation utilisé dans cette recherche, car il permet de sauvegarder les variables et de les transférer d'un fichier à l'autre.

2.3 Simulations numériques

Au cours des prochaines sections de ce chapitre, les différents modèles d'agrégation utilisés pendant ce projet seront détaillés et analysés. Il est important de mentionner que dans tous les cas, les modèles partaient d'un algorithme d'agrégation amas-amas. De plus, le premier modèle développé d'agrégation physique a servi de base pour tous les autres algorithmes, ces derniers ayant seulement modifié quelques éléments au modèle de base afin d'observer certains effets physiques précis. Dans la plupart des cas, un modèle en deux dimensions et un modèle en trois dimensions ont été fournis.

2.3.1 Modèle d'agrégation non physique

Au tout début du projet, un algorithme très simple est réalisé inspiré du modèle de Pascal Deladurantaye [23]. Ce modèle porte sur l'agrégation amas-amas et a pour but de développer un algorithme de base rapide, mais sans entrer dans les détails physiques [35].

La simulation débute avec des particules distribuées aléatoirement dans une enceinte sans qu'aucune d'entre elles ne se chevauche. De plus, chaque particule possède un numéro qui lui servira d'identification à savoir si la particule appartient à tel ou tel agrégat (fig. 2.2).

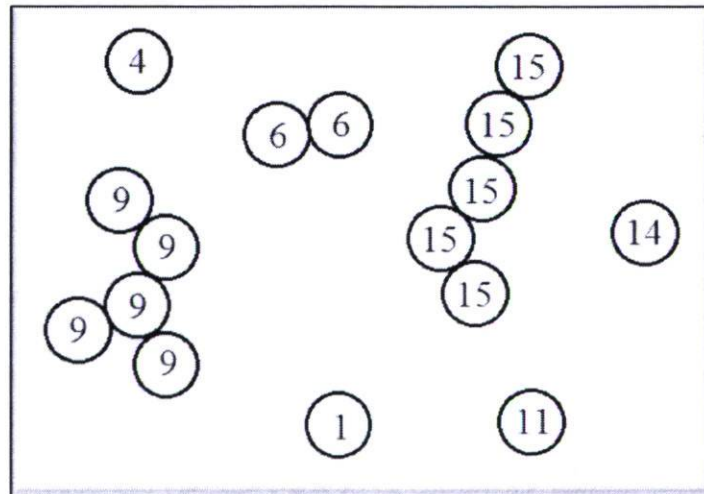


Figure 2.2 Particules et agrégats numérotés

Une particule est ensuite sélectionnée pour effectuer un déplacement dans une direction choisie aléatoirement de la longueur d'un libre parcours moyen posé auparavant. Le déplacement s'effectue seulement si la particule se déplace à l'intérieur de l'enceinte puisqu'aucune détection de mur n'a été introduite dans le code numérique. Lorsque la trajectoire de la particule sélectionnée traverse une autre particule, elle se colle à celle-ci, prend le numéro de la particule rencontrée et une autre particule ou un agrégat est sélectionné. La simulation se répète ainsi, avec toutes les particules, jusqu'à ce qu'il ne reste qu'un seul agrégat.

Comme mentionné précédemment, un libre parcours moyen est introduit pour simuler le mouvement brownien des particules. En variant ce libre parcours moyen, il est ainsi possible de simuler la présence de gaz dans une enceinte à diverses pressions. De plus, le nombre de particules, la dimension de l'enceinte ainsi que le diamètre de chaque particule peuvent être ajustés en fonction des paramètres souhaités.

Le plus grand désavantage de cet algorithme est qu'il ne tient pas compte des règles fondamentales de la physique soit la conservation d'énergie ou la conservation du moment cinétique. D'ailleurs, aucune vitesse n'a été introduite dans cette simulation et jamais il n'en a été question dans tous les projets précédents au sein de l'équipe de recherche. Par contre, le peu de variables physiques et la simplicité de cet algorithme font en sorte que le nombre de particules peut être très élevé tout ayant une rapidité d'exécution relativement rapide.

2.3.2 Modèle d'agrégation physique

Le modèle d'agrégation physique est un modèle d'agrégation amas-amas qui reproduit la suspension de particules dans le vide et qui respecte les lois de la physique que ce soit lors de collision élastique ou inélastique ou bien pour la conservation de l'énergie ou du moment cinétique. Ce modèle numérique est le modèle qui sert de base pour toutes les autres simulations dans lesquelles seulement quelques sous-algorithmes sont ajoutés pour obtenir des phénomènes physiques précis.

Tout d'abord, l'algorithme positionne aléatoirement chacun des monomères dans une enceinte selon les réglages présélectionnés (fig. 2.3). Ces particules sont placées pour faire en sorte qu'aucune d'entre elles ne se chevauche. Des vitesses sont ensuite attribuées à chaque particule aléatoirement, mais en obéissant à une loi normale autour d'une valeur de vitesse bien connue. Une valeur de vitesse est donc attribuée à chaque axe selon la dimension euclidienne sélectionnée. Un numéro est aussi assigné à chaque particule qui désignera dans quel agrégat fait parti cette même particule.

Une fois ces variables posées, le programme génère une liste aléatoire à partir de chaque numéro de particule. Cette liste servira à faire défiler les différentes particules d'une manière totalement aléatoire en vue de leur faire effectuer un déplacement. Cette liste aura comme principal atout de ne pas faire déplacer plusieurs fois un agrégat au cours d'une même itération. De cette façon, même si une particule est sélectionnée à l'intérieur d'un agrégat qui a déjà bougé, ce dernier ne subira pas d'autres translations jusqu'à ce que l'itération en cours soit terminée. Une itération est terminée lorsque chacune des particules a subi un déplacement.

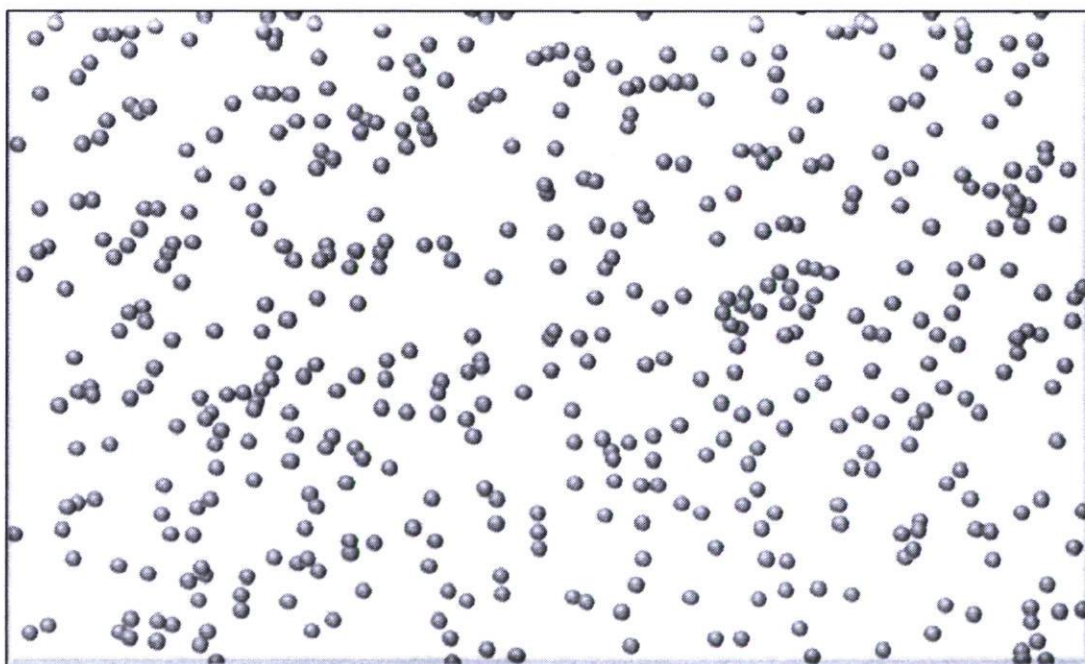


Figure 2.3 Distribution aléatoire de particules dans une enceinte

Donc, à tour de rôle, les particules sont sélectionnées et la valeur estimée de leur position finale est calculée à partir de leur vitesse et d'un pas de temps défini en début de simulation. Cette valeur est stockée et gardée en mémoire pour faire différents tests de détection. Le premier test concerne la détection de mur où chaque mur est choisi pour ensuite déterminer si celui-ci est frappé par une particule. Si c'est le cas, le temps est gardé en mémoire pour ensuite effectuer un test de détection de particules. Ce deuxième test est effectué à partir des particules avoisinantes. Un temps de collision est calculé et gardé en mémoire si ce dernier est à l'intérieur du pas de temps ou plus petit que le temps obtenu par la détection de mur.

Pour les deux derniers tests, seulement des déplacements de translation sont analysés en raison du fait que des problèmes techniques survenaient lorsque les mouvements de rotation étaient considérés. En effet, ces problèmes techniques entraînaient souvent des collisions non détectées et des particules qui sortaient de l'enceinte.

Si les tests de détections s'avèrent positifs, les temps calculés sont comparés pour ainsi déterminer lequel de ces événements se produit en premier. Si les tests de détections sont négatifs, alors la valeur estimée de la position finale est fixée à la particule et d'autres particules ou agrégats sont sélectionnés afin d'effectuer les opérations précédentes.

Dans le cas d'une détection de mur, la particule voit sa vitesse changer en fonction de la paroi de l'enceinte rencontrée. Si la particule rencontre une autre particule, une probabilité d'agrégation est générée pour ainsi connaître le sort de la collision soit élastique ou inélastique. La probabilité que ce soit l'une ou l'autre des deux collisions est prédéfinie au départ.

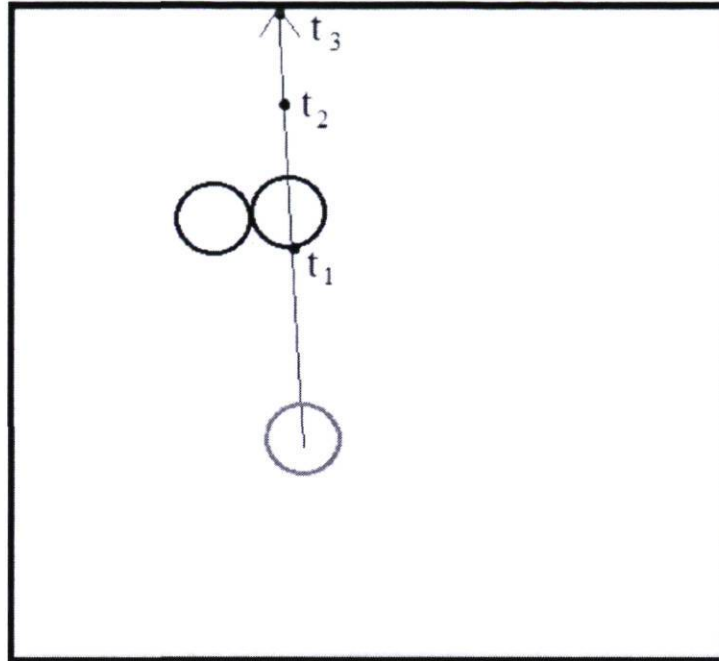


Figure 2.4 Temps de détection de particule (t_1), temps après une itération sans collision (t_2) et temps de collision avec le mur (t_3)

Dans le cas d'une collision élastique, le calcul de la conservation d'énergie et du moment cinétique est effectué et ainsi, la vitesse de centre de masse et la vitesse angulaire de l'agrégat sont ajustées en fonction des résultats obtenus. Dans le cas d'une collision inélastique, les particules impliquées fusionnent pour ainsi faire un agrégat plus massif. De ce fait, le nouveau centre de masse et le nouveau moment d'inertie de l'agrégat sont calculés. La conservation de mouvement est appliquée pour ainsi donner une valeur de vitesse à l'agrégat nouvellement formé. Enfin, les particules en jeu acquièrent le même numéro d'agrégat pour ainsi toutes se déplacer en amas.

Lorsque toutes ces étapes ont été effectuées, une nouvelle particule est sélectionnée et recommence tout le processus de déplacement jusqu'à ce que chacune des particules se retrouve regroupée au sein du même amas.

2.3.3 Modèle d'agrégation physique avec mouvement brownien

À partir du modèle physique précédent, une sous-routine est ajoutée pour simuler un mouvement de nature brownienne. Le principe est de changer la direction des composantes

de vitesse en sens inverse. Ainsi, la particule conservera les mêmes vecteurs de vitesse, mais sa direction changera au bout d'un certain temps selon une probabilité, cette dernière étant posée en fonction des phénomènes recherchés. Plus la probabilité sera grande et plus souvent la particule changera de direction, donc la longueur de déplacement avant qu'une particule change de direction sera plus courte.

De cette façon, en gérant bien la probabilité, on peut obtenir un libre parcours moyen qui variera en fonction de celle-ci. Il est évident que sur un temps donné, les changements de direction pourront être plus fréquents donnant ainsi un libre parcours moyen plus court et vice versa pour la même probabilité. Ceci pourra donc faire en sorte que pour deux probabilités différentes, un libre parcours moyen pourra être sensiblement le même. Par contre, avec un temps assez élevé, une probabilité donnera toujours le même libre parcours moyen.

