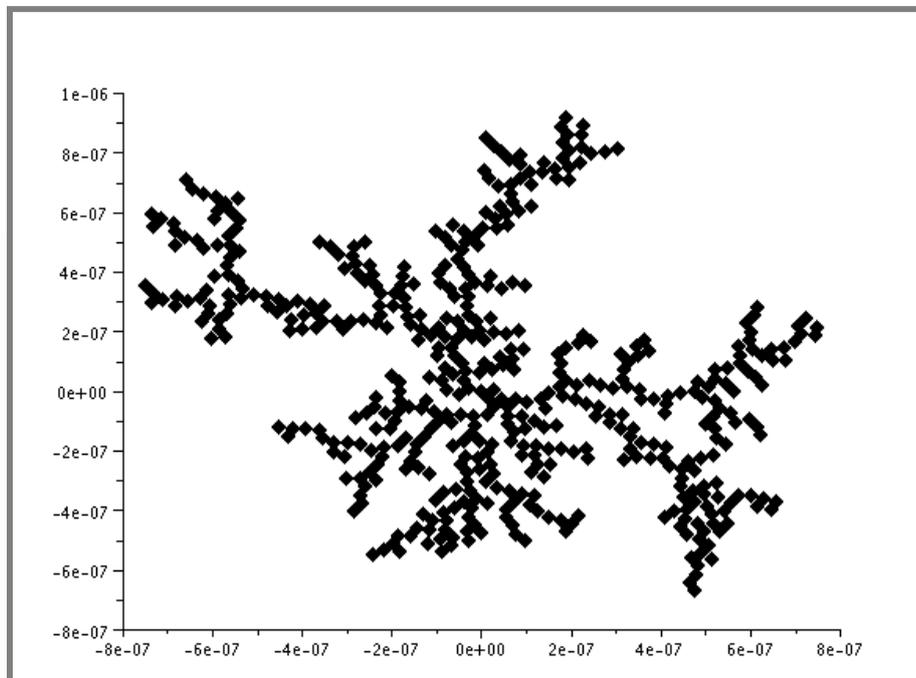


Génération d'un code d'agrégation fractale basée sur le mouvement brownien



Etudiants :

Jean Michel BART

Fanny MAHEU

Hélène SIRVAIN

Célia BARTHELEMY

Alexandre ROUTIER

Louis YAMAZAKI

Enseignant-responsable du projet :

Jérôme YON

Date de remise du rapport : 22/06/09

Référence du projet : STPI/P6-3/2009 – 006

Intitulé du projet : **Génération d'un code d'agrégation fractale basée sur le mouvement brownien.**

Type de projet : **Modélisation d'un phénomène physique.**

Objectifs du projet :

L'objectif de ce projet était de générer un code d'agrégation permettant l'élaboration « virtuelle » d'agrégats et de vérifier leurs propriétés fractales.

Plus précisément nous avons cherché à répondre à ces 6 points :

- **Faire un bilan bibliographique permettant l'explication du mouvement brownien ;**
- **Définir les principales règles : libre parcours moyen, diffusion en fonction de la taille, de la température du milieu...**
- **Illustrer par une application numérique 2D le sens de la diffusion particulaire à partir de la marche aléatoire ;**
- **Ecrire sous scilab un code d'agglomération permettant la génération (dans le temps) d'agrégats à partir d'une répartition initiale aléatoire des particules primaires ;**
- **Faire un programme permettant leur visualisation ;**
- **Vérifier que la loi fractale suivante est vérifiée avec N le nombre de sphérules par agrégat, D un diamètre caractéristique de l'agrégat, d_f et α la dimension et le préfacteur fractal et D_p le diamètre des particules primaires.**

TABLE DES MATIÈRES

1. Introduction	5
2. Méthodologie / Organisation du travail	6
3. Partie théorique	7
3.1. Mouvement brownien	7
3.2. Le libre parcours moyen	8
3.3. Explication des formules	9
3.3.1. Le nombre de Knudsen	9
3.3.2. La force de traînée	10
3.3.3. Le coefficient de diffusion	11
3.4. Les différentes méthodes numériques de modélisation	11
3.5. Méthode choisie	13
3.5.1. Hypothèse	13
3.5.2. Organigramme du programme	13
4. Travail réalisé et analyse	15
4.1. <i>La loi fractale</i>	15
4.2. Expériences	15
4.2.1. Introduction	15
4.2.2. <u>Expérience 1</u> : Libre parcours moyen constant	16
4.2.3. <u>Expérience 2</u> : Variation du libre parcours moyen	18
4.2.4. <u>Expérience 3</u> : Dimension fractale et morphologie	20
4.2.5. Conclusion	21
5. Conclusions et perspectives	22
6. Bibliographie	23
7. Annexes	24
7.1. Listings des programmes réalisés	24

1. INTRODUCTION

Dans le cadre de l'UV de P6-3 proposée aux élèves de STPI2 de l'INSA de Rouen, nous avons été amenés à étudier et à modéliser la création de fractale à partir du mouvement brownien de petites particules.

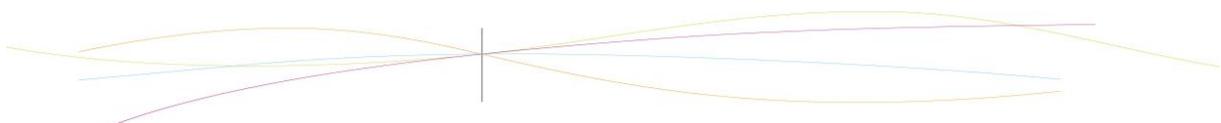
Dans la vie de tous les jours, des fractales approximatives sont facilement observables dans la nature. Ces objets ont une structure identique sur une échelle étendue, mais finie on peut par exemple citer les nuages, les flocons de neige, les montagnes, le chou-fleur ou le brocoli, et les vaisseaux sanguins. Ces observations scientifiques ont de nombreux domaines d'application comme la biologie, la médecine, l'astronomie ou encore l'économie, c'est pourquoi l'étude de ces structures a été pour nous un sujet intéressant mais surtout surprenant.

Dans un premier temps, nous nous sommes fixés l'objectif de réaliser un programme modélisant la création de fractales en 2D, puis d'étudier les différentes modélisations obtenues en fonction de certains paramètres comme la température, la pression et le rayon des particules.

Nous avons réfléchi à des objectifs supplémentaires :

- modifier le programme afin de considérer une 3ème dimension ;
- revoir certaines de nos hypothèses afin de se rapprocher encore plus de la réalité physique.

Nous avons considéré certains de ces objectifs mais nous n'avons pas eu suffisamment de temps pour y apporter une réponse.



2. MÉTHODOLOGIE / ORGANISATION DU TRAVAIL

Pour réaliser ce projet, nous avons dû organiser notre équipe de travail, afin de répartir convenablement les rôles de chacun, en formant une équipe cohérente et coopérative, en d'autres termes : efficace.

C'est ainsi que nous avons pu tout d'abord organiser notre travail en découpant notre temps imparti par le projet comme ci-dessous :

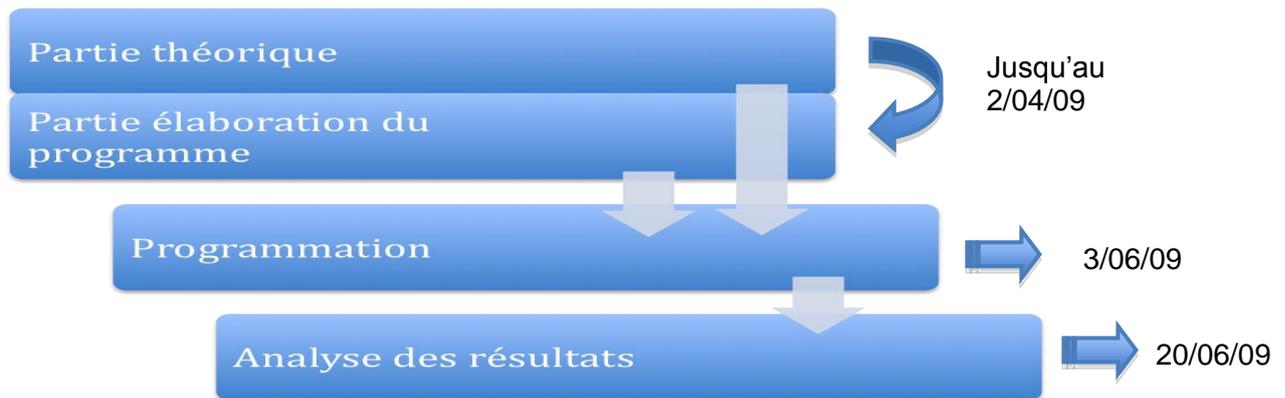
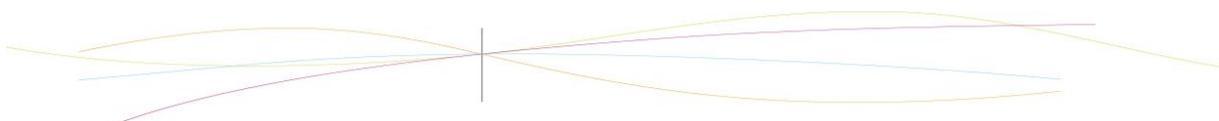


figure 1 : Répartition du temps

Par la suite, dans chaque phase nous avons divisé notre groupe de travail, afin d'augmenter l'efficacité de travail. En effet, certains d'entre nous suivent le cours de I3, c'est donc ces personnes qui ont privilégié la partie « programmation » tandis que d'autres suivant le cours de P8 ont préféré la partie « explication physique ». Durant la réalisation de notre projet, personne ne s'est réellement imposé en tant que chef de projet, chacun a mené sa tâche individuellement ou par groupe de deux. Nous avons aussi su garder un esprit de groupe en s'intéressant aux tâches que les autres effectuaient.

Malheureusement, comme à deux semaines du temps imparti pour le projet le programme ne fonctionnait pas, nous avons pu rentrer en phase de mesures que très tard. Ceci s'explique sûrement par la répartition des méthodes qui ont été codées par différentes personnes et qui n'ont pas été débuggées au fur et à mesure.

Concernant les réunions de travail, nous avons dû prendre en considération les différents emplois du temps de chacun des membres de l'équipe, afin de trouver des créneaux disponibles pour tout le monde. Et il est vrai que cela n'a pas été facile, du coup très peu de réunions en dehors du créneau de P6 - 3 ont été faites avec le groupe au complet. Cependant, nous nous tenions au courant de nos avancées au fur et à mesure par mail, de sorte à toujours être au courant d'où en était le projet.



3. PARTIE THEORIQUE

3.1. Mouvement brownien

Le mouvement brownien ou mouvement aléatoire de particules plongées dans un fluide a été tout d'abord découvert en 1827 par celui qui lui donna son nom par la suite : le botaniste Robert Brown. Ses études sur les plantes et fleurs l'ont amené à étudier les différents pollens. En observant ces pollens il a constaté que chaque particule est animée d'un mouvement erratique incessant. A partir de cette observation, les botanistes expliquent ce mouvement par le fait que le pollen est un être vivant. A l'époque, il croyait avoir découvert la « molécule primitive » responsable de la vie. Pour appuyer cette théorie, ils réalisent des observations sur de la matière non organique et constatent que le mouvement est toujours bel et bien présent. On en déduit donc que ce phénomène s'applique à tout type de particules (du moment qu'elles sont très petites) et relève plus de la physique que de la biologie, mais les études dessus ne sont pas poussées plus loin.

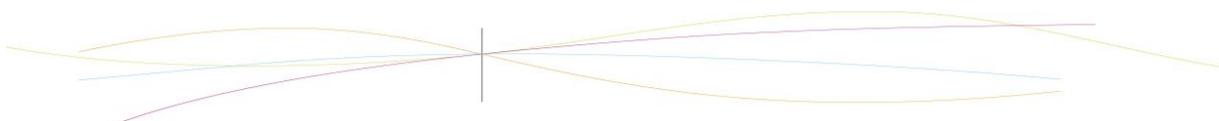


Pourtant beaucoup de chercheurs se sont penchés sur cette découverte : en 1958, V. Regnault tente d'expliquer le phénomène en mettant en cause la lumière incidente arrivant sur les particules. Un peu plus tard, en 1870, il a été proposé que le mouvement brownien était la conséquence de forces électriques diverses. Ce n'est qu'en 1905 que le physicien Albert Einstein publie des articles qui comme on le sait déjà vont révolutionner la physique en général. Il consacre un des ces articles au « *mouvement de particules en suspension dans un fluide au repos impliqué par la théorie cinétique moléculaire de la chaleur* ».

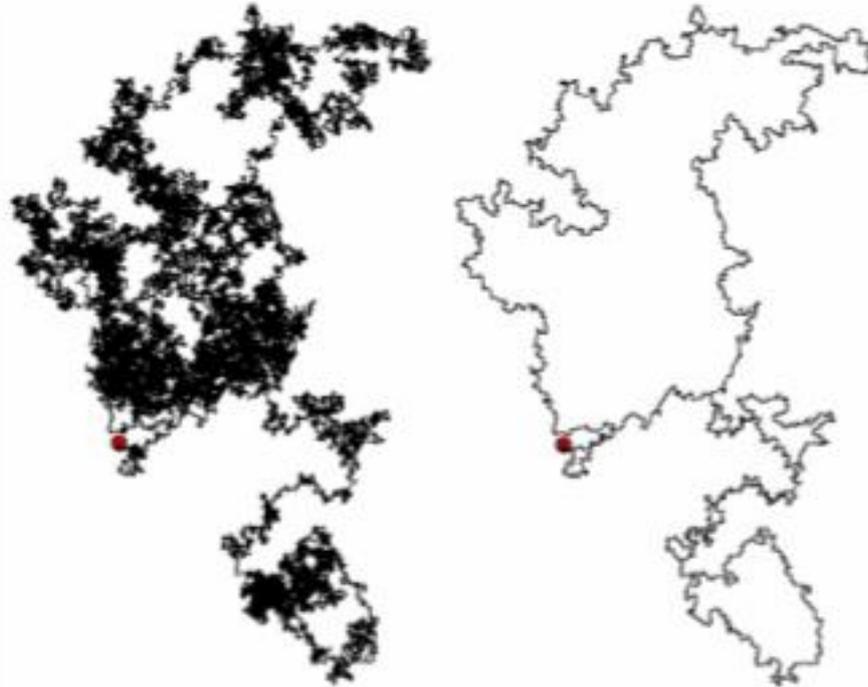
Albert Einstein (1879-1955) a établi une théorie atomique du mouvement brownien constituée de deux parties. La première est une approche mathématique du phénomène. Il s'agit d'une équation différentielle de diffusion d'une particule brownienne en suspension dans un milieu fluide. La deuxième, plus physique, établit des liens entre la vitesse mesurable de diffusion particulaire et d'autres quantités physiques (Nombre d'Avogadro, ...).

Dans sa théorie Einstein affirme pour déterminer la diffusion d'une particule brownienne, il n'est nécessaire que de connaître sa vitesse initiale ainsi que la grandeur et la direction des impulsions que celle-ci reçoit en un laps de temps donné. Cependant, une particule brownienne subit environ 1001 collisions par seconde, donc l'influence de sa vitesse initiale disparaît en un temps très court du fait de ces collisions moléculaires. De plus, Einstein avait tout d'abord envisagé de décrire les collisions de chaque molécule du fluide sur la particule brownienne, mais du fait du nombre trop important de ces molécules, il préféra une approche réaliste beaucoup plus adaptée.

Pour décrire ce mouvement, il faut envisager un petit volume de forme arbitraire. Le nombre de particules contenues en son sein varie en fonction du temps (flux de molécules entrantes et sortantes). Il apparaît que le flux de particules entre deux points varie proportionnellement à la différence de concentration des molécules entre ces deux points. Ce coefficient de proportionnalité correspond au coefficient de diffusion D , déterminable expérimentalement. Enfin, du fait du nombre important de collisions particulières par secondes il apparaît que la particule brownienne ne connaît pas de grandes différences de longueur parcourue entre deux collisions. On arrive donc au calcul d'un « libre parcours moyen » faisant intervenir le coefficient de diffusion D et la vitesse moyenne de la particule brownienne $\langle u \rangle$.



Aujourd'hui le mouvement brownien est la description mathématique aléatoire d'une particule de grande taille immergée dans un fluide. Cette particule ne doit être soumise à aucune interaction autre que les chocs avec les particules constitutives du fluide. La description physique la plus élémentaire est basée sur deux caractéristiques : d'une, entre deux chocs successifs, la « grosse » particule se déplace en ligne droite et à vitesse constante et de deux, sa vitesse est accélérée lors de chaque choc (avec une autre particule ou avec une paroi).



3.2. Le libre parcours moyen

Comme il a été dit précédemment, il est nécessaire de calculer le libre parcours moyen ainsi que la vitesse thermique moyenne afin d'étudier le mouvement brownien.

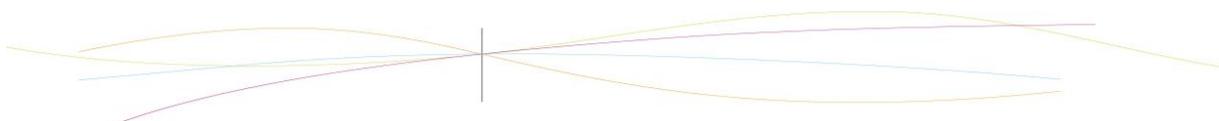
Tout d'abord, qu'est-ce que le libre parcours moyen? C'est la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions. Cette distance dépend de beaucoup de paramètres tels que la température, la pression, le diamètre de la particule, la viscosité dynamique du gaz, etc. Le calcul du libre parcours moyen est assez complexe et on l'obtient de la manière suivante :

Tout d'abord, le libre parcours moyen (λ) exprimé en mètres est fonction de la diffusion de l'agrégat (D) ainsi que de sa vitesse moyenne (U)

eq 1.
$$\lambda = \frac{8 * D}{\pi * \bar{U}}$$

La diffusion de l'agrégat (D) dépend elle-même de la température (T) exprimée en Kelvin, de la mobilité mécanique (B). On note K_b la constante de Boltzmann qui vaut $1,38 * 10^{-23} \text{ N.m.K}^{-1}$.

eq 2.
$$D = K_b * T * B$$



Ensuite, on peut calculer la mobilité mécanique grâce à la formule suivante avec les paramètres suivants : le coefficient de correction de Cunningham (Cc), La viscosité dynamique du gaz dans les conditions de pression et de température ($\eta(T,P)$) en Pascal-seconde ainsi que le rayon de la particule (Dp) en mètres.

eq 3.
$$B = \frac{Cc(Dp)}{3 * \pi * \eta(T,P) * Dp}$$

La viscosité dynamique du gaz s'exprime de la manière suivante :

eq 4.
$$\eta(T,P) = \eta_r * \left(\frac{T_r + S}{T + S}\right) * \left(\frac{T}{T_r}\right)^{\frac{3}{2}}$$

Il faut préciser que Tr représente la température de référence exprimée en Kelvin, S la constante de Sutherland qui elle aussi est exprimée en Kelvin et η_r la viscosité dynamique du gaz à la température Tr. Quand a ce qui concerne le coefficient de Cunningham, on le calcule de la manière suivante :

eq 5.
$$Cc(Dp) = 1 + \frac{2 * \lambda}{Dp} * \left[\alpha + \beta * \exp\left(-\gamma * \frac{Dp}{2 * \lambda}\right) \right]$$

Les constantes α , β et γ ont pour valeurs respectives 1,142 0,558 et 0,999 qui sont les constantes de Baron et Willeke.