2.3.4 Modèle d'agrégation physique avec puits de potentiel

Toujours dans le but de se rapprocher d'un modèle de simulation physique qui représente le plus fidèlement possible les expériences expérimentales ou les phénomènes physiques au sein d'une nébuleuse, un algorithme simulant un puits de potentiel autour des particules a été créé. Ce puits de potentiel peut représenter n'importe quelle force que ce soit une force électrique ou une force magnétique.

Cette sous-routine très simple introduit un champ de force autour de chaque monomère et lorsqu'une particule ou un agrégat entre dans un certain rayon, ce dernier se colle à la particule en question. La grandeur du rayon, autour duquel la force agit, est posée en fonction des phénomènes étudiés. Enfin, les puits de potentiel, entourant chaque monomère, sont carrés ce qui fait en sorte que, peu importe la distance qui sépare deux particules, la force n'agira que si ces particules sont à l'intérieur du rayon de force.

Cet algorithme a été écrit de cette façon pour éviter des temps de calcul grandioses qu'entraîne un calcul direct de l'influence des forces de l'ensemble des particules. Bien que

plus simpliste, cette méthode permet d'obtenir des tendances globales pour des agrégats créés dans ces conditions.

2.3.5 Modèle d'agrégation physique avec charges électriques

Le modèle électrique a été créé à partir de l'algorithme physique avec puits de potentiel, mais cette fois-ci, en ajoutant une charge électrique, positive ou négative, à chacune des particules. De ce fait, lorsqu'une particule entre dans un certain rayon près d'une particule, ces deux dernières sont collées l'une à l'autre en fonction des charges en présence. Évidemment, lorsque deux particules ou agrégats sont de charges opposées, celles-ci sont mises en contact l'une à l'autre, et dans le cas contraire, les particules continuent leurs déplacements sans qu'aucune interaction n'ait lieu.

La charge des monomères est définie au début de la simulation et elle est distribuée selon une probabilité qui peut être ajustée. De cette manière, le modèle numérique permet de lancer des simulations en fonction d'une distribution de charges dans un essaim de particules.

2.3.6 Accélération de l'algorithme

Un des plus grands problèmes communs dans toutes simulations numériques est la rapidité de celles-ci. Particulièrement dans des algorithmes où l'on a affaire à un système à N particules où chaque détection de particule doit être effectuée pour chacune d'entre elles dans le système. On assiste alors à une augmentation exponentielle du temps en fonction du nombre de particules.

Au début des années 80, la vitesse des ordinateurs causait de gros ennuis aux simulations, car elles ne permettaient pas d'obtenir un nombre de monomères considérable. Les concepteurs de ce temps ont donc développé des méthodes pour ainsi accélérer les algorithmes de calcul. De nos jours, les ordinateurs sont de plus en plus rapides, mais par contre, les simulations sont de plus en plus complexes. De ce fait, les mêmes méthodes

utilisées à l'époque sont réutilisées pour pouvoir avoir un modèle numérique ayant une exécution avec un temps très court.

Au cours de ce projet, de telles méthodes d'accélération ont été utilisées. Notamment, un algorithme de cellule a été ajouté afin de pouvoir enclencher les simulations plus rapidement. Cet algorithme consiste à poser, pour chaque particule, une cellule de positionnement selon les axes en présence (x et y en deux dimensions ou x , y et z en trois dimensions). Ainsi, lors de la détection de particule, seulement les particules dans des cellules voisines à la particule étudiée sont sélectionnées pour être vérifiées.

De cette façon, beaucoup moins de monomères sont vérifiés et ainsi l'algorithme se déroule plus rapidement. La grandeur des cellules est déterminée en fonction de la vitesse maximum qu'une particule peut prendre après avoir sondé chacune des particules dans l'enceinte. La dimension des cellules est donc mise à jour selon des paramètres qui sont définis en début de simulation (fig. 2.5).

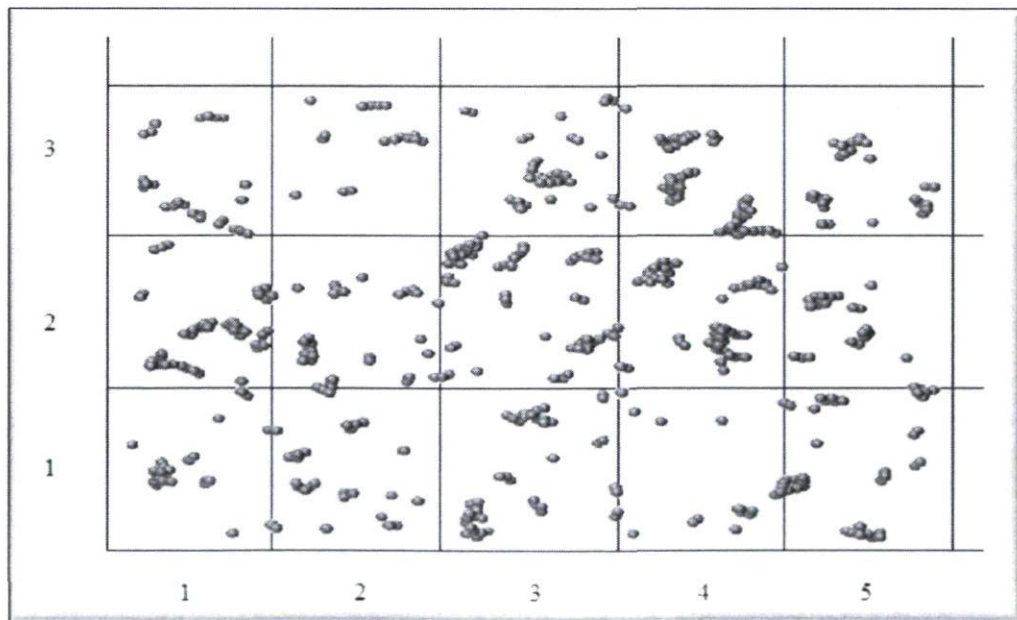


Figure 2.5 Particules et agrégats à l'intérieur de cellules

De plus, au fur et à mesure que des collisions inélastiques ont lieu, la vitesse des agrégats diminue entraînant par le fait même la lenteur de la simulation. De ce fait, au bout

d'un certain nombre d'itérations, chacun des agrégats ou particules est sondé pour ainsi obtenir une vitesse maximum. De cette manière, le pas de temps peut être augmenté et la rapidité de la simulation s'en porte mieux. Évidemment, en changeant le pas de temps, la grandeur des cellules, expliquées précédemment, est ajustée en fonction de ce dernier.

2.3.7 Outils numériques

Un des objectifs majeurs de ce projet est de pouvoir faire une analyse rigoureuse des agrégats obtenus. Afin d'analyser ceux-ci, plusieurs outils de calcul ont été développés. Dans cette section, chaque algorithme de calcul est décrit.

2.3.7.1 Dimension fractale

Le sous-programme qui permet de calculer la dimension fractale applique la méthode de comptage par boîte. L'algorithme commence par déterminer la taille de l'agrégat pour ainsi fixer une grosseur de boîte maximum. À partir de cette taille maximum, différentes dimensions de boîte peuvent être fixées. Une matrice est ensuite créée où chaque colonne et rangée de la matrice représente la position d'une boîte sur l'agrégat. Chaque cellule de cette matrice est fixée à zéro. Pour une dimension de boîte, chacune des boîtes est sélectionnée et il est déterminé s'il se trouve une particule à l'intérieur de celle-ci. Advenant la présence d'une particule dans une boîte, cette particule est additionnée au nombre déjà présent dans la cellule. Cela est effectué pour chacune des boîtes et pour chacune des grandeurs posées précédemment.

À partir des informations à l'intérieur de la matrice, chacune des cellules est encore sondée, mais cette fois-ci, pour déterminer le nombre de boîtes comptant la présence d'une particule ou plus. De cette façon, le logarithme du nombre de boîtes occupées en fonction du logarithme de la dimension de la boîte peut être obtenu et le graphique qui permet d'obtenir la dimension fractale peut être tracé. Parmi les points qui sont tracés, certaines

valeurs doivent être ignorées pour faire en sorte d'obtenir la meilleure pente possible parmi les points tracés. La méthode des moindres carrés est utilisée afin de tracer cette pente.

2.3.7.2 Nombre de coordinations

Le nombre de coordinations est calculé pour chaque particule afin de donner une moyenne d'ensemble. Pour trouver le nombre de coordinations moyen, un monomère est d'abord choisi et le nombre de particules étant à une distance d'un diamètre de monomère est comptabilisé et emmagasiné. Par la suite, la moyenne sur toutes les particules est calculée. Dans la figure 2.6, un exemple est illustré dans lequel un rayon autour de la particule centrale détermine le nombre de particules collées à elle pour ainsi obtenir le nombre de coordinations. Dans ce cas-ci, le nombre de coordinations est de 2.

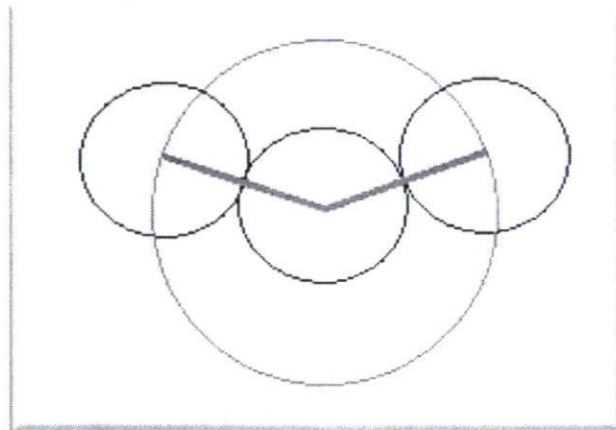


Figure 2.6 Deux particules étant en contact avec la particule centrale représentant le nombre de coordination

2.3.7.3 Rayon de giration et distance moyenne entre une particule et le centre de masse

Différentes méthodes pour évaluer la grosseur des agrégats et les comparer entre eux font partie du projet. Notamment, un algorithme de calcul de rayon de giration a été conçu à l'aide de la formule théorique (1.8). En calculant ainsi pour chaque particule, une moyenne est ainsi obtenue.

Un autre moyen de caractériser la grosseur de l'agrégat est de calculer la distance entre le centre de masse de l'agrégat et chacune des particules. Une moyenne est calculée à partir de ces distances pour chaque particule. Cette méthode est différente, mais le rayon de giration a été privilégié pour cette étude, car celui-ci est largement plus utilisé en science.

2.3.7.4 Porosité

Afin de mesurer le ratio de vide à l'intérieur d'un agrégat, un algorithme de calcul de la porosité a été écrit. Tout d'abord, l'agrégat est tourné dans tous les sens pour ainsi trouver un rectangle d'aire minimum. À partir de ce rectangle, l'aire totale que prend l'agrégat dans ce rectangle est calculée et le ratio entre l'aire de l'agrégat et l'aire du rectangle permet d'obtenir la porosité. Bien que simpliste, ce calcul permet d'avoir une certaine mesure relative du ratio du vide à l'intérieur de l'agrégat.

2.3.8 Tests de simulation

Dans un algorithme numérique, l'une des choses les plus importantes pour vérifier la robustesse d'un code est les tests de simulation. C'est dans ces tests que chaque sous-routine est retirée, analysée et mise à l'épreuve afin d'obtenir une simulation se rapprochant le plus près possible de ce qui est recherché physiquement. Les prochaines sous-sections seront en mesure de mettre en évidence les diverses manœuvres exécutées.

2.3.8.1 Tests de détection de mur

À l'aide de valeurs connues de positions et de vitesses, des particules sont lancées virtuellement vers un mur et le temps qu'ont parcouru les particules est obtenu. À l'aide des concepts physiques et mathématiques connus, les calculs théoriques peuvent être effectués

sur papier et comparés aux tests réalisés. Ces tests sont répétés pour différents murs et différentes trajectoires de monomères.

2.3.8.2 Tests de détection entre particules ou agrégats

Comme dans la sous-section précédente, des particules avec des variables connues sont lancées pour donner lieu à une collision. Une valeur de temps est recueillie et est comparée avec celle obtenue théoriquement. Diverses vitesses et positions sont sélectionnées afin de tester vigoureusement cette sous-routine.

2.3.8.3 Tests visuels avec graphiques

Évidemment, une façon très rapide pour voir si les simulations se déroulent comme convenu est de visualiser les agrégations en temps réel sur un graphique. De cette façon, il est facile de voir si des détections de mur ou de particules n'ont pas lieu. De même, lors des collisions élastiques ou inélastiques, il est quand même assez évident, de façon intuitive, d'observer des ambiguïtés lorsque de nouveaux agrégats sont formés.

2.3.8.4 Tests de conservation d'énergie

Pour s'assurer que toutes les collisions élastiques qui ont lieu respectent bien les lois de la physique, des tests vérifiant la loi de conservation d'énergie sont effectués. Tout d'abord, des particules sont positionnées dans l'enceinte et leur vitesse initiale est stockée. Des simulations de collisions purement élastiques sont alors menées pendant plusieurs milliers d'itérations afin de permettre aux particules d'effectuer un nombre considérable de collisions. Par la suite, le résultat de toutes les vitesses obtenues est analysé pour pouvoir ainsi vérifier que l'énergie totale du système a bel et bien été conservée.