Enfin, pour calculer la vitesse thermique moyenne de l'agrégat notée U ou \bar{U} , il suffit d'appliquer le formule suivante :

eq 6.
$$\bar{U} = \sqrt{\frac{8 * K_b * T}{\pi * m}}$$

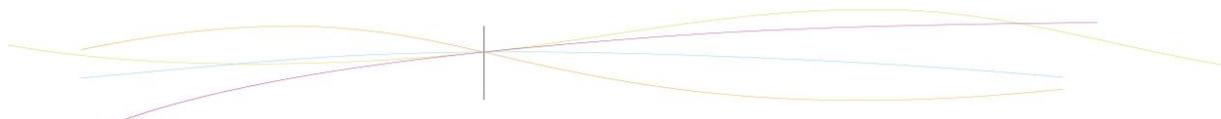
Si l'on compile toutes ces formules, il est désormais possible de calculer le libre parcours moyen, distance qui va permettre de nous éclairer dans notre étude du mouvement brownien.

3.3. Explication des formules

La finalité de cette partie est d'expliquer le raisonnement qui aboutit aux formules usitées dans les programmes du projet. En effet, il nous est nécessaire de calculer le libre parcours moyen dans notre programme d'agrégation, or comme vous avez pu le constater ce calcul est laborieux. En raison d'une trop grande complexité, certaines formules n'ont pas pu être démontrées ou seulement en partie.

3.3.1. Le nombre de Knudsen

Lorsque l'on considère des particules dans un gaz, celles-ci sont bombardées en continu par les molécules du gaz. Selon la taille de ces particules, on peut définir différentes approximations afin de faciliter les calculs. C'est à cette fin qu'a été défini le nombre dit de Knudsen ou K_n , il correspond au rapport du libre parcours moyen du gaz sur le diamètre de



la particule. On entend par « libre parcourus moyen » en général, la distance parcourue par une molécule ou une particule entre deux collisions consécutives.

eq 7.
$$Kn = \frac{\lambda}{Dp}$$

On peut distinguer trois différentes approximations basées sur la valeur du nombre de Knudsen :

- Si $Kn \ll 1$, cela signifie que le diamètre de la particule est très grand devant le libre parcourus moyen des molécules du gaz. Il se produit donc une infinité de collisions, c'est ce que l'on appelle le régime continu.
- Si $Kn \gg 1$, cela signifie que le diamètre de la particule est très petit devant le libre parcourus moyen parcouru par les molécules du gaz. Le nombre de collisions est discret, nous sommes en régime moléculaire libre.
- Si Kn prend les valeurs intermédiaires suivantes : $0,1 < Kn < 10$ [24], nous sommes en régime de transition.

3.3.2. La force de traînée

On cherche ici à déterminer la force qui s'oppose aux déplacements de la particule dans le gaz, cette force est dite force de traînée. Nous allons d'abord nous situer en régime continu. La formule de Stokes-Einstein définit la force de traînée de la façon suivante :

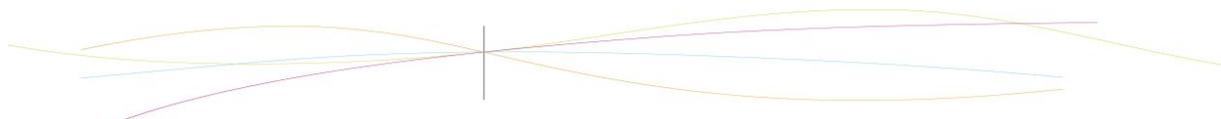
eq 8.
$$F_{traînée\ c,sph} = 3\pi\eta\nu D$$

Afin de pouvoir appliquer cette loi au régime moléculaire libre, il faut ajouter un facteur de correction dit de Cunningham. En effet, la représentation physique n'est plus la même car nous ne nous trouvons plus dans le cas d'un fluide continu mais dans un gaz composé de molécules discrètes. Le coefficient de correction de Cunningham est défini de la façon suivante :

eq 9.
$$Cc(Dp) = 1 + \frac{2 * \lambda}{Dp} * \left[\alpha + \beta * \exp\left(-\gamma * \frac{Dp}{2 * \lambda}\right) \right]$$

On place ce coefficient au dénominateur de telle façon que plus le diamètre est grand par rapport au libre parcourus moyen plus le coefficient tendra vers 1 c'est-à-dire vers la force de traînée en régime continu, tandis que plus le diamètre sera petit par rapport au libre parcourus moyen du gaz plus la force de traînée va diminuer.

eq 10.
$$F_{traînée} = \frac{3\pi\eta\nu D}{Cc(D)}$$



3.3.3. Le coefficient de diffusion

L'origine de la formule du coefficient de diffusion ne sera pas expliquée dans ce dossier étant trop complexe. Nous allons donc de suite passer à la formule du coefficient de diffusion défini par la loi de Stokes-Einstein :

$$\text{eq 11.} \quad D = \frac{kT}{6\pi\mu_g R}$$

Cette formule correspond à nouveau à un régime continu, il faut donc rajouter le coefficient de correction de Cunningham vu précédemment de telle façon que si le diamètre est petit, la diffusion augmente tandis que si le diamètre augmente on se rapproche du régime continu :

$$\text{eq 12.} \quad D = \frac{KTC_c(R)}{6\pi\mu_g R}$$

Grâce aux outils exposés précédemment nous avons été en mesure de mieux saisir les tenants et les aboutissants de la formule de libre parcours moyen :

$$\text{eq 13.} \quad \lambda = \frac{8 * D}{\pi * \bar{U}}$$

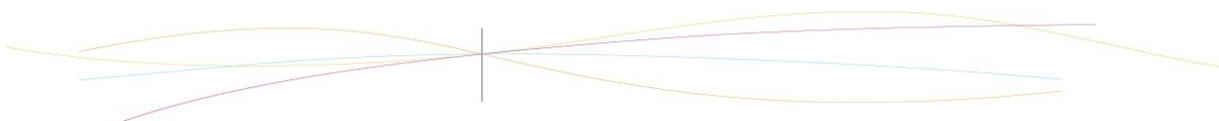
Avec la vitesse thermique moyenne de l'agrégat, qui représente la température sur la température sur la masse de l'agrégat, on en déduit que pour une température donnée la vitesse va diminuer lorsque la masse augmente.

$$\text{eq 14.} \quad \bar{U} = \sqrt{\frac{8 * K_b * T}{\pi * m}}$$

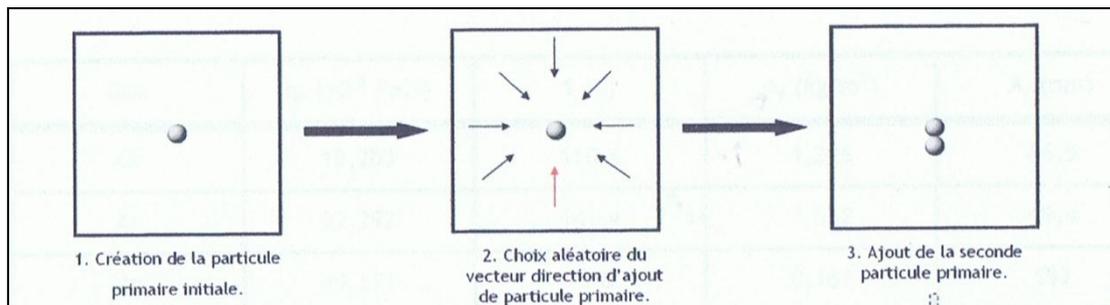
On peut déduire de cette formule que plus le coefficient de diffusion augmente plus le libre parcours moyen augmente et que si la vitesse moyenne de l'agrégat diminue le libre parcours moyen augmente également.

3.4. Les différentes méthodes numériques de modélisation

Comme nous l'avons dit précédemment, l'agrégation est un phénomène consistant à former des structures macroscopiques à partir de particules, de molécules ou d'agrégats plus petits. Lors de notre mise en route de projet, il nous est apparu que plusieurs méthodes d'agrégation existaient. En effet, quatre modélisations majeures ont déjà été mises en œuvre lors de travaux de recherches. Tout d'abord il faut différencier les agrégations dites de type « *particle-cluster* » (particule-amas) des « *cluster-cluster* » (amas-amas). La première fait évoluer une particule qui peut venir se coller à l'agrégat (amas), tandis que la seconde ne se compose que d'amas de particules de tailles voisines. Ensuite la première méthode utilisée fut une « *approche balistique* » puis un modèle de DLA ou « *diffusion limited aggregation* » (diffusion limitée par l'agrégation).