2.4 Méthodologie dans la récolte de résultats

Les différentes simulations numériques réalisées au cours du projet ont été effectuées de manière à obtenir la meilleure mesure statistique possible selon un modèle de simulation bien précis. De manière à optimiser le temps de simulation, de 4 à 8 résultats sont obtenus pour des paramètres physiques identiques.

Par la suite, chaque agrégat recueilli est analysé avec les différents outils de calcul et une moyenne des résultats obtenus est calculée. À partir de cela, des comparaisons peuvent être effectuées entre les agrégats provenant de différents paramètres physiques.

Chapitre 3

Résultats

Au cours de ce chapitre, les différents résultats récoltés seront exposés et analysés pour ainsi mettre en lumière les principaux points intéressants de la présente recherche. Tout d'abord, les observations d'ensemble sur les agrégats sont discutées pour ensuite regarder les résultats en fonction de divers modèles de simulations et de différents paramètres variables pour chacune d'entre elles. Les avantages et les désavantages de chacun des modèles numériques sont aussi discutés.

3.1 Observations globales des agrégats

3.1.1 Formes et densités des agrégats

À partir de l'ensemble des résultats obtenus, il a été observé que tous les agrégats simulés étaient de natures fractales, ceci étant déjà un fait lors du début du projet. Les différents résultats n'ont jamais révélé de dimension entière, et ce, avec les modèles numériques en deux dimensions et en trois dimensions. Parmi les différentes densités rencontrées au sein des agrégats formés, tous possédaient des dendrites ou des fjords de différentes grosseurs. La figure suivante montre différentes formes rencontrées pour des paramètres physiques identiques :

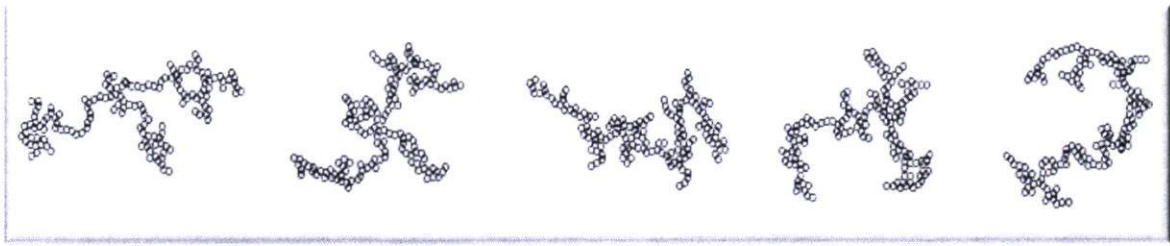


Figure 3.1 Différents agrégats de 150 particules provenant d'une agrégation amas-amas

Les différentes caractéristiques présentées dans cette section ne sont que celles communes à tous les agrégats. Les prochaines sections porteront davantage sur les propriétés physiques distinctives selon l'environnement étudié.

3.1.2 Croissance des agrégats

Au cours de la formation d'agrégats sur ordinateur, différentes figures ont pu être observées pour mettre en évidence les différentes étapes de croissance d'un agrégat.

La figure 3.2 permet de montrer des agrégats ayant une certaine autosimilarité selon les différents stades d'évolution. De plus, il est observé que des zones mortes se forment au sein des agrégats et grandissent au fur et à mesure que les collisions ont lieu.

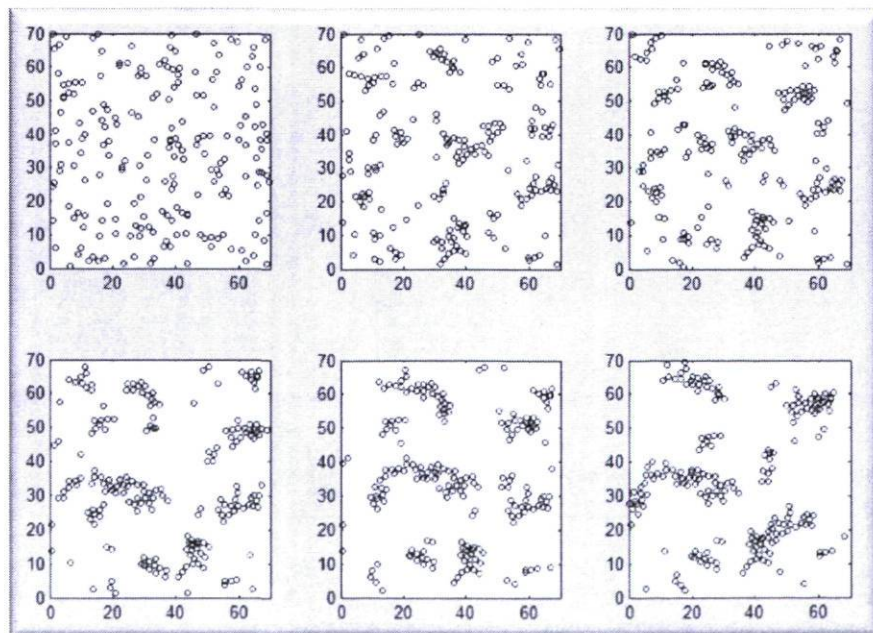


Figure 3.2 Évolution d'une distribution de particules dans une enceinte

3.2 Algorithme non physique

Au tout début de la recherche, des programmes de simulations d'agrégats ont été réalisés en s'inspirant grandement de projets informatiques réalisés par Pascal Deladurantaye. Afin d'obtenir des agrégats réalistes dans un délai de temps très court, plusieurs résultats ont pu être obtenus à partir de ce modèle non physique. Ces résultats seront donc analysés au cours de la sous-section suivante.

3.2.1 Observations

Les agrégats obtenus ont des caractéristiques propres à ceux observés normalement notamment avec des dendrites et des fjords. Les résultats montrent des formes sensiblement rondes, mais aussi allongées. Contrairement aux agrégats produits par diffusion limitée, les amas analysés sont beaucoup moins symétriques. Les agrégats produits ont pu être réalisés avec un nombre très élevé de particules comme le montre la figure suivante (fig. 3.3).

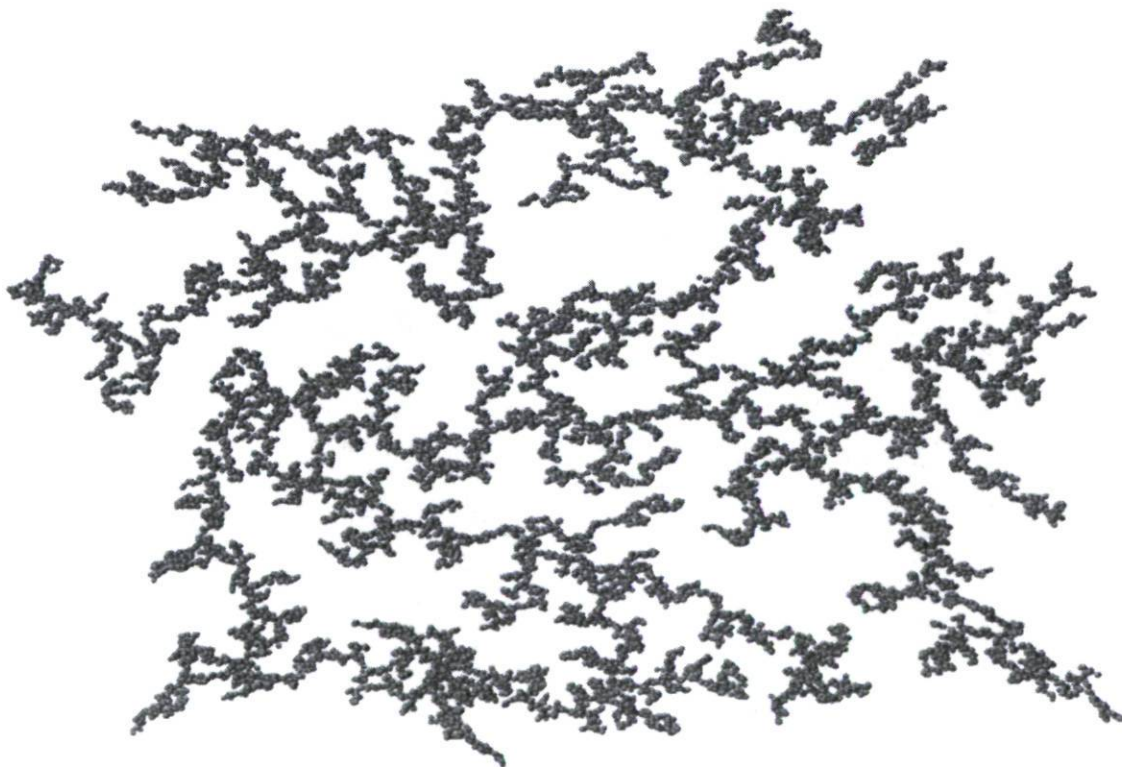


Figure 3.3 Agrégat de 25 000 particules simulé à partir de l'algorithme non-physique

3.2.2 Influence du libre parcours moyen

À partir de plusieurs échantillons de résultats, tous ont démontré que plus le libre parcours moyen est élevé, plus les agrégats obtenus sont denses. Ceci a été démontré et a été illustré sur les figures 3.4 et 3.5.

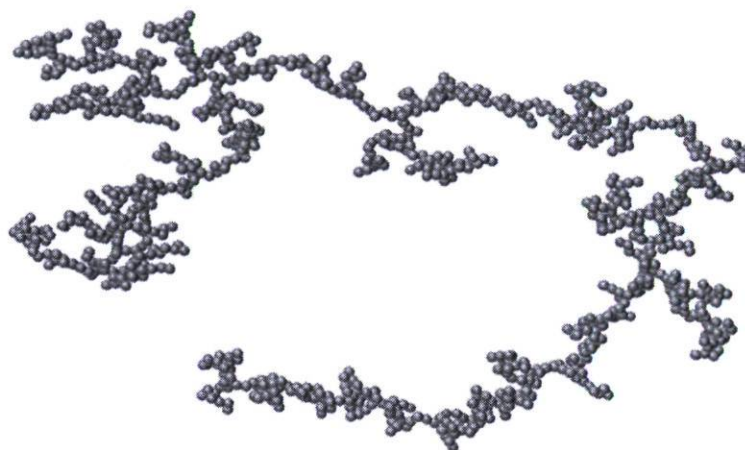


Figure 3.4 Agrégat avec un libre parcours moyen court

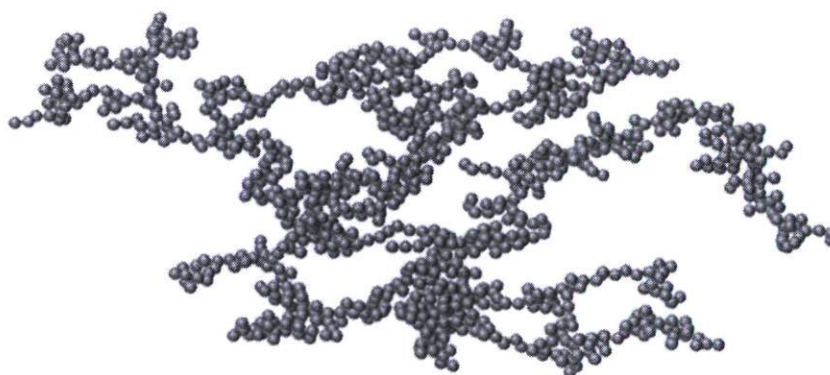


Figure 3.5 Agrégat avec un libre parcours moyen long

Les valeurs de dimension fractale calculées appuient aussi cette dernière affirmation. De plus, le rayon de giration obtenu donne des valeurs plus basses lorsque le libre parcours moyen augmente (tableau 3.1). Ces conclusions sont en concordance avec les résultats obtenus par le passé [18]. Le phénomène en présence montre que lorsque le libre parcours moyen est petit, celui-ci favorise les particules à s'agréger au bout des dendrites créant ainsi des agrégats moins compacts. Cette tendance à s'accrocher au bout des

dendrites s'explique par la faible probabilité qu'une particule a de se déplacer de manière brownienne au fond d'un fjord sans accrocher une dendrite entre temps.

	1000 particules Dimension : 175		1000 particules Dimension : 500	
Libre parcours moyen	3	70	20	200
Nombre de coordinations	3,8793	3,1397	2,6209	3,4220
Dimension fractale	1,4229	1,4914	1,4078	1,4685
Rayon de giration	53,1990	41,7187	59,4839	46,5951

Tableau 3.1 Résultats portant sur l'influence du libre parcours moyen

3.2.3 Influence de la concentration de particules

D'autres résultats axés sur l'importance de la concentration de particules dans une enceinte ont été obtenus. Entre autres, quatre valeurs différentes de concentrations ont été étudiées et analysées.

Les analyses montrent un nombre de coordinations qui décroît lorsque la concentration diminue. La dimension fractale agit sensiblement de la même manière, mais une certaine constance semble s'établir après certaines valeurs. Ceci est observé aussi avec les résultats de rayon de giration qui augmente lorsque la dimension devient plus élevée (tableau 3.2). Évidemment, ceci était prévisible. Sachant que le nombre de particules reste fixe, la grosseur d'un amas ne peut indéfiniment augmenter en fonction de l'enceinte.

La raison de ce qui est observé, quant à la densité de particules des agrégats, est due au fait que plus une enceinte est grande, plus les amas ont de l'espace pour se développer. Donc, avec une concentration plus élevée, les particules ne se déplacent pas longtemps avant de s'agréger favorisant ainsi des amas compacts.

	1000 particules Libre parcours moyen = 50		1000 particules Libre parcours moyen = 100			
	200	500	250	500	1000	1250
Dimension de l'enceinte						
Nombre de coordinations	3,0123	2,6267	3,3860	2,8943	2,6200	2,6067
Dimension fractale	1,4533	1,3982	1,4856	1,4494	1,4004	1,4171
Rayon de giration	49,7109	65,7132	44,9104	50,2198	61,1824	61,6516

Tableau 3.2 Résultats portant sur l'influence de la dimension de l'enceinte

3.2.4 Caractéristiques globales du modèle non physique

Les résultats précédents, à partir du modèle non physique, ne montrent pas de différences significatives avec le modèle physique (les résultats du modèle physique seront présentés dans la section suivante). Cela démontre bien que le modèle non physique représente bien les agrégats désirés tout en ayant une rapidité d'exécution très appréciable. Ce modèle doit donc être privilégié lors d'analyse sommaire où des résultats doivent être obtenus rapidement.

Le principal inconvénient de ce modèle est évidemment l'aspect non physique du système. Les agrégats effectuent seulement des déplacements de translation sans aucune rotation et les vitesses des particules ou des amas sont toujours les mêmes étant donné que les particules effectuent des déplacements avec un libre parcours moyen fixe. De plus, les collisions qui ont lieu ne sont soumises à aucune loi physique faisant en sorte que peu importe les agrégats en présence, l'agrégation s'effectuera sans aucun impact sur le reste de la simulation. Enfin, le déplacement des particules se fait uniquement si ces dernières restent à l'intérieur de l'enceinte. De cette manière, les monomères ont tendance à favoriser

les mouvements vers le centre de l'enceinte, phénomène qui n'est évidemment pas rencontré expérimentalement.

3.3 Algorithme physique en deux dimensions

Des résultats ont été obtenus à l'aide de simulations numériques effectuées avec un algorithme où les lois de la physique étaient entièrement respectées contrairement au modèle précédent. Des agrégats ont été simulés en fonction du nombre de particules et de la dimension de l'enceinte. Les prochaines observations ont été effectuées à partir d'un modèle en deux dimensions. Celui-ci a été soumis à une analyse plus rigoureuse principalement en raison de son temps de simulation qui s'avère plus faible que le modèle en trois dimensions. Par contre, de bonnes analyses ont été réalisées avec l'algorithme en trois dimensions et seront exposées dans une autre section.

3.3.1 Dimension fractale

La dimension de l'enceinte où les particules évoluent a une grande influence sur la dimension fractale et les résultats obtenus le confirment. À partir de trois enceintes de différentes grandeurs et de différents échantillons de particules, plusieurs résultats ont pu être analysés et la majorité d'entre eux montre une corrélation inverse entre la dimension fractale et la dimension de l'enceinte (tableau 3.3).

En effet, dans un environnement avec un espace plus restreint, les agrégats sont plus compacts, car les monomères ont moins de place pour se déplacer. De cette façon, lorsqu'on augmente le volume dans l'enceinte, les agrégats sont plus libres de se déplacer et les dendrites de ceux-ci ont une tendance évidente à prendre plus de place et à être moins denses et rapprochées. Dans un cadre théorique, lorsque les dimensions de l'enceinte tendent vers l'infini, on peut s'attendre à ce que la dimension fractale plafonne à une certaine valeur.

150 particules			
Dimension	50	125	200
Dimension fractal	1,3530	1,2921	1,2740
500 particules			
Dimension	100	250	400
Dimension fractal	1,4456	1,3720	1,3627
1000 particules			
Dimension	100	250	400
Dimension fractale	1,4456	1,3720	1,3627

Tableau 3.3 Dimension fractale en fonction de la dimension de l'enceinte

Deux autres analyses ont été menées et ont permis d'obtenir des conclusions par rapport à l'influence du nombre de particules lors de simulations. Une première analyse a été réalisée avec un échantillon allant de 150 à 400 particules par intervalle de 5 particules. La deuxième analyse a pris en considération des intervalles de 50 particules allant de 150 à 1000 particules.

Dans les deux cas, il a été démontré que la dimension fractale des agrégats ne varie pas de façon prononcée, mais qu'il existe une légère hausse progressive au fur et à mesure que le nombre de particules augmente. Le nombre de particules étant en plus forte densité fait en sorte que la dimension fractale amplifiera elle aussi. En effet, la majeure conclusion de ce modèle physique est que, en général, plus la concentration de particules dans un volume quelconque sera élevée, plus la dimension fractale sera élevée elle aussi.

Les figures 3.7 sont intéressantes afin de relever des tendances globales, mais ne pourraient pas servir de modèle pour prédire des valeurs en raison du coefficient de détermination qui est très faible. Par contre, pour une croissance qui varie sur un long intervalle comme sur la figure 3.6, une valeur approximative peut être obtenue et donner une idée générale de la valeur attendue.

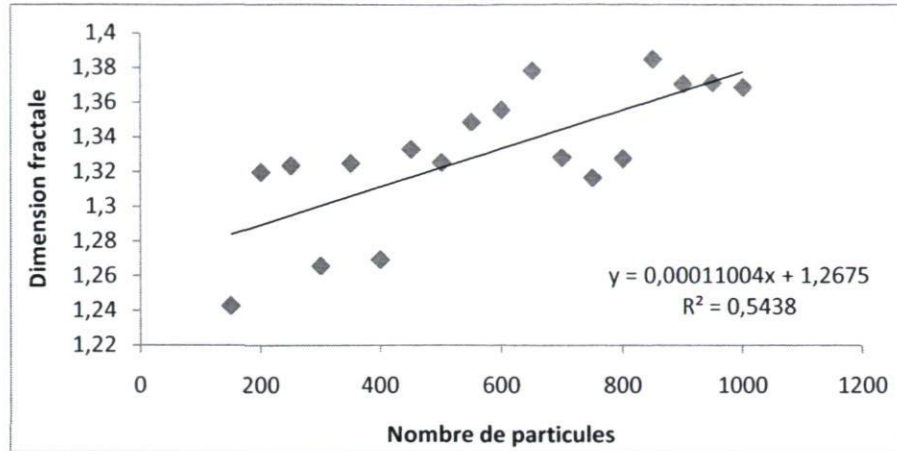


Figure 3.6 Graphique de la dimension fractale en fonction du nombre de particules

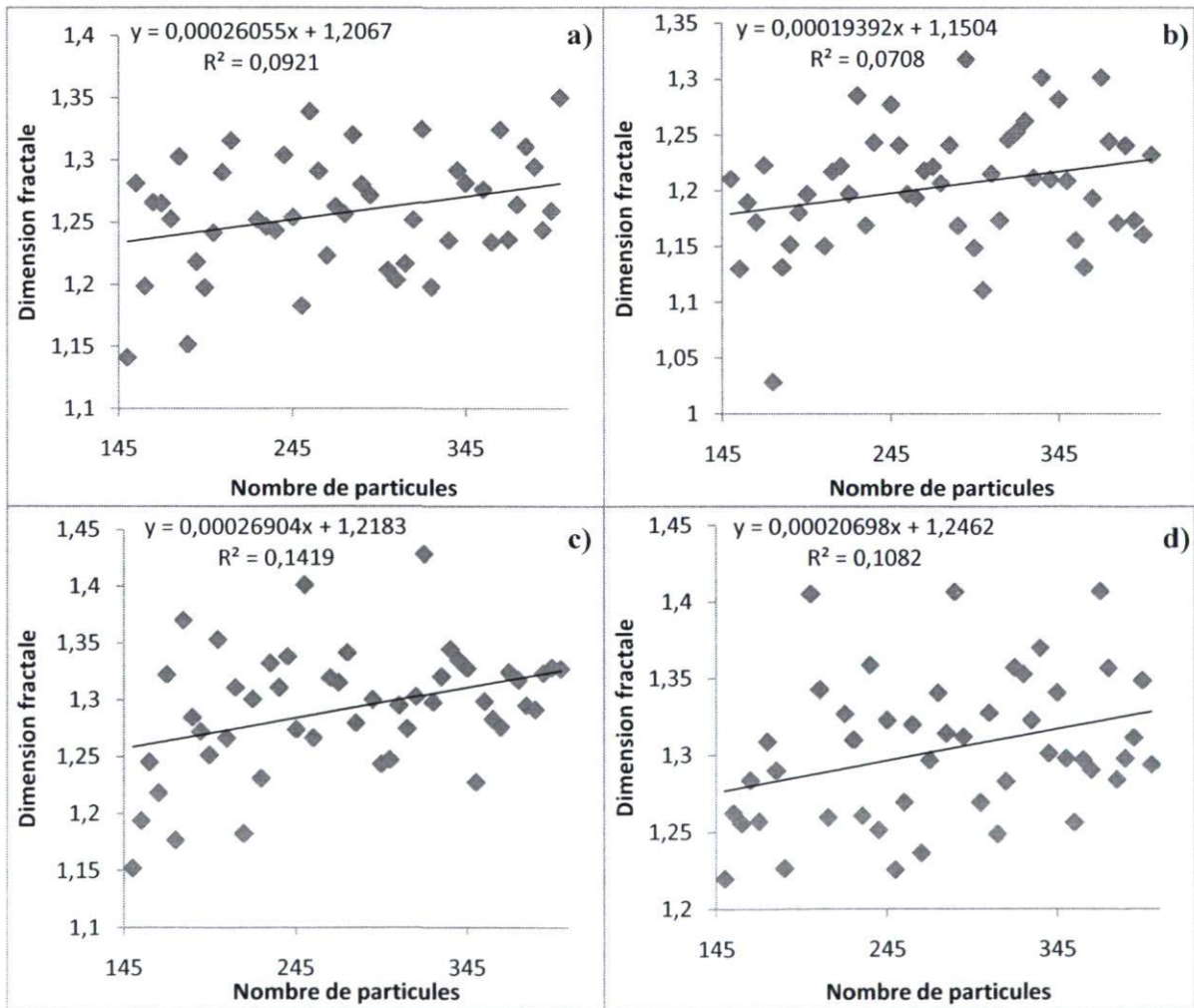


Figure 3.7 Graphiques de la dimension fractale en fonction du nombre de particules a) Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600

3.3.2 Nombre de coordinations

Dans l'analyse présente, l'étude du nombre de coordinations a été effectuée à partir de trois échantillons de particules où chaque échantillon a été testé avec trois dimensions d'enceinte différentes. Il est important de mentionner que le calcul est effectué à partir d'une moyenne sur tous les résultats d'un même ensemble de monomères. La mesure du nombre de coordinations est, dans l'ensemble, une autre mesure de la densité de particule au sein d'un amas. Plus le nombre de coordinations est élevé, plus le nombre de particules attachées à une seule particule sera élevé faisant ainsi des amas plus compacts. En conséquence, le nombre de coordinations et la dimension fractale varient de façon semblable dans la plupart des cas. Il a été observé que le nombre de coordinations diminue en fonction de l'augmentation de la dimension de l'enceinte (tableau 3.4).

150 particules			
Dimension	50	125	200
Nombre de coordinations	2,3008	2,2453	2,1822
500 particules			
Dimension	100	250	400
Nombre de coordinations	2,2803	2,2412	2,2379
1000 particules			
Dimension	150	375	600
Nombre de coordinations	2,2465	2,2463	2,2396

Tableau 3.4 Nombre de coordinations en fonction de la dimension de l'enceinte

De plus, une analyse a été effectuée afin d'observer l'importance de la concentration de particules parmi tous les résultats recueillis précédemment. Il a été intéressant de remarquer que le nombre de coordinations n'est pas relié à la concentration dans l'enceinte. Effectivement, pour un nombre de particules différentes, la valeur du nombre de coordinations n'augmentera pas de façon significative avec l'augmentation de la concentration. La figure 3.8 et la figure 3.9 illustrent ce fait. En effet, ceux-ci montrent un nombre de coordinations qui est très stable en fonction du nombre de particules présentes dans l'enceinte.