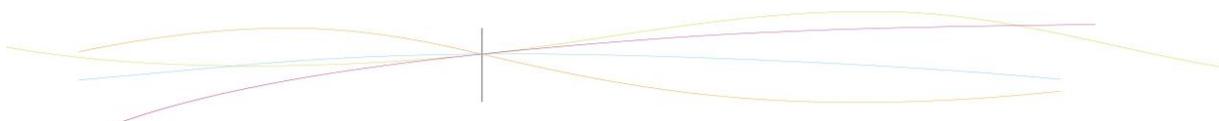
Dans le cadre de l'approche balistique, le processus consiste à faire évoluer la particule (ou amas de particules) librement suivant une droite dans l'espace. Dès que cet élément libre rencontre l'agrégat, il s'y colle (voir figure ci après). Dans le cadre d'une approche balistique, le type d'agrégation peut être aussi bien particule-cluster (BPA : Ballistic Particle-Cluster Aggregation ou agrégation particule-amas balistique) que cluster-cluster (BCA : Ballistic Cluster-Cluster Aggregation ou agrégation amas-amas balistique). Cette modélisation ne correspond à aucun phénomène naturel. En effet, dans la nature, aucune trajectoire ne peut suivre une droite, il y a toujours des forces qui modifient son allure. Cependant, il présente l'avantage de comprendre les liens entre nature du milieu dans lequel trempent les particules et trajectoires de ces dernières. Ce modèle fut très utilisé dans le monde de l'étude des agrégations.



La première évolution de l'approche balistique fut l'approche DLA. Ce modèle porte un tel nom puisque les particules suivent un chemin aléatoire qui peut être assimilé à une simulation de la diffusion au niveau moléculaire. Dans cette approche, il s'agit de particules qui viennent se fixer sur un agrégat fixe, elles ne peuvent pas se coller entre elles. Cependant, ce modèle présente quelques limites facilement imaginables. En effet, dans la nature, deux particules peuvent très bien se coller entre elles si elles se rencontrent même si elles ne font pas partie de l'agrégat. De plus, l'agrégat peut très bien être mobile et venir lui-même se coller aux particules ou à d'autres agrégats. Cependant, ce modèle a l'avantage de permettre de visualiser le concept de mouvement brownien et d'agrégation sans nécessiter des connaissances très poussées dans le domaine.

Une autre modélisation basée sur la DLA fut mise en place. La DLCA (Diffusion Limited Cluster-Cluster Aggregation ou agrégation amas-amas limitée par la diffusion) est une évolution de la DLA qui se révèle plus réaliste que cette dernière. En effet, les particules sont distribuées aléatoirement dans le volume considéré. Elles sont toutes animées de mouvements indépendants dans toutes les directions, ces mouvements imitent assez bien le mouvement brownien. Lorsque deux particules entrent en collision, leur collage est irréversible et elles forment ainsi un nouvel agrégat. Deux agrégats peuvent également rentrer en contact et former une nouvelle structure de taille supérieure. Cette modélisation s'arrête quand il n'y a plus de particules libres dans le volume, c'est-à-dire quand l'agrégat contient toutes les particules initialement introduites.

Enfin, il existe également un autre type d'agrégation : la RLCA (Reaction Limited Cluster-Cluster Aggregation ou agrégation amas-amas limitée par réaction). Cette RLCA ressemble beaucoup à la DLCA, hormis le fait qu'un nouveau paramètre est mis en jeu. En effet, la probabilité que deux agrégats (ou particules) en mouvement brownien se rencontrant se collent est désormais liée à l'avancement de la réaction.



Il est important de signaler le fait, que quelque soit le type de modélisation choisie, l'agrégation devra suivre une loi fractale.

3.5. Méthode choisie

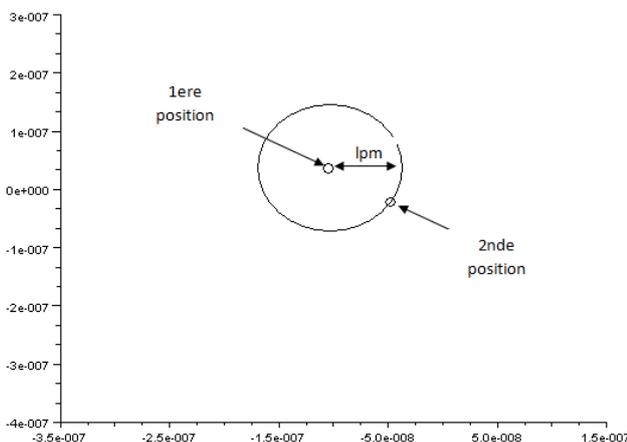
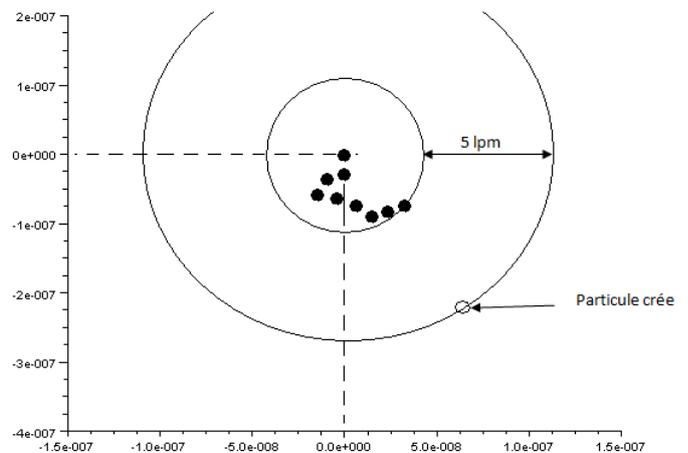
3.5.1. Hypothèse

Pour notre programme, nous sommes partie d'un certain nombre d'hypothèses. La première est que la particule centrale est fixe au centre du repère. Les particules dont la position vari aléatoirement sont bombardées une à une. Nous avons aussi décidé de travailler avec une pression, une température, et un rayon fixe, définie au départ par l'utilisateur. Le libre parcours moyen est donc déterminé au début du programme.

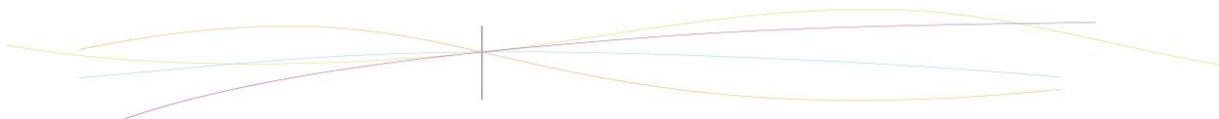
3.5.2. Organigramme du programme

Pour mieux comprendre comment la modélisation du phénomène d'agrégation des particules a pu être possible, il est tout d'abord important de connaître l'approche par laquelle nous avons décidé d'aborder le problème. Dans cette partie, nous mettrons donc en parallèle le déroulement du phénomène physique avec le fonctionnement de notre programme en 2D. On pourra ainsi mettre en évidence les difficultés auxquelles nous avons dû faire face afin de rendre la modélisation la plus proche possible de la réalité.

Dans un premier temps, la particule doit être créée et placée (*creationPosition*) dans une zone de l'espace qui n'influencera pas la formation de l'agrégat (constitué d'une seule particule au début du programme), qui comme on le sait, ne cesse de grossir. La première position de chacune des particules créées dépendra donc de la surface occupée par l'agrégat. On cherche donc la particule de l'agrégat la plus éloignée de l'origine, on calcule cette distance et on y rajoute 5 libres parcours moyens (voir ci-contre).

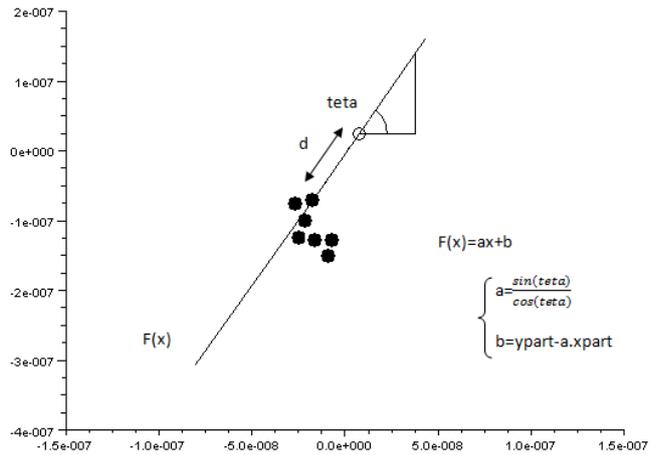


Une fois la particule placée, celle-ci doit désormais se déplacer (*deplacementUneParticule*). Or on sait qu'une particule doit s'avancer d'un libre parcours moyen dans une direction prise au hasard à chacune des étapes de son déplacement. La position suivante de la particule se situera donc sur un cercle centré sur sa position précédente ayant un rayon égal au libre parcours moyen. Elle vérifiera donc l'équation de ce cercle avec un angle téta pris au hasard.



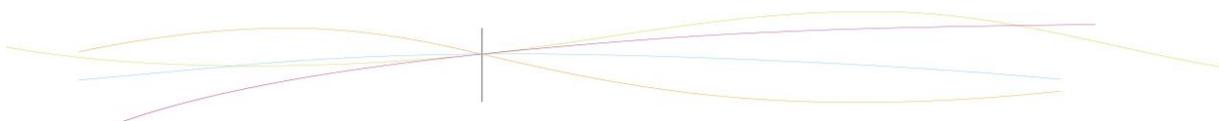
Lors de la programmation, nous avons admis qu'il était impossible que deux particules en mouvement se rencontrent. On ne gère ainsi le déplacement que d'une seule particule à la fois jusqu'à ce qu'elle en rencontre une autre appartenant à l'agrégat ou bien que celle-ci s'en aille beaucoup trop loin du domaine considéré. C'est l'un des points faibles de notre modélisation puisqu'il diverge de la réalité dans le sens où il n'est capable de créer qu'un seul agrégat. Il sera donc impossible d'observer la rencontre de deux agrégats.