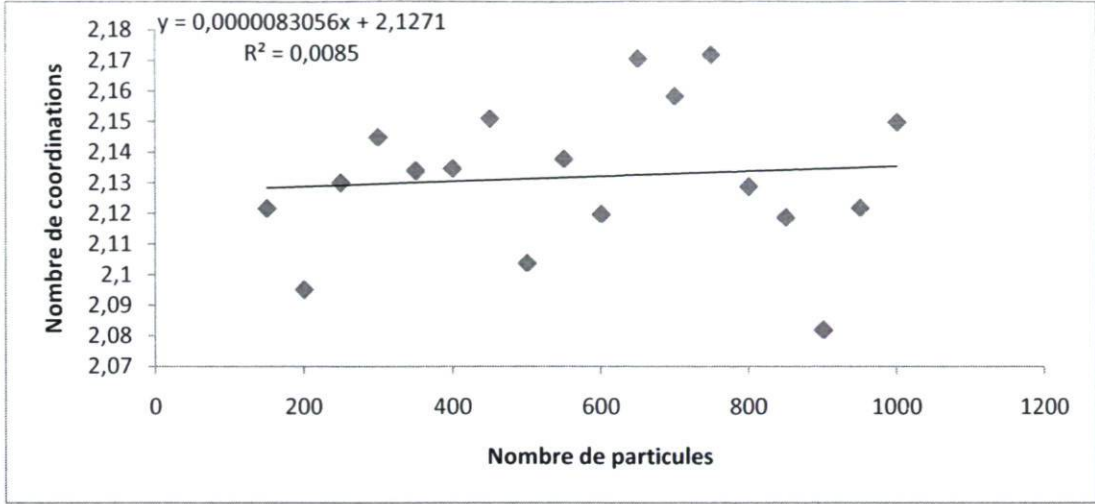


Figure 3.8 Graphique du nombre de coordinations en fonction du nombre de particules

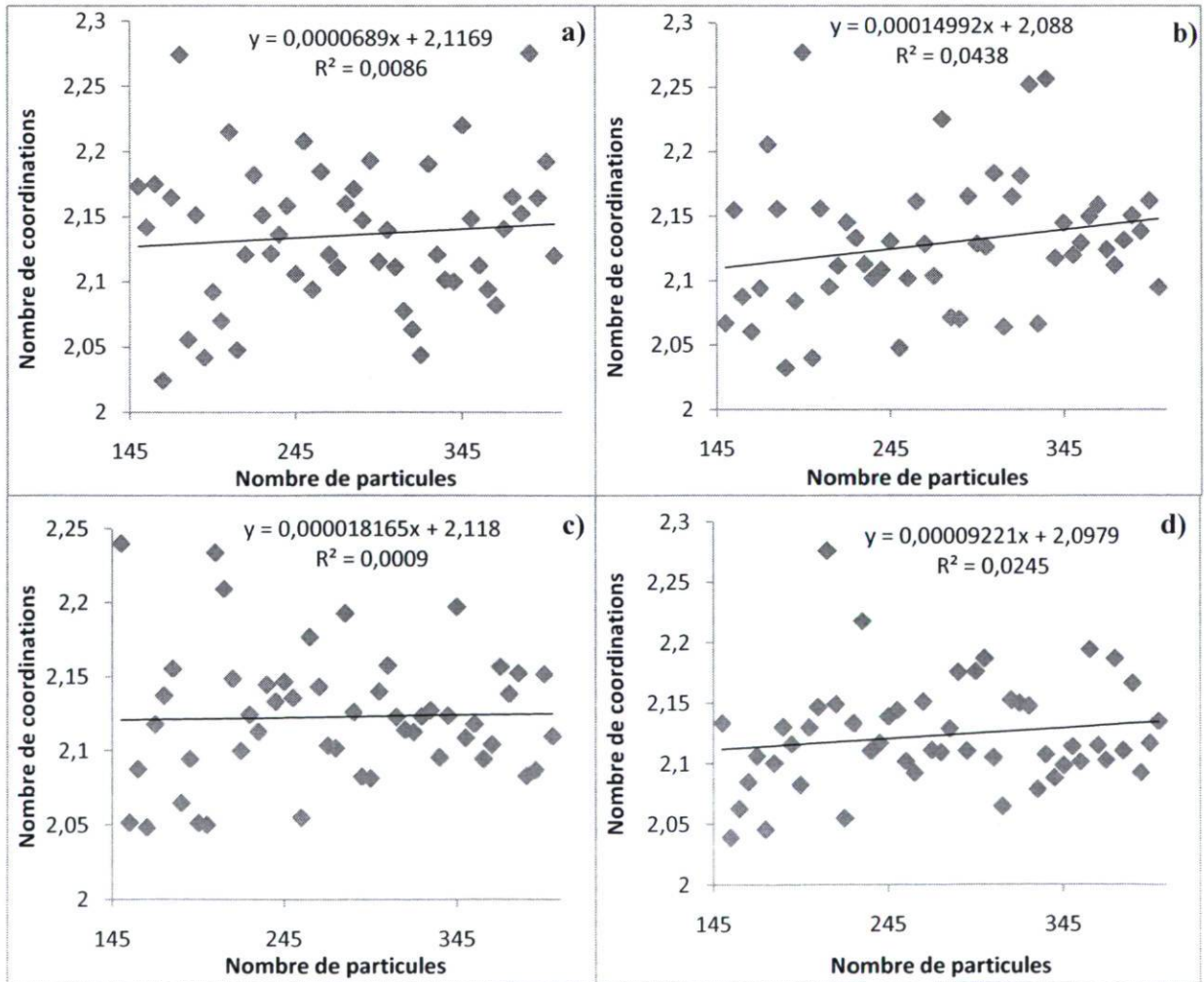


Figure 3.9 Graphiques du nombre de coordinations en fonction du nombre de particules a) Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600

Ceci peut être expliqué par le fait que plus un amas est gros et plus il contient des particules situées en périphérie, ces dernières ayant un nombre de coordinations moins élevé. Il est donc très important de considérer le nombre de particules dans l'étude des caractéristiques physique, car celui-ci a beaucoup d'impact sur les conclusions amenées.

3.3.3 Rayon de giration

En ajoutant des monomères à un agrégat, il a y évidemment une augmentation du volume ou de la surface d'un amas et donc une augmentation du rayon de giration. Les analyses montrent donc une corrélation évidente entre le nombre de particules et le rayon de giration (tableau 3.5).

150 particules			
Dimension	50	125	200
Rayon de giration	16,0139	21,2508	21,3415
500 particules			
Dimension	100	250	400
Rayon de giration	33,3394	44,6716	47,9763
1000 particules			
Dimension	150	375	600
Rayon de giration	50,8827	70,4797	73,4419

Tableau 3.5 Rayon de giration en fonction de la dimension de l'enceinte

Tel que mentionné précédemment, les agrégats formés dans des enceintes plus étroites sont plus denses. Naturellement, le rayon de giration augmente lorsque la dimension de l'enceinte augmente elle aussi. Par contre, pour un même nombre de particules, les agrégats formés atteindront éventuellement un rayon de giration maximum passé une certaine longueur de parois. Ceci n'a pas pu être observé, car les analyses n'ont pas été assez poussées en ce sens.

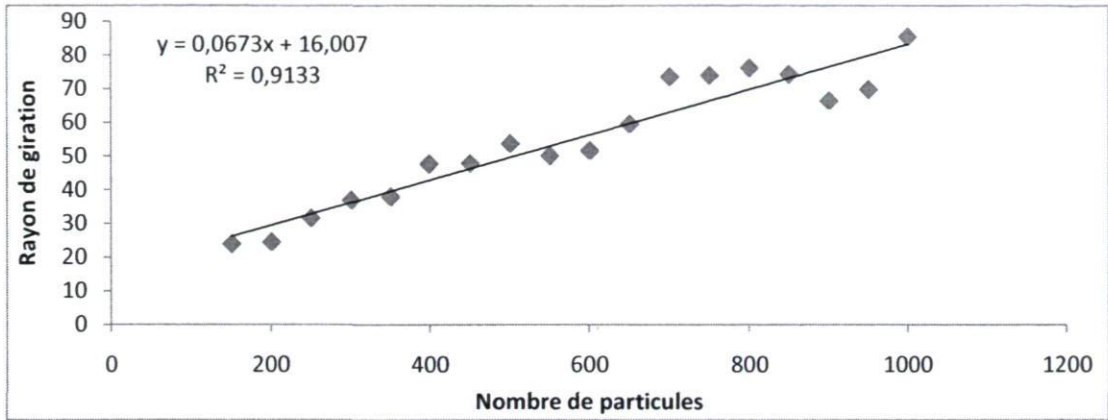


Figure 3.10 Graphique du rayon de giration en fonction du nombre de particules

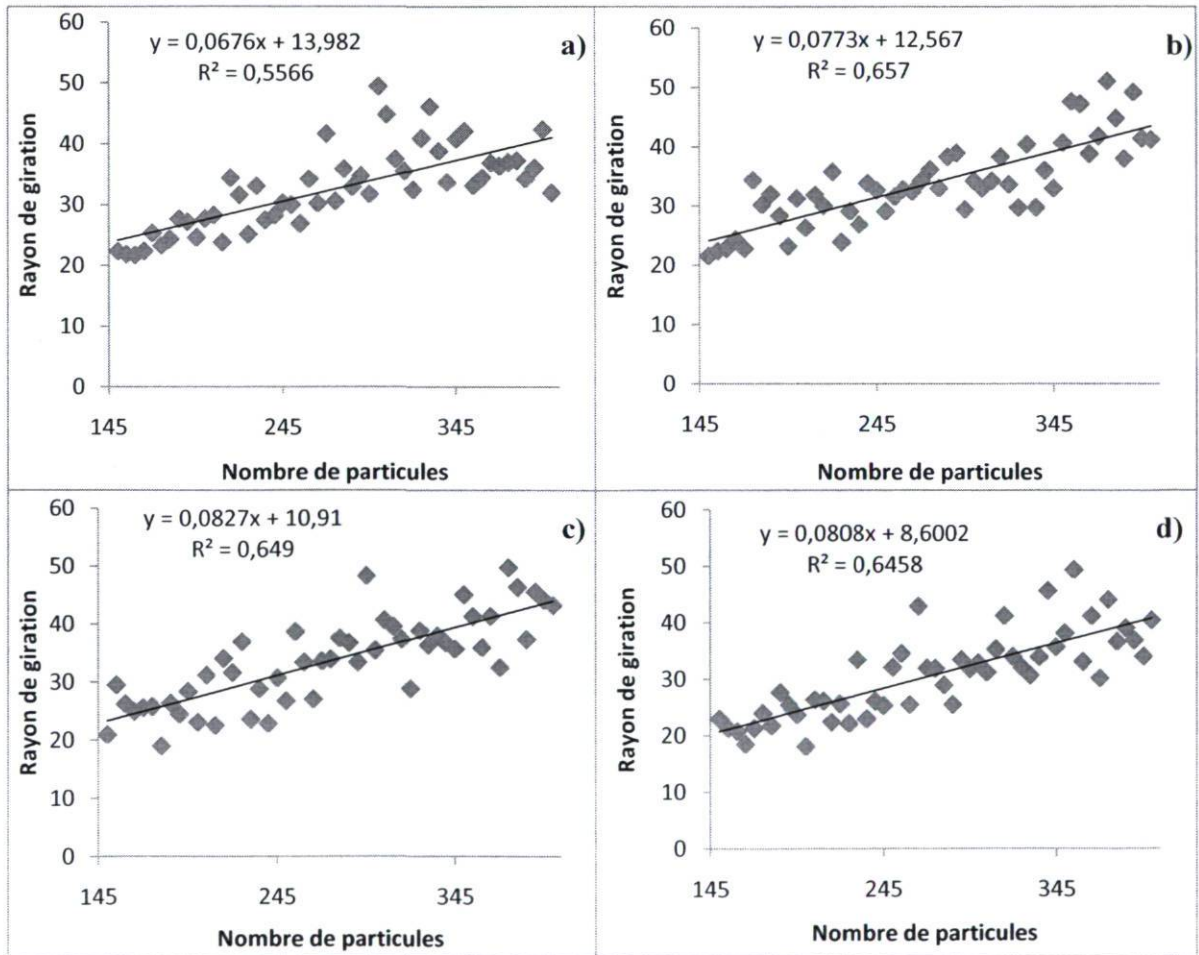


Figure 3.11 Graphiques du rayon de giration en fonction du nombre de particules a) Dimension de 200 b) Dimension de 300 c) Dimension de 400 d) Dimension de 600

Les excellentes corrélations obtenues par les figures 3.10 et 3.11 précédentes permettent de prédire, avec une certaine exactitude, les rayons de giration. L'analyse s'avère donc très utile lors d'approximation de rayon de giration en fonction de paramètres posés spécialement lorsque le nombre de particules devient plus élevé.

3.3.4 Porosité

Au sein des agrégats obtenus à partir de l'algorithme physique, le calcul de la porosité ou de la mesure du vide a été accompli. Il montre une relation entre celui-ci et la dimension de l'enceinte de sorte que plus on augmente la dimension de l'enceinte, plus la porosité augmente. Donc, en d'autres mots, le vide à l'intérieur d'un agrégat augmente selon l'espace dans lequel les particules se déplacent ou, en d'autres mots, selon la concentration de particules dans l'enceinte. Ceci s'explique encore par le fait que les agrégats sont plus compacts lorsque l'enceinte étudiée est plus restreinte.

150 particules			
Dimension	50	125	200
Porosité	0,7275	0,8035	0,8078
500 particules			
Dimension	100	250	400
Porosité	0,8041	0,8675	0,8753
1000 particules			
Dimension	150	375	600
Porosité	0,8358	0,8968	0,8974

Tableau 3.6 Porosité en fonction de la dimension de l'enceinte

3.3.5 Temps de simulation

À l'aide des simulations réalisées lors de l'analyse de l'influence du nombre de particules, un temps de simulation a été calculé pour chacun des agrégats. Le temps en question fait référence au temps qu'aurait pris un agrégat à se former en laboratoire et non le temps pris pour effectuer la simulation sur l'ordinateur. À partir du graphique du temps de simulation en fonction du nombre de particules (fig. 3.12), une courbe de tendance a été

tracée selon la méthode des moindres carrés. Cette pente a permis d'observer que le temps de simulation semble diminuer en fonction du nombre de particules.

Évidemment, pour une enceinte à valeur fixe, plus il y a de particules, plus les agrégats se forment rapidement. De cette manière, une plus grande surface de contact est disponible tôt en début de simulation ce qui favorise la construction d'agrégats de façon plus rapide.

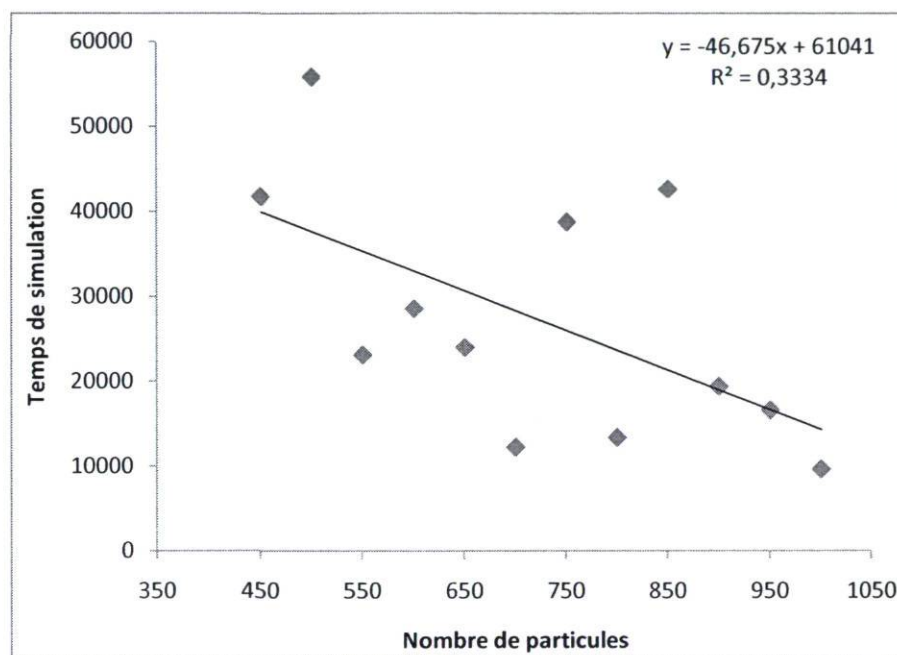


Figure 3.12 Graphique du temps de simulation en fonction du nombre de particules

3.3.6 Caractéristiques globales du modèle physique en 2 dimensions

L'algorithme physique développé a comme avantage de respecter les lois de la physique. Contrairement au modèle non physique, cet algorithme tient compte de la morphologie des agrégats lors des collisions donnant ainsi un caractère très réaliste aux simulations. De plus, les particules possèdent chacune une vitesse propre qui s'ajuste au cours du temps en fonction des collisions.

Donc, ces derniers avantages qui étaient déficients au sein du modèle non physique sont un ajout très important pour l'étude d'agrégations. Par contre, l'ajout de toutes ces fonctionnalités nuit à la rapidité de l'algorithme qui n'est pas des plus élevées. Malgré une bonne fluidité, l'algorithme physique est beaucoup plus lent que celui non physique, ce qui limite grandement le nombre de particules qui peut être inclus dans la simulation.

De plus, de petits détails techniques font en sorte que lors de la détection de particules, seulement les mouvements de translation sont soumis à la détection. De cette façon, il arrive parfois qu'un mouvement de rotation se produise et qu'une collision ne soit pas détectée. Ainsi, la détection se fait à l'itération suivante formant des agrégats où les particules se chevauchent (fig. 3.13). Heureusement, ce phénomène est peu fréquent et n'est pas aussi grave qu'il le laisse croire. Ce problème est surtout rencontré lors des simulations à faible nombre de particules et peut être réglé pourvu que le pas de temps posé initialement soit assez petit, ce qui est le cas pour les simulations réalisées.

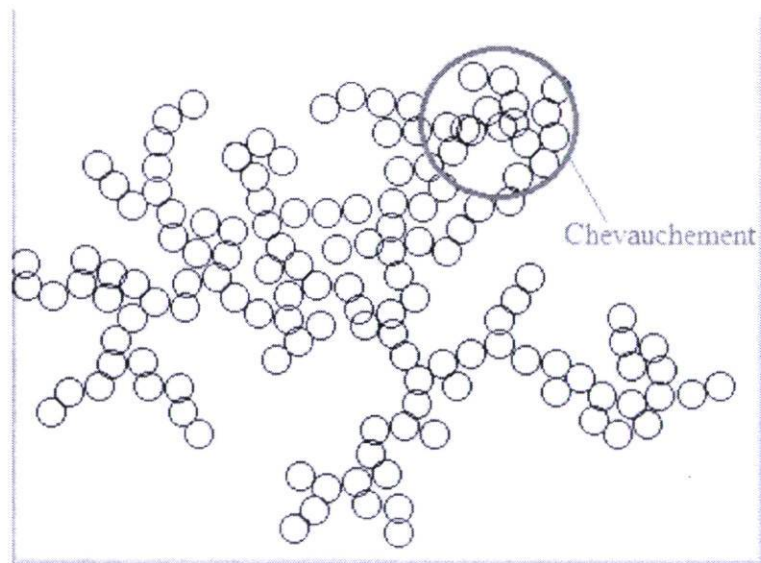


Figure 3.13 Erreur de simulation provoquant un chevauchement de particules

Enfin, les agrégats simulés n'ont pas de caractéristiques physiques fixes pour chacun des paramètres posés et c'est pourquoi une moyenne de plusieurs résultats est calculée. En outre, le facteur aléatoire de la distribution des agrégats et des vitesses fait en

sorte que des agrégats peuvent être de forme très différente selon les mêmes paramètres et c'est pour cette raison que le coefficient de détermination sur les graphiques n'est pas toujours très élevé. Par contre, la moyenne des résultats est capable de donner une bonne tendance globale des propriétés physiques en fonction des paramètres utilisés.

3.4 Algorithme physique avec probabilité d'agrégation

3.4.1 Influence de la probabilité d'agrégation

D'autres analyses se sont attardées sur l'influence de la probabilité d'agrégation pour ainsi être en mesure d'observer les phénomènes physiques qui entrent en jeu lors de collisions de particules. La probabilité d'agrégation permet ainsi de prendre en considération des paramètres qui seraient plus laborieux à introduire dans des algorithmes de simulation. Parmi ceux-ci, les forces qui lient les particules entre elles lors des collisions, la vitesse des agrégats et la forme des agrégats peuvent jouer un rôle à savoir si une agrégation a lieu ou pas.

Les nombreux résultats recueillis ont permis d'observer que le nombre de coordinations augmentait de façon inverse à la probabilité d'agrégation. Sur une possibilité de neuf modèles avec un nombre de particules et une dimension bien déterminée, le tableau 3.7 montre que seulement le modèle à 150 particules et une dimension de 200 n'est pas en accord avec les autres modèles. D'ailleurs, ces derniers montrent une tendance commune à propos du nombre de coordinations pour des probabilités de 25%, 50%, 75% et 100%.

De nombreuses autres analyses ont été effectuées notamment au sujet de la dimension fractale ou du rayon de giration, mais aucune conclusion convaincante n'a pu être obtenue.

	Probabilité :	25%	50%	75%	100%
Nombre de coordinations à 150 particules	Dimension : 50	2,3600	2,3483	2,2467	2,2483
	Dimension : 125	2,4107	2,2533	2,1920	2,1253
	Dimension : 200	2,1440	2,2107	2,2567	2,1173
Nombre de coordinations à 500 particules	Dimension : 100	2,3880	2,3045	2,2376	2,1912
	Dimension : 250	2,3664	2,2712	2,1727	2,1544
	Dimension : 400	2,3501	2,2471	2,1968	2,1576
Nombre de coordinations à 1000 particules	Dimension : 150	2,3792	2,2432	2,1992	2,1644
	Dimension : 375	2,3780	2,2827	2,1962	2,1284
	Dimension : 600	2,3941	2,2238	2,1920	2,1487

Tableau 3.7 Nombre de coordinations en fonction de la probabilité d'agrégation

3.4.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec probabilité d'agrégation

Cet algorithme, qui introduit la probabilité d'agrégation, a l'avantage d'être très simple, ce qui ne nuit pas à la vitesse des simulations. Par contre, il est très peu développé notamment en ne tenant pas compte des agrégats en présence ni des vitesses de ceux-ci dans l'environnement. Un modèle plus réaliste serait intéressant à étudier dans le futur.

3.5 Algorithme physique avec mouvement brownien

Les expériences accomplies en laboratoire et les simulations réalisées numériquement portent surtout sur des particules de l'ordre du nanomètre ou du micromètre. À cette échelle, le mouvement brownien des particules entre en jeu et c'est pourquoi une analyse des différentes variables qui caractérisent ce mouvement est discutée dans ce chapitre.

3.5.1 Influence du libre parcours moyen

Plusieurs simulations ont été réalisées en incluant un paramètre de libre parcours moyen pour pouvoir ainsi observer l'effet du mouvement brownien des particules. Ainsi, cinq valeurs de libre parcours moyen ont été sélectionnées et analysées pour cette partie de l'étude. Tel que mentionné précédemment dans la méthodologie, ces cinq valeurs sont posées selon le principe que plus le libre parcours moyen est petit, plus la probabilité de changer de direction est élevée. Dans cette optique, les valeurs de probabilités sélectionnées ont été de 0%, 25%, 33%, 50% et 75%.

Pour des valeurs identiques du nombre de particules et de dimension d'enceinte, les analyses ont clairement montré que les agrégats avec un faible libre parcours moyen sont nettement moins compacts que les agrégats avec un long libre parcours moyen. Cela a été observé en analysant la dimension fractale qui a tendance à diminuer lorsque le libre parcours moyen est aussi réduit. La même tendance a pu être mise en évidence avec le nombre de coordinations. Dans les tableaux qui suivent, plus la probabilité de changement de direction est élevée, plus le libre parcours moyen est faible.

Probabilité de changement de direction	0%	25%	33%	50%	75%
Nombre de coordinations	2,1576	2,2356	2,17196	2,16394	2,11603
Dimension fractale	1,3579	1,278	1,2211	1,2353	1,1814

Tableau 3.8 Résultats en fonction de la probabilité de changement de direction

De plus, avec les mêmes éléments posés précédemment, la forme générale des agrégats est nettement plus compacte (fig. 3.15). En outre, le rayon de giration augmente lorsque le libre parcours moyen des particules rétrécit (tableau 3.9). D'autres analyses portant sur le nombre de particules distribuées autour du centre de masse ont été menées pour ainsi mettre en évidence que les particules y étaient beaucoup plus concentrées dans des amas où les particules avaient des mouvements rectilignes.

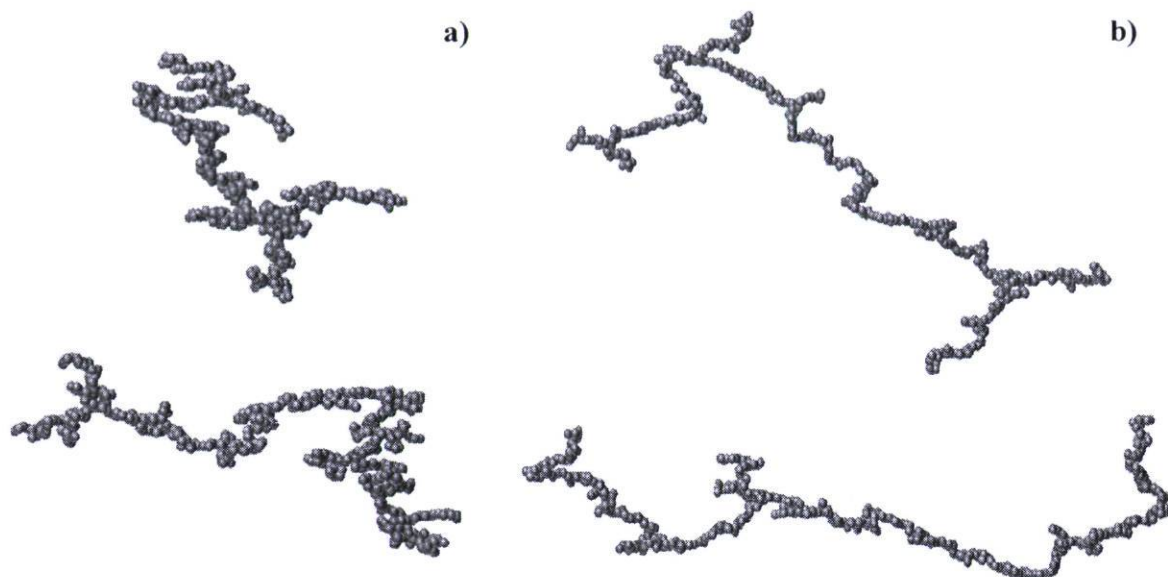


Figure 3.15 Agrégat en fonction du libre parcours moyen a) Libre parcours moyen long
b) Libre parcours moyen court