Lors du déplacement de la particule, notre programme doit constamment vérifier qu'elle n'entre pas en contact avec l'agrégat. Dans le cas contraire, on doit faire en sorte qu'elle s'y rajoute. Pour vérifier si une particule doit se coller à l'agrégat lors d'un de ses déplacements, on étudie tout d'abord la distance qui les sépare, si elle est inférieure à la somme du libre parcours moyen et au diamètre d'une particule ($<d$) alors on regarde si la particule se dirige vers l'agrégat. Pour ce faire on effectue un test sur chacune des particules de l'agrégat. Dans le cas où l'une d'elles vérifie l'équation de la droite décrivant cette direction (la combinaison des deux revient au calcul d'une équation polynomiale du second degré), on colle la particule en mouvement.



Le programme assure aussi le calcul du libre parcours moyen. Il s'effectue grâce à la température, la pression et le rayon de la particule. On peut ainsi faire varier certains paramètres et observer des changements de comportement directement observable sur le programme (voir partie suivante concernant l'interprétation des résultats).

La modélisation du phénomène d'agrégation que nous avons effectué en 2D respecte le caractère aléatoire du phénomène physique. Grâce aux recherches effectués par les physiciens, notre programme a pu correspondre avec la réalité puisqu'il se base sur une valeur qui en moyenne peut se retrouver dans le déplacement de toutes les particules : le libre parcours moyen. Bien qu'il ne prenne pas en compte la formation de plusieurs agrégats en même temps, nous verrons dans la partie suivante que la géométrie de l'agrégat reste en accord avec les phénomènes physiques.



4. TRAVAIL RÉALISÉ ET ANALYSE

4.1. La loi fractale

Le but de notre projet était double, tout d'abord modéliser des particules ayant un mouvement brownien ensuite de chercher à savoir si l'agrégat résultant serait de nature fractale ou non. Afin de vérifier et de déterminer la nature fractale de l'agrégat on va introduire la formule suivante:

$$N = \alpha * \left(\frac{D}{D_p}\right)^{df}$$

Avec N: nombre de particules de l'agrégat

α : préfacteur fractal

D: diamètre caractéristique de l'agrégat

D_p : diamètre des particules

df: dimension fractale

Dans notre cas, N et D sont connus, il a donc fallu calculer le diamètre caractéristique de l'agrégat. Nous avons pris la distance maximale entre les particules de l'agrégat pour valeur de D_p .

Des deux inconnues df et α , seule la dimension fractale nous intéresse car elle caractérise la compacité de l'agrégat tandis que le préfacteur fractal est généralement considéré comme un paramètre secondaire. Notre modélisation étant en 2D, si df approche de 1 on devrait avoir un agrégat de type linéaire tandis que si le df s'approche de 2, on devrait avoir un agrégat plus dense en surface. Afin de récupérer le df, nous avons appliqué le logarithme népérien à cette formule afin d'obtenir une fonction affine, en effet N est une

fonction de $\frac{D}{D_p}$ si on fixe $x = \frac{D}{D_p}$ on obtient:

$$\ln(N(D)) = \ln(\alpha) + df * (\ln(D) - \ln(D_p))$$

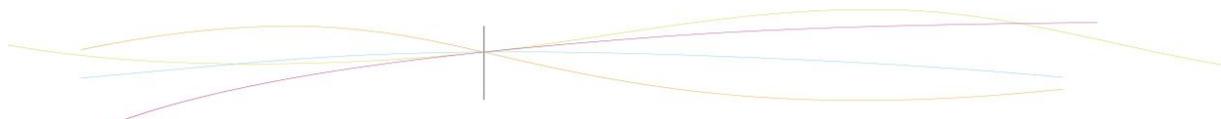
$$\Leftrightarrow \ln(N(D)) = \ln\left(\frac{\alpha}{(D_p)^{df}}\right) + df * \ln(D)$$

En traçant cette fonction dans un plan log/log, on observe que l'on a effectivement une fonction affine, ce qui confirme la nature fractale de l'agrégat. La seconde étape était de déterminer le coefficient directeur de cette droite afin de récupérer la dimension fractale, nous avons donc utilisé la fonction de régression linéaire de Scilab.

4.2. Expériences

4.2.1. Introduction

Maintenant que nous savons trouver la dimension fractale de l'agrégat. Nous allons tenter de déterminer ce qui influence réellement la valeur de la dimension fractale. A priori dans notre programme, deux variables seulement peuvent influencer sur la valeur de la dimension fractale: il s'agit premièrement de l'angle téta qui détermine l'angle de la droite sur laquelle va se déplacer une sphérule donnée et deuxièmement du libre parcours moyen. L'angle téta étant déterminé aléatoirement l'on ne peut pas jouer dessus (sinon ce ne serait



plus du mouvement brownien!) pour déterminer ce qui va faire varier la dimension fractale. Il ne reste donc que le libre parcours moyen.

Afin de faire varier le libre parcours moyen, nous avons deux leviers possibles: tout d'abord jouer sur la température ou alors de jouer sur le rayon des sphérules. En effet, il était inutile jouer sur la pression qui dépend étroitement de la température.

4.2.2. Expérience 1 : Libre parcours moyen constant

Nous avons d'abord décidé de choisir une valeur de libre parcours moyen que l'on pouvait retrouver en paramétrant le programme différemment. Cette valeur a été fixée en tâtonnant à 100nm et l'on travaille pour cette première expérience à 300 particules. On peut retrouver cette valeur dans un premier temps, à une température de 1000°C et un rayon de 15nm pour les sphérules et dans un deuxième temps à une température de 500°C et un rayon 5nm.

Notre première constatation concerne la nature fractale de l'agrégat qui est confirmée par l'allure de droite affine de la loi fractale expliquée ci-dessus:

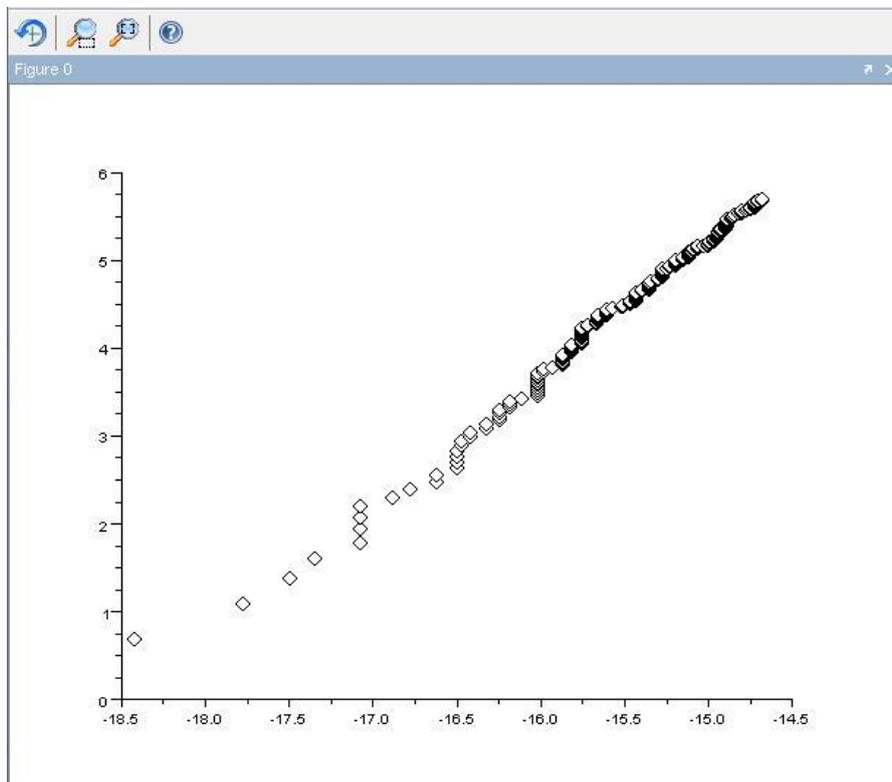
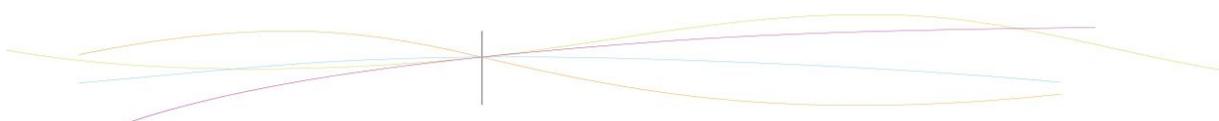


Illustration 1: Loi fractale: T=500°C, rayon=5nm

Voici maintenant les valeurs des dimensions fractales dans ces deux cas et pour des séries de 11 tests chacun:

T=1000°C rayon=15E-9	T=500°C rayon=5E-9
1,574805	1,544849

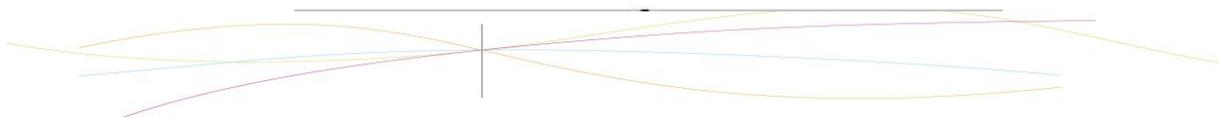
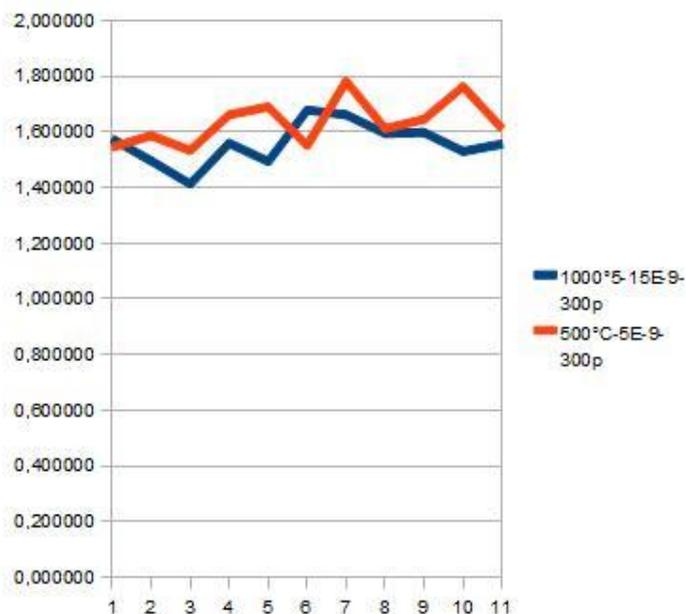


1,495831	1,586209
1,412563	1,533109
1,558796	1,660915
1,493567	1,689949
1,678099	1,551266
1,661399	1,781081
1,594144	1,611556
1,597439	1,644978
1,529517	1,762829
1,556117	1,611218

Nous avons ensuite travaillé sur ces valeurs afin de sortir 2 moyennes et les écarts-types afin de se faire une idée de la variation de la dimension fractale au travers de ces deux séries de tests:

Moyenne	1,5592979	1,6343599
Ecart-type	0,08	0,08

Les valeurs des écarts-types sont les mêmes et cela prouve donc que la dimension fractale évolue d'une façon similaire autour de sa moyenne dans les 2 cas. Cependant on peut voir que les moyennes sont différentes d'environ 0,07 points. Nous ne pouvons pas encore déterminer à ce stade si cette variation révèle quelque chose de déterminant. Mais en traçant un graphique des 2 séries de tests, on peut supposer que cette variation de moyenne est négligeable:



Nous avons donc besoin maintenant de vérifier ce que donne la variation du libre parcours moyen sur la dimension fractale, pour savoir si les variations de moyenne que l'on a pu constater dans notre première expérience sont bien négligeables.

4.2.3. Expérience 2 : Variation du libre parcours moyen

Pour cette expérience, nous avons fixé le rayon de la particule à 15nm puis fait varier la température. Sur un échantillon de 500 particules, nous obtenons pour T=500°C et 1000°C les résultats suivants pour 10 tests :

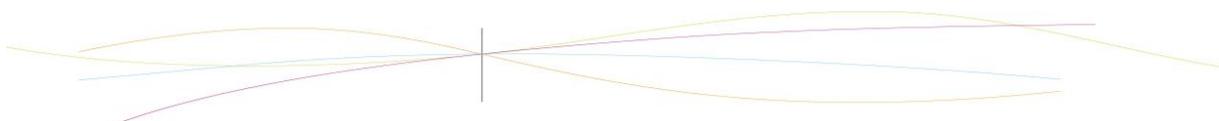
T=1000°C rayon=15E-9	T=500°C rayon=15E-9
1,55448	1,42546
1,52748	1,39064
1,38980	1,42530
1,63731	1,48734
1,54638	1,39648
1,54513	1,33723
1,48445	1,41740
1,58378	1,60654
1,49241	1,50812
1,43707	1,49823

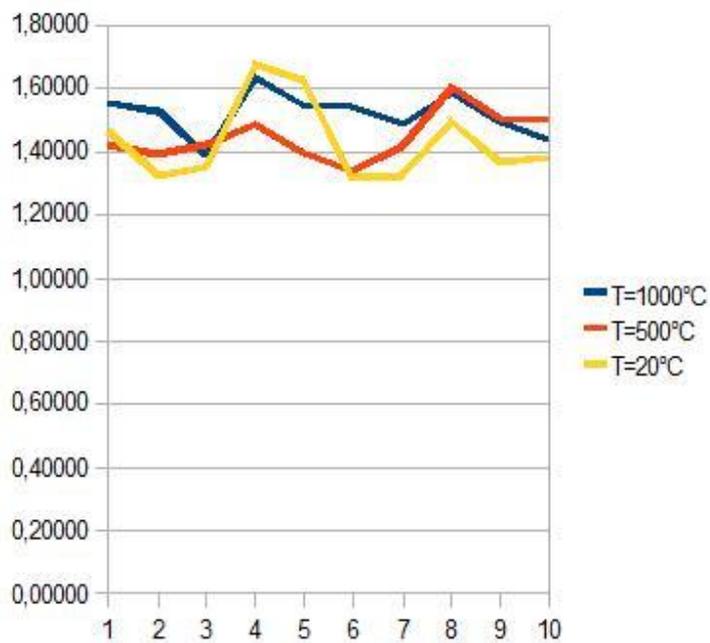
On calcule alors les moyennes et les écarts-types associés suivants :

Moyenne	1,52	1,45
Écart-type	0,05	0,05

A nouveau, nous trouvons les mêmes valeurs concernant les écart-types. En ayant travaillé sur un échantillon de 500 particules, on remarquera que l'écart-type est moins important que pour le même test mais à 300 particules mais aussi que la dimension fractale est plus petite en moyenne pour 500 particules. Nous obtenons à nouveau une différence de 0,07 pour la dimension fractale. Cependant, si l'on calcule les libres parcours moyens, nous avons :

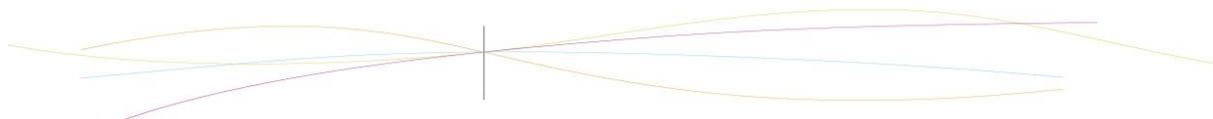
- 63,86nm pour 500°C
- 100nm pour 1000°C





Les libres parcours moyens étant assez proches, nous allons réitérer l'expérience avec T=20°C pour un libre parcours moyen associé à 25,33nm, c'est-à-dire nettement plus petit cette fois-ci. Nous obtenons les résultats suivants :

T=1000°C	T=500°C	T=20°C
1,55448	1,42546	1,46470
1,52748	1,39064	1,32466
1,38980	1,42530	1,35431
1,63731	1,48734	1,67652
1,54638	1,39648	1,62590
1,54513	1,33723	1,31513
1,48445	1,41740	1,32614
1,58378	1,60654	1,49823
1,49241	1,50812	1,36846
1,43707	1,49823	1,38115



Moyenne :	1,51983	1,44927	1,43352
Écart-type :	0,05	0,05	0,15

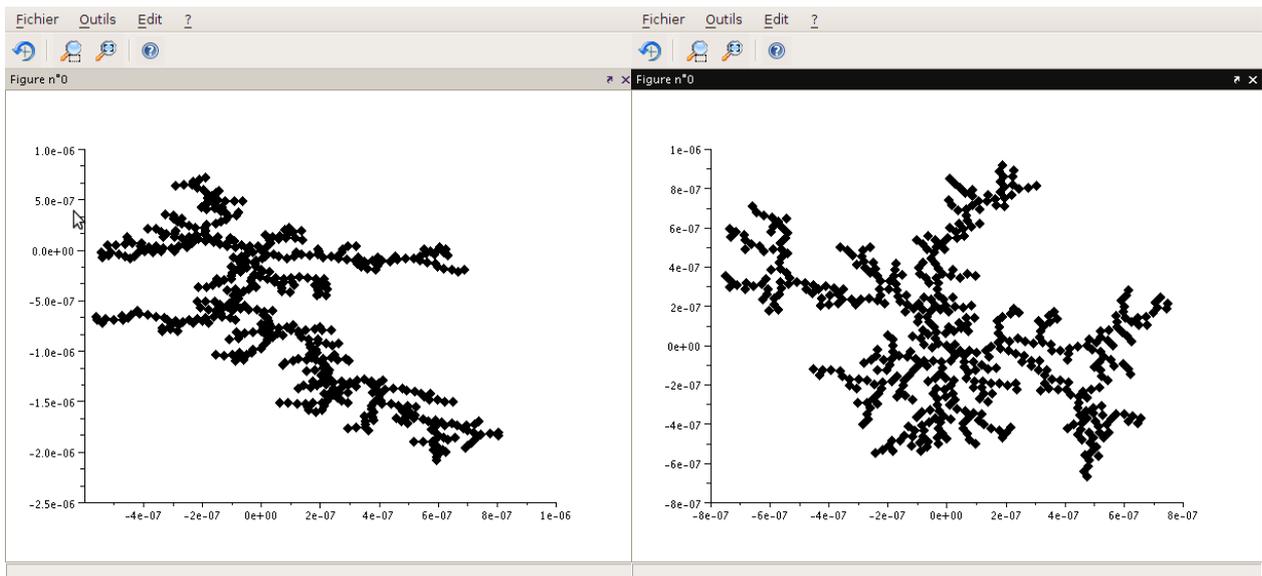
A $T=20^{\circ}\text{C}$, l'écart-type est beaucoup plus importante que pour $T=500^{\circ}\text{C}$ ou 1000°C . Il est à noter que la durée de cette série de tests a été très importante à 20°C (de l'ordre de 24h) alors qu'à 500°C ou 1000°C , elle était plutôt de l'ordre de 12h. Ceci peut être expliqué par le fait que le libre parcours moyen est très petit, les sphérules mettront donc plus de temps avant de se coller à l'agrégat qu'à 1000°C ou le libre parcours moyen est beaucoup plus important.