Probabilité de changement de direction	0%	25%	33%	50%	75%
Rayon de giration	49,4560	54,4709	65,5769	77,1285	96,6582

Tableau 3.9 Rayon de giration en fonction de la probabilité de changement de direction

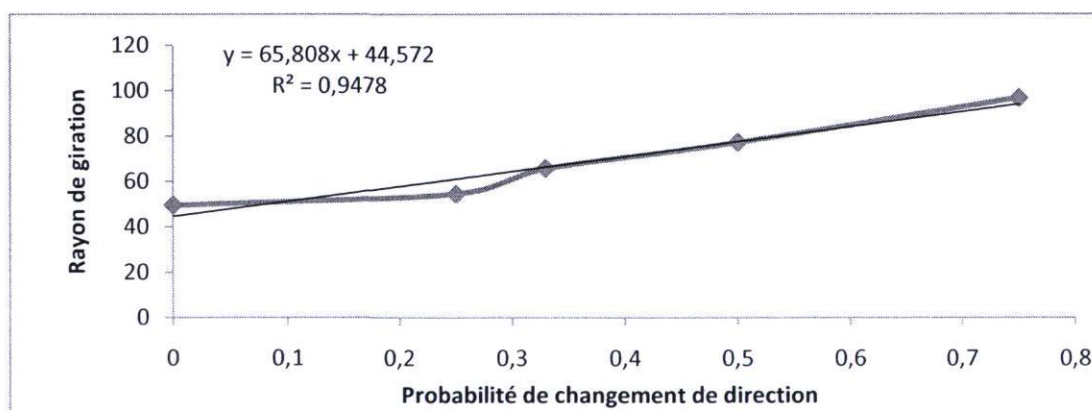


Figure 3.14 Graphique du rayon de giration en fonction de la probabilité de changement de direction

Des résultats semblables avaient été obtenus avec le modèle non physique. Le phénomène physique rencontré est le même. Les particules changeant de direction plus souvent ont plus de chance de s'agréger aux dendrites avant de se rendre au fond des fjords. De cette manière, les agrégats avec un libre parcours moyen élevé ont des dendrites plus fines et une densité plus faible.

3.5.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec mouvement brownien

La simplicité de l'algorithme fait en sorte que la rapidité des simulations n'est pas affectée par le phénomène brownien. Le caractère aléatoire a été introduit d'une manière très réaliste, mais est quand même limité. En effet, la trajectoire que peuvent prendre les particules est limitée à 4 directions en 2 dimensions et 6 directions en 3 dimensions pour les raisons expliquées dans la méthodologie. Malgré tout, le modèle reste solide et très fiable.

Étant donné l'aspect aléatoire rencontré pour ce type de simulation, l'analyse des résultats s'avère plus fastidieuse en raison du fait que le libre parcours moyen qui est fixé à une certaine valeur ne correspond pas exactement à celle-ci en pratique. Il serait intéressant d'avoir un suivi des déplacements pour ainsi avoir une vraie valeur de libre parcours moyen et avoir une analyse plus précise.

3.6 Algorithme physique avec puits de potentiel autour de chaque particule

Différentes théories portant sur la formation des planètes, à leurs stades primitifs, exposent des modèles dans lesquels des forces électriques ou magnétiques seraient entrées en jeu lors des agrégations. D'ailleurs, les agrégations qui avaient lieu étaient probablement produites à partir de particules possédant des charges électriques ou des dipôles magnétiques. L'analyse de cette sous-section porte sur l'influence qu'apporte la force en question lors des collisions entre particules ayant des puits de potentiel.

3.6.1 Influence de la force du puits de potentiel

L'ensemble des résultats obtenus a été réalisé à partir de sept valeurs de rayon de puits de potentiel. Il peut donc être supposé que plus le rayon de ce puits est élevé, plus sa force l'est aussi. Une légère tendance laisse voir que la dimension fractale ainsi que le nombre de coordinations ont tendance à diminuer en fonction de la force du puits de potentiel jusqu'à atteindre une certaine stabilité au bout d'un certain champ de force. Ce phénomène s'explique bien sachant qu'à partir d'une certaine valeur de rayon, l'effet du champ force reste le même en raison de la grosseur des particules et des agrégats en présence.

Force du puits de potentiel	0	2,5	10	20	40	60	100
Nombre de coordinations	2,1576	2,128483	2,0838	2,0925	2,0366	2,03918	2,02332
Dimension fractale	1,3579	1,3431	1,31952	1,27237	1,27352	1,26162	1,26792

Tableau 3.10 Résultats portant sur l'influence de la force du puits de potentiel

Ce phénomène s'apparente à celui observé lors de simulation avec le mouvement brownien, car lorsque les particules entrent dans un champ de force, ces dernières sont attirées vers l'agrégat en ligne droite. De cette façon, les particules auront tendance à s'agréger à la pointe des dendrites formant ainsi des agrégats beaucoup moins denses. Les figures suivantes montrent bien la différence de densité selon le puits de potentiel.

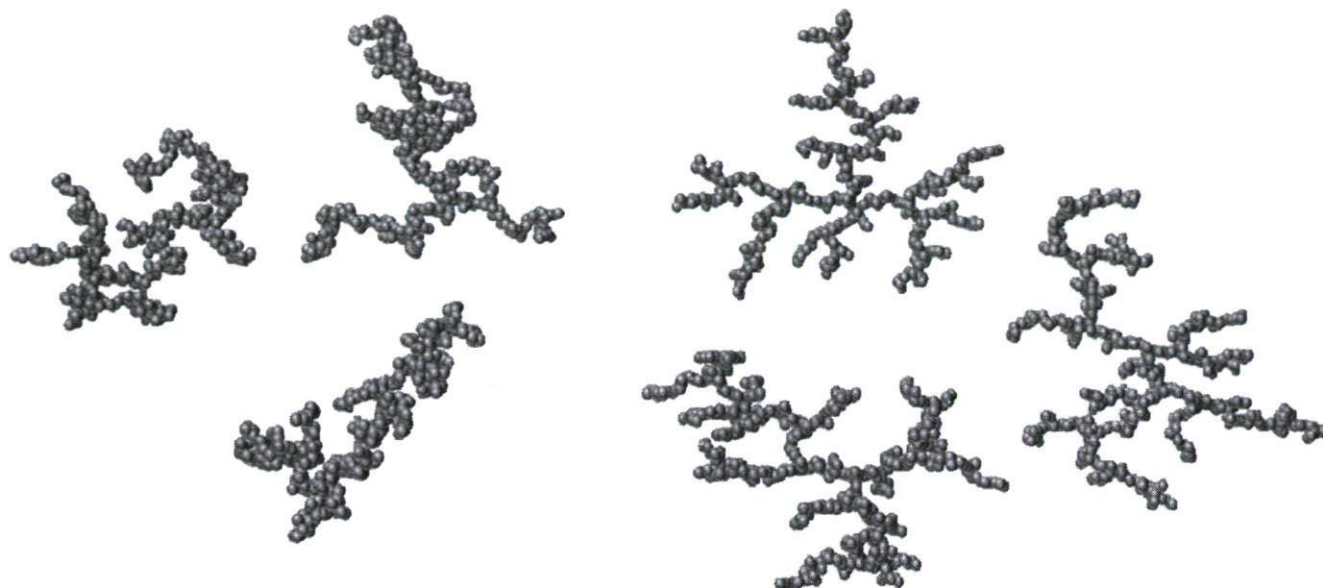


Figure 3.16 Agrégats simulés avec puits de potentiel a) Force du puits de potentiel faible b) Force du puits de potentiel élevée

3.6.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec puits de potentiel

Encore une fois pour cet algorithme, la rapidité de simulation n'est pas grandement influencée puisque la sous-routine, qui a été ajoutée au modèle physique de base, n'est pas très lourde et nuit de façon minime à la fluidité des simulations. Cette performance de vitesse se fait au détriment du réalisme de la simulation. En effet, les puits de potentiel sont créés à partir d'un rayon fixe autour des particules faisant en sorte de créer des puits de potentiels carrés qui ne sont pas représentatifs de ce qui est observé.

Pour être tangible physiquement, le modèle devrait tenir compte d'une force en $1/r^n$ où chaque particule aurait une influence sur toutes les autres dans l'enceinte. Évidemment, cela ralentirait considérablement les simulations et conduirait à une baisse significative du nombre de résultats.

3.7 Algorithme physique avec particules chargées et avec attraction seulement

Un dernier modèle a été réalisé à partir du modèle physique en deux dimensions dans lequel est intégré l'algorithme du puits de potentiel et une nouvelle routine permettant d'attribuer des charges électriques aux monomères. Par contre, ce modèle-ci ne tient compte que des particules de charges différentes où celles-ci sont attirées mutuellement.

3.7.1 Influence de la distribution des charges électriques

Différentes distributions de charges positives ou négatives ont été analysées avec des pourcentages de 0%/100%, 10%/90%, 25%/75% , 33%/66% et 50%/50%. L'analyse des résultats a été effectuée pour chacun des paramètres physiques, mais aucune conclusion convaincante n'a pu être obtenue en fonction des pourcentages de distribution des charges. Les agrégats obtenus ont sensiblement les mêmes caractéristiques que les autres agrégats observés dans un environnement neutre.

3.7.2 Caractéristiques globales du modèle physique avec charges électriques

Ce modèle hérite des avantages et des désavantages de l'algorithme physique en deux dimensions et de l'algorithme avec puits de potentiel puisqu'il découle directement de ceux-ci. Par rapport, aux autres modèles, celui-ci est l'un des plus faibles physiquement étant donné que de grosses approximations y sont effectuées notamment en tenant compte seulement des particules qui s'attirent mutuellement et en ne se tenant qu'à un puits de potentiel carré. C'est évidemment un algorithme qui devra être travaillé dans des travaux futurs.

3.8 Algorithme physique en trois dimensions

Enfin, un algorithme en trois dimensions a été conçu afin d'analyser l'effet d'une dimension supplémentaire aux propriétés physiques, mais aussi afin de décortiquer le phénomène d'agrégation en trois dimensions puisque c'est celui-ci qui est observé en laboratoire. En raison de sa plus grande complexité et de sa rapidité d'exécution, ce modèle n'a pas analysé le mouvement brownien et les puits de potentiel. Par contre, les mesures de densité de base ont pu être effectuées afin de caractériser la distribution de la matière dans un environnement tridimensionnel.

3.8.1 Particularité du modèle physique trois dimensions

À partir de deux concentrations de particules différentes en trois dimensions, les mêmes conclusions qu'en deux dimensions ont pu être tirées en ce qui concerne le nombre de coordinations. En effet, le nombre de coordinations a tendance à diminuer en fonction de la dimension de l'enceinte selon les deux cas qui ont été observés. De plus, le rayon de giration augmente en fonction de la dimension de l'enceinte telle qu'il était observé en deux dimensions. Ces deux dernières caractéristiques physiques ont été expliquées pour le modèle physique en deux dimensions et le phénomène en cause, dans le modèle en trois dimensions, est exactement le même.

Par la suite, des résultats ont été spécialement réalisés avec un nombre de particules et une concentration de matière identique pour des modèles en deux dimensions et en trois dimensions. Afin d'observer d'une façon optimale l'ajout d'une dimension aux simulations, celles-ci ont été réalisées avec un libre parcours moyen infini et une probabilité d'agrégation de 100%. L'analyse a permis d'observer que le nombre de coordinations diminue entre deux dimensions et trois dimensions. Bien que le nombre de coordinations maximum d'une particule sphérique soit plus élevé en trois dimensions, cela n'avantage pas le nombre de coordinations moyen dans un agrégat. En fait, la troisième dimension semble ne pas influencer grandement le nombre de coordinations, car l'agrégation se produit de la même manière.

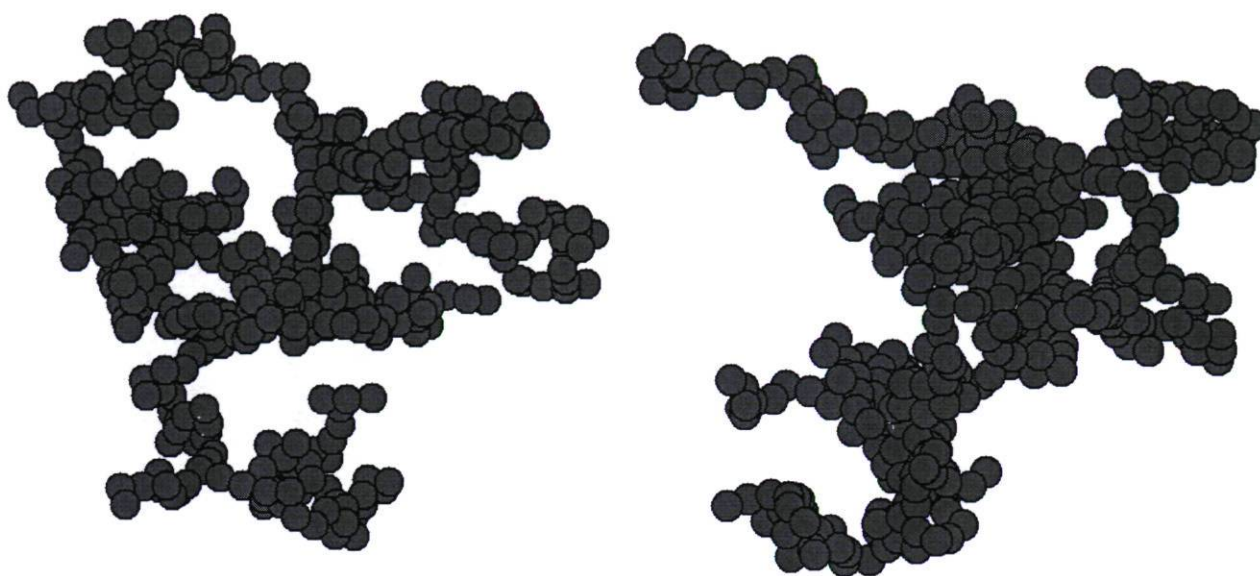


Figure 3.17 Agrégats obtenus avec un modèle en 3 dimensions

De plus, le rayon de giration calculé a mis en évidence la diminution de celui-ci lorsque le modèle physique passe à la troisième dimension. En effet, la matière semble se distribuer dans tout l'espace favorisant ainsi un rayon de giration plus petit lorsque la dimension augmente. L'ajout d'une dimension supplémentaire pour un même nombre de particules fait en sorte que les monomères s'agrègent de la même façon, mais en profitant de tout l'espace qu'offre cette dimension supplémentaire faisant ainsi chuter la grandeur du rayon de giration.

	2 dimensions	3 dimensions
	200 particules Dimension = 70	200 particules Dimension = 40
Nombre de coordinations	2,1820	2,1563
Rayon de giration	21,0894	12,0498

	2 dimensions	3 dimensions
	200 particules Dimension = 400	200 particules Dimension = 60
Nombre de coordinations	2,1631	2,1525
Rayon de giration	26,4599	14,3794

Tableau 3.11 Tableaux de comparaison entre les modèles à 2 dimensions et à 3 dimensions

3.8.2 Caractéristiques globales du modèle physique en 3 dimensions

Évidemment, ce modèle est celui qui physiquement est le plus près des agrégats obtenus en laboratoire. Il respecte aussi les lois de la physique et la conservation d'énergie, ce qui confère à l'algorithme une bonne crédibilité.

Par contre, l'ajout d'une troisième dimension ralentit les simulations, notamment en raison du fait que de nouvelles variables doivent être ajoutées multipliant ainsi le nombre de lignes de code dans l'algorithme. Le nombre de particules ainsi que les différents phénomènes physiques doivent donc être limités de manière à optimiser le temps de simulation et l'étude des agrégats en 3 dimensions.

Conclusion

Dans ce mémoire, les principaux objectifs étaient de créer de solides algorithmes numériques capables de simuler des agrégats similaires à ceux rencontrés dans la nature tout en effectuant ces simulations d'une manière le plus rapide possible. De plus, l'analyse des agrégats obtenus se devait d'être la plus rigoureuse possible afin de caractériser les propriétés physiques des agrégats d'une façon très détaillée. Dans l'ensemble, ces objectifs ont été atteints tout au long de ce mémoire.

Tout d'abord, ce travail s'est attardé à toute la théorie portant sur la simulation numérique d'agrégats fractals. En effet, les divers algorithmes numériques qui servent à étudier le phénomène d'agrégation de particule ont été présentés. La notion de fractale ainsi que les caractéristiques physiques des agrégats ont été très bien décrites afin de bien comprendre les analyses.

Par la suite, une méthodologie portant sur les différents modèles développés pour la présente étude a été présentée. Chaque modèle a bien été décrit de manière à pouvoir comprendre chaque subtilité de l'algorithme. De plus, les outils de calculs qui servent à l'analyse des agrégats ont bien été détaillés. Différents tests de simulations ont aussi permis de montrer à quel point les modèles conçus pouvaient être fiables. Des méthodes d'accélération d'algorithme ont aussi été exposées pour pouvoir comprendre par quelle mesure la rapidité des modèles pouvait être améliorée.

L'analyse de tous les résultats a ensuite été exposée en mettant l'accent sur l'influence des différents paramètres physiques. Ces derniers ont permis d'obtenir d'excellentes conclusions par rapport à chacun des modèles développés. En outre, les

points forts comme les faibles ont été mis en perspective pour pouvoir bien observer ce qui a été accompli avec chacun des algorithmes.

Tout au long du projet, les différentes étapes accomplies ont permis d'atteindre chacun des objectifs posés initialement. Tout d'abord, l'un des principaux défis était d'écrire des algorithmes de simulations permettant d'obtenir des agrégats dans un environnement de microgravité. Cet objectif a été accompli. En effet, les modèles numériques ont étudié l'effet de paramètres physiques comme le nombre de particules, la dimension de l'enceinte, la probabilité d'agrégation, le mouvement brownien, la force d'un puits de potentiel et la distribution de charge parmi des particules.

De plus, dans la mesure où il a été possible d'abaisser le temps de simulation, diverses techniques ont été implantées. Ainsi, un algorithme de cellules a permis d'améliorer la rapidité de tous ces algorithmes permettant par le fait même d'obtenir beaucoup plus de résultats. Ensuite, d'autres mesures permettant d'ajuster le pas de temps tout au long d'une simulation ainsi que d'arrêter une simulation une fois les particules agrégées ont permis d'obtenir des résultats de façon plus rapide. Le projet a donc permis de mettre à l'essai des techniques d'accélération d'algorithme de façon convaincante. Au cours du projet, les différents algorithmes élaborés ont permis d'observer des temps de simulation variables dans lesquels le modèle d'agrégation non physique s'avère être un bon compromis lors de simulations avec un très grand nombre de particules.

Enfin, l'analyse des agrégats provenant des différents modèles a permis de vraiment qualifier les différentes formes et densités des agrégats produits. Ainsi, le nombre de coordinations des particules ainsi que la dimension fractale s'avèrent être de plus en plus petit au fur et à mesure que la concentration des particules diminue. Ces dernières propriétés ont aussi montré qu'elles étaient influencées par le libre parcours moyen, notamment en diminuant lorsque le libre parcours moyen diminue. De plus, les analyses des puits de potentiel autour des particules ont montré que plus la force de ce puits était élevée, plus le nombre de coordinations et de dimension fractale des amas décroissait.

Le rayon de giration des amas s'est montré un paramètre fort intéressant qui a été très bien étudié au cours du projet. Ce dernier a montré qu'il variait proportionnellement avec la dimension de l'enceinte et inversement au libre parcours moyen. La mesure du vide (ou de la porosité) a aussi été analysée permettant d'observer une variation proportionnelle à la grosseur de l'enceinte. Enfin, le temps de simulation des agrégats a montré que celui-ci était plus court lorsque la concentration de particules augmentait.

Dans le futur, la compréhension complète du phénomène d'agrégation passera fort probablement par la simulation des forces qui entrent en jeu lors de l'agrégation, notamment les forces électriques et magnétiques. De plus, l'augmentation de façon significative du nombre de particules sera un pas vers l'avant très important dans les recherches. Ce mémoire est encore une fois une brique de plus dans l'édification de la théorie entourant l'agrégation fractale en milieu de microgravité.

Références

1. Slobodrian, R.J., *Fractal cosmogony : similarity of the early Universe to microscopic fractal aggregates*, Chaos, Solitons and Fractals, v 23, n 3, February 2005. p. 727-279
2. Peebles, P.J.E., *The fractal galaxy distribution*, Physica D, v 38, n 1-3, September 1989. p. 273-278
3. C. Dominik, J. Blum, J. N. Cuzzi and G. Wurm, *Growth of dust as the initial step toward planet formation*, Protostars and protoplanets V, B. Reipurth, D. Jewitt and K. Keil (eds.), 2007. p. 783-800
4. Goldreich, P., Ward, W.R., *The formation of planetesimals*, Astrophysical Journal, vol 183, 1973. p. 1051-1062
5. Kodicek, D., *Mathematics and physics for programmers*, Hingham : Charles River Media, 2005. 608 p.
6. Vicsek, T., *Fractal Growth Phenomena*, World Scientific, 1992. 488 p.
7. Blum, J. et al., *Dust in space*, Europhysics News, v.39, May-Junes 2008. p. 27-29
8. R.J. Slobodrian, C. Rioux and J.-C. Leclerc, *Microgravity Research and Applications in Physical Sciences and Biotechnology, Proceedings of the First International Symposium*, Sorrento, Italy, 2000. 779-786 p.
9. P. Deladurantaye, C Rioux and R.J Slobodrian, *Effect of gravity on the growth of fractal aggregates*, Chaos, Solitons & Fractals , 1997. 1693–1708 p.
10. Slobodrian, R.J., Deladurantaye, P., Rioux, C., *Multiple fractal aggregation and simulation*, Chaos, solitons and fractals, v 11, n 7, June 2000. 1021-1024 p.
11. Rioux, C., Potvin, L., Slobodrian, R.J., *Particle-particle aggregation with $1/r^2$ forces in reduced gravity environments*, Physical Review E (Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics), v 52, n 2, August 1995. 2099- 2101 p.

12. Gauthier, M., Cossette, M., Rioux, C., Slobodrian, R.J., *Real and simulated fractal aggregates*, Chaos, solitons and fractals, v 3, n 6, Novembre-December 1993. 687-694 p.
13. Gabrielli, A., *Statistical physics for cosmic structures*, New York : Springer, 2005. 424 p.
14. Dominik, C., Tielens, A.G.G.M., *The Physics of Dust Coagulation and the Structure of Dust Aggregates in Space*, Astrophysical Journal, v 480, n 1, 1997. p. 647
15. Mourad, G., Rioux, C., Slobodrian, R.J., *Electrical conductance of metallic fractal aggregates*, Chaos, Solitons and Fractals, v 37, n2, July 2008, p. 496-500
16. Meakin, P., *A historical introduction to computer models for fractal aggregates*, Journal of Sol-Gel science and technology 15, 1999. p. 97-117
17. Meakin, P., *Off lattice simulations of cluster-cluster aggregation in dimension 2-6*, Physics Letters. A, v 107, no 6, 1985. p. 269-272
18. Meakin, P., *Effect of cluster trajectories on cluster-cluster aggregation : A comparison of linear and Brownian trajectories in two- and three-dimensional simulations*, Physical Review A, v 29, no 2, February 1984. p. 997-999
19. Witten, T.A., Sander, L.M., *Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon*, Phys. Rev. Lett. 47, 1981. p. 1400-1403
20. Mandelbrot, B., *The fractal geometry of nature*, Freeman, San Francisco, 1982
21. Cossette, M., *Étude d'agrégation par une method d'évaporation-condensation dans un gaz rare*, Mémoire de maîtrise. Université Laval, novembre 1992. 78 p.
22. Gauthier, M., *Étude de la formation des agrégats fractals produits par évaporation-condensation*, Mémoire de maîtrise. Université Laval, septembre 1994. 138 p.
23. Deladurantaye, P., *Agrégation fractale en gravité réduite simulée*, Mémoire de maîtrise. Université Laval, mars 1997. 149 p.
24. Wada, K., et Al, *Numerical simulation of dust aggregate collision. 1. Compression and disruption of two-dimensional aggregate*, Astrophysical journal, 661, may 2007. p. 320-333
25. Matthews, L.S., Hyde, T.W., *Charging and growth of fractal dust grains*, IEEE transactions on plasma science, vol 36, no 1, February 2008. p. 310-314

26. Perry, J.D., Matthews, L.S., *Dipole-dipole interactions of charged-magnetic grains*, IEEE transactions of charged-magnetic grains, vol 38, no 4, April 2010. p. 792-797
27. Blum, J., *Dust agglomeration*, Advances in physics, vol 55, nos 7-8, November-December 2006. p. 881-947
28. Reif, F., *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill Science / Engineering/Math, June 1965. 651 p.
29. Forrest, S.R., Witten, T.A., *Long-range correlations in smoke-particle aggregates*, J. Phys. A : Math. Gen., May 1979.
30. Meakin, P., *Two-dimensional simulations of cluster-cluster aggregation and deposition onto a surface*, Journal of colloid and interface science, vol 104, no 1, 1985. p. 282-284
31. Meakin, P., *Diffusion-limited surface deposition in the limit of large anisotropy*, Physical review A, vol 33, no 3, March 1986. p. 1984-1989
32. Meakin, P., *Structure and dynamics of reaction-limited aggregation*, Phys. Rev. A, vol 36, no 11, December 1987. p. 5498-5501
33. Pickover, C.A., *The math book : From Pythagoras to the 57th dimension*, Sterling Publishing Company, Inc., 2009. 310 p.
34. Steel, R. G. D. and Torrie, J. H., *Principles and Procedures of Statistics*, New York: McGraw-Hill, 1960. 187 p.
35. Doyon, J., Rioux, C., *Modeling aggregation of dust monomers in low gravity environments*, 38th COSPAR Scientific Assembly, July 2010. 3 p