La dimension fractale étant très proche à 20 et 500°C , traçons maintenant le graphique représentant les 3 séries de tests que nous avons effectuées :

Même si l'écart-type à $T=20^{\circ}\text{C}$ est important, on remarque que la dimension fractale subit à peu près la même évolution que les autres températures. Le libre parcours moyen ne semble donc pas influencer la dimension fractale de l'agrégat.

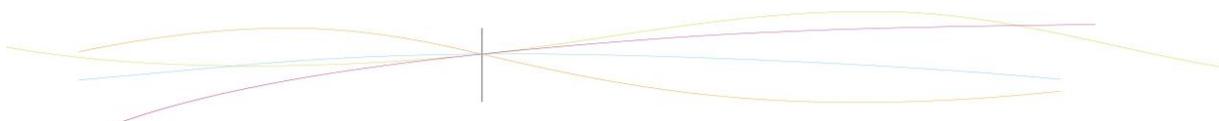
4.2.4. Expérience 3: Dimension fractale et morphologie

Finalement nous nous sommes posés la question de voir comment la dimension fractale reflète t'elle réellement la compacité de l'agrégat dans notre programme. Pour cela nous avons fait deux tests l'un où la dimension fractale est égale à 1,279926 pour une température égale à 20°C et un rayon de 15nm et l'autre où la dimension fractale vaut 1,554481 pour une température de 1000°C et un rayon de 15nm :



(1)
Dimension fractale = 1,279926

(2)
Dimension fractale = 1,554481

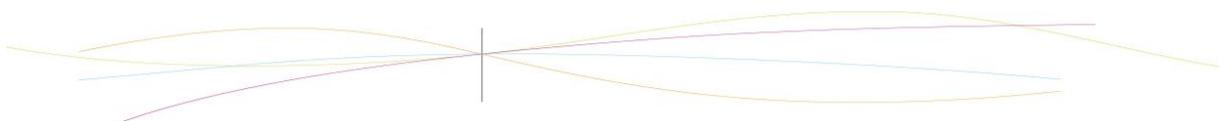


On observe bien que dans le 1^{er} cas, l'objet semble assez linéaire ce qui correspond bien à une dimension fractale proche de 1 que l'on retrouve par des calculs. Tandis que dans le 2^{ème} cas, l'agrégat semble bien moins linéaire, plus compact ce qui devrait donner une dimension fractale plus proche de 2 ou tout du moins plus élevé que dans le 1^{er} cas, ce qui est prouvé par les calculs. On peut donc observer que la dimension fractale semble bien dans une certaine mesure représenter la compacité de l'agrégat, proche de 1 l'agrégat est plus étendu, moins compact et proche de 2 l'agrégat est moins étendu, plus compact.

4.2.5. Conclusion

Nous avons pu observer grâce à ces deux expériences ci-dessus que lorsque l'on fixe le libre parcours moyen, la dimension fractale varie. De plus lorsque nous faisons varier le libre parcours moyen, on observe qu'il n'y pas de conséquences marquantes sur les fluctuations de la dimension fractale. Et pour finir, à chaque test nous avons pu observer que l'agrégat résultant présentait bien un caractère fractal. Nous pouvons donc déduire que la valeur du libre parcours moyen ne semble pas intervenir de façon apparente sur la dimension fractale de l'agrégat et donc sur sa compacité. Nous avons deux hypothèses pouvant expliquer cela:

1. Premièrement : le programme ne modélise pas un mouvement brownien parfait, ceci est tout de même contredit en partant par le fait que l'on retrouve dans toutes nos expériences la loi fractale et une dimension fractale. Ce qui signifie tout de même que l'on a réussi à modéliser un mouvement brownien capable comme dans la réalité de créer des objets fractals.
2. Deuxièmement : la dimension fractale n'est lié, dans le cas spécifique de notre modélisation du mouvement brownien en 2D, qu'au caractère aléatoire des déplacements des sphérules et cela indépendamment du libre parcours moyen.

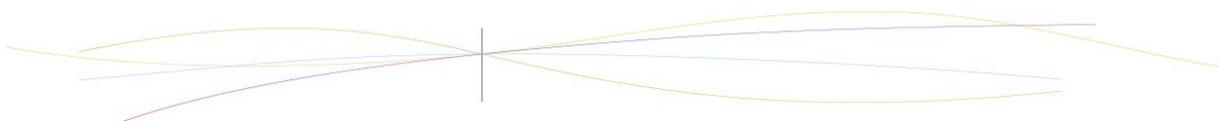


5. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Grâce à ce projet, nous avons réussi à effectuer une modélisation d'agrégation de particules se déplaçant selon le mouvement brownien. C'est par le biais des difficultés rencontrées, notamment lors de la programmation, que nous avons pu saisir la complexité du phénomène. Son informatisation a permis à chacun d'approfondir et de développer ses connaissances en matière d'informatique grâce au logiciel *Scilab*. L'originalité du sujet nous a aussi offert une toute nouvelle approche de la physique puisque l'aspect fractal du problème a pu être mis en évidence.

Chacun a ainsi beaucoup appris de l'aspect humain du projet. Provenant de groupes différents, il a fallu apprendre à nous connaître et à travailler ensemble pour être les plus efficaces possibles. L'équipe a donc dû faire preuve d'adaptation, qualité souvent requise dans le métier d'ingénieur, afin que nous puissions profiter des capacités de tous.

En un semestre, nous avons réussi à aborder l'approche fractale du code d'agrégation mais de nombreux aspects du problème restent encore à développer. Le temps ne nous a malheureusement pas permis d'aller jusqu'au bout de nos ambitions. Nous aurions ainsi voulu modéliser la formation de plusieurs agrégats à la fois dans un espace en trois dimensions. Le projet est donc bien loin d'être fini. Peut être pourrions nous compter sur la relève de l'année prochaine.



6. BIBLIOGRAPHIE

Documents Scientifiques :

- Physical review E74, 021411 (2006) : Computer simulation of diffusion limited cluster-cluster aggregation with an Epstein drag force.
- Journal of Sol-Gel Science and Technology 15, 97-117(1999)
- Simulation of Soot Aggregates Formed by Benzene Pyrolysis (Japan)

Sites internet :

- Wikipédia
- www.iecn.u-nancy.fr/~pincon/scilab/docA4.pdf
- www.enseignement.polytechnique.fr/.../Scilab/tutor.html
- www.dma.ens.fr/~legall/DEA96.pdf
- www.xena.ad/lcf/brownien/brownien.htm
- www.cndp.fr/themadoc/.../mouvbrown.htm

7. ANNEXES

7.1. Listings des programmes réalisés

```
clear
```

```
function[d]= distance(x1, y1, x2, y2)
```

```
    d = sqrt((x1-x2)^2 + (y1-y2)^2);
```

```
endfunction
```

```
function[xSolution, ySolution, existenceSolution]=resoudreEqDu2ndDegre(a, b, c, xPart, yPart,aDroite,bDroite)
```

```
delta = b*b - 4*a*c ;
```

```
if delta <0 then,
```

```
    existenceSolution = %F;
```

```
    // Afin d'éviter tout erreur éventuelle dans l'exécution du programme, on initialise le couple (xSolution, ySolution) à une valeur arbitraire (ici 0) :
```

```
    xSolution = 0;
```

```
    ySolution = 0;
```

```
else
```

```
    existenceSolution = %T;
```

```
    if delta == 0 then,
```

```
        xSolution = -b/(2*a);
```

```
        ySolution = aDroite*xSolution + bDroite;
```

```
    else
```

```
        x1 = (-b - sqrt(delta))/(2*a);
```

```
        y1 = aDroite * x1 + bDroite;
```

```
        x2 = (-b + sqrt(delta))/(2*a);
```

```
        y2 = aDroite * x2 + bDroite;
```

```
        if distance(x1, y1, xPart, yPart) <= distance(x2, y2, xPart, yPart) then,
```

```
            xSolution = x1;
```

```
            ySolution = y1;
```

```
        else
```

```
            xSolution = x2;
```

```
            ySolution = y2;
```

```
        end;
```

```

end;
end;
endfunction

```

```

function [xFinal, yFinal, contactAvecAggregat]=verifierSiParticuleAdjac(tAbscisse,
tOrdonnee, aDroite, bDroite, rayonParticule, xPart, yPart, nbParticulesColles,
libreParcoursMoyen)

```

```

    premiereliteration = %T;
    for i=1:nbParticulesColles,
        if distance(tAbscisse(i), tOrdonnee(i), xPart, yPart) <= (libreParcoursMoyen +
2*rayonParticule) then,
            aPolynome = (1+aDroite^2);
            bPolynome = (- 2)* (tAbscisse(i) + aDroite * (tOrdonnee(i) - bDroite));
            cPolynome = (tOrdonnee(i) - bDroite)^2 + tAbscisse(i)^2 - 4*rayonParticule^2;
            [xSol, ySol, existenceSolution] = resoudreEqDu2ndDegre(aPolynome,
bPolynome, cPolynome, xPart, yPart,aDroite,bDroite);
            if existenceSolution then,
                if premiereliteration then,
                    premiereliteration = %F;
                    xFinal = xSol;
                    yFinal = ySol;
                else
                    if distance(xSol, ySol, xPart, yPart) <= distance(xFinal,
yFinal, xPart, yPart) then,
                        xFinal = xSol;
                        yFinal = ySol;
                    end
                end
            end
        end
    end
end
end
end
end

```

```

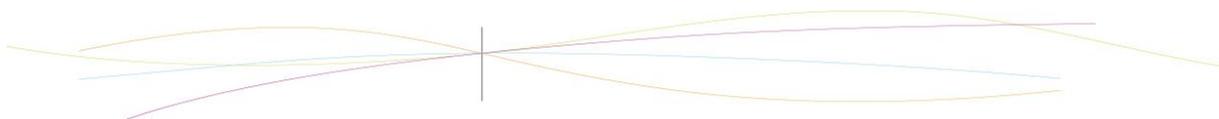
    if premiereliteration == %F then,
        contactAvecAggregat = %T;
    else // Cela signifie qu'il y a eu aucune particule appartenant à l'agrégat qui
correspondait aux critères
        contactAvecAggregat = %F;
    end

```

```

    // Afin d'éviter tout erreur éventuelle dans l'exécution du programme, on
initialise le couple (xSolution, ySolution)à une valeur arbitraire (ici 0) :

```



```

    xFinal = 0;
    yFinal = 0;
  end;
endfunction

```

function[xpart,ypart,rayonmax]=creationPosition(lpm,tAbscisse,tOrdonnee)

```

    teta=2*%pi*rand(1,1);
    teta; //valeur de l'angle qui permettra de placer au hasard,sur le cercle de rayon
    caracteristique, la particule.
    A=max(abs(tAbscisse));
    B=max(abs(tOrdonnee));
    r=max(A,B); //r plus gde des abscisses ou des ordonnées des particules faisant
    partie de l'aggregat
    R=r+5*lpm;
    xpart=R*cos(teta);
    ypart=R*sin(teta);
    rayonmax=r+6*lpm;
endfunction

```

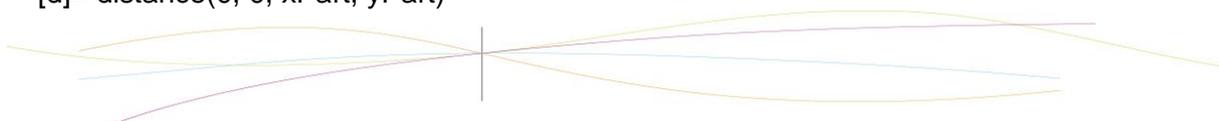
// exemple sur la console lp=100;agg=[610,40,-50];getf("positionpart.sci");[a,b]=positionpart(lp,agg);

function[tAbscisse,tOrdonnee,nbParticulesCollees]=deplacementUneParticule(tAbscisse,tOrdonnee,nbParticulesCollees,lpm,rayon)

```

    particuleCollee= %F;
    [xPart,yPart,rayonmax]=creationPosition(lpm,tAbscisse,tOrdonnee);
    [aDroite,bDroite,teta]=definitionDroite (yPart,xPart);
    while(particuleCollee== %F)
        [xFinal, yFinal, contactAvecAggregat]=verifierSiParticuleAdjac(tAbscisse, tOrdonnee,
        aDroite, bDroite, rayon, xPart, yPart, nbParticulesCollees, lpm);
        if contactAvecAggregat == %T then //On colle la particule
            tAbscisse(nbParticulesCollees+1)=xFinal;
            tOrdonnee(nbParticulesCollees+1)=yFinal;
            particuleCollee= %T;
        else
            //on deplace la particule d'un libre parcours moyen
            xPart=xPart+lpm*cos(teta);
            yPart=yPart+lpm*sin(teta);
            [d]= distance(0, 0, xPart, yPart)

```



```

    if d>rayonmax then
        [xPart,yPart,rayonmax]=creationPosition(lpm,tAbscisse,tOrdonnee);
    end
    [aDroite,bDroite,teta]=definitionDroite (yPart,xPart);
    end
    //clf;
    plot2d(xPart,yPart,-5)
    end
nbParticulesCollees=nbParticulesCollees+1;
endfunction

```

function[a,b,teta] = definitionDroite (yPart,xPart)

```

    teta=2*%pi*rand(1,1);
    b=yPart-tan(teta)*xPart;
    a=tan(teta);
endfunction

```

function [tAbscisse,tOrdonnee,ParamDistTab,NbmonoTab] = deplacementParticules (tAbscisse,tOrdonnee,lpm,rayon,NBMAX);

```

    nbParticulesCollees=1;
    NbmonoTab=[];ParamDistTab=[];
    for i=1:NBMAX-1,
        [tAbscisse,tOrdonnee,nbParticulesCollees]=deplacementUneParticule(tAbscisse,tOrdonnee,nbParticulesCollees,lpm,rayon);
        clf;
        plot2d(tAbscisse,tOrdonnee,-4);
        [NbmonoTab(i),ParamDistTab(i)]=CalculTailleAgregat(tAbscisse,tOrdonnee);
        //On exporte au fur et à mesure :
        distanceEtNbDeParticule=[ParamDistTab*1E9,NbmonoTab];
        fprintfMat('distances_1000°C_r=15.txt',distanceEtNbDeParticule,'%5.2f');
        Matexport=[tAbscisse, tOrdonnee]*1E9;
        fprintfMat('500part_1000°C_r=15.txt',Matexport,'%5.2f');
    end
endfunction

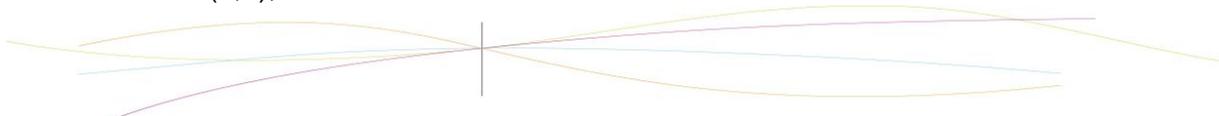
```

function [Nbmono,ParamDist]=CalculTailleAgregat(tAbscisse,tOrdonnee)

```

[L,C]=size(tAbscisse);
Tabdist=zeros(L,L);

```



```

for i=1:L
    for j=i+1:L
        [d]= distance(tAbscisse(i), tOrdonnee(i), tAbscisse(j), tOrdonnee(j))
        Tabdist(i,j)=d;
    end
end
ParamDist=max(Tabdist);
Nbmono=L;
endfunction

```

function[LibreParcoursMoyen]=calculLibreParcoursMoyen(temperature,pression,rayon)

```

m=(1800*4*%pi*rayon^3)/3;
// m= Masse de la particule
// 1800= Masse Volumique d'une particule de carbone
temperature=temperature+273.15;
// Conversion temperature des Celsius en Kelvin
Kb=1.38E-23;
//Constante de Boltzmann a declarer dans le programme principal
U=sqrt((8*Kb*temperature)/(%pi*m));
// U est la vitesse thermique moyenne de l'agregat
yt=68E-9*(1.013/pression)*(temperature/300)*((1+111/300)/(1+111/temperature));
// Libre parcours moyen du gaz dans les conditions de reference Tr=300K et Pr=1bar
C=1+(yt/rayon)*(1.142+0.558*exp(-0.999*rayon/yt));
//Coefficient de correction de cunningham
N=18.6E-6*(300+111)/(temperature+111)*(temperature/300)^(3/2);
//Viscosite dynamique du gaz dans les condition temperature et Pression de temperature et de pression
B=C/(3*%pi*N^2*rayon);
//Mobilite mecanique
D=Kb*temperature*B;
//Diffusion de l'agregat
LibreParcoursMoyen=(8*D)/(%pi*U);
endfunction

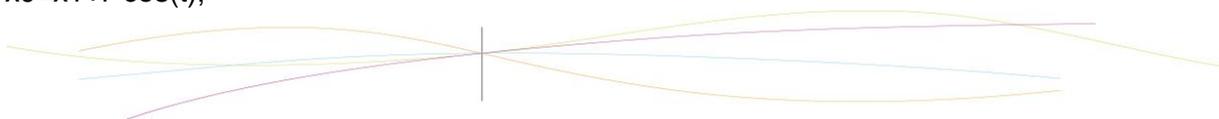
```

function[x0,y0]= graph(x1,y1,r,xmin,xmax,ymin,ymax,nx,ny)

```

t=linspace(0,2*%pi,100);
x0=x1+r*cos(t);

```



```

y0=y1+r*sin(t);
plotframe([xmin,ymin,xmax,ymax],[nx,nx,ny,ny]);
plot2d(x0,y0)
endfunction

/////

temperature=1000;
rayon=15E-9;
pression=1;
nbParticules=50;
libreParcoursMoyen=calculLibreParcoursMoyen(temperature,pression,rayon);
tAbscisse=0;tOrdonnee=0;
[tAbscisse,tOrdonnee,ParamDistTab,NbmonoTab] =
deplacementParticules(tAbscisse,tOrdonnee,libreParcoursMoyen,rayon,nbParticules);

//plot2d(log(ParamDistTab),log(NbmonoTab),-5)
plot2d(tAbscisse,tOrdonnee,-4);
//Matexport=[tAbscisse, tOrdonnee]*1E9;
//fprintfMat('Agregat-50.txplot2d(log(ParamDistTab),log(NbmonoTab),-5)t',Matexport,'%5.2f');

Matexport=[tAbscisse, tOrdonnee]*1E9;
[a,b]=reglin(log(ParamDistTab)',log(NbmonoTab)')
printf('a vaut : %f \n',a);
printf('b vaut : %f \n',b);

```

