



HAL
open science

Figures de souffle et structures cellulaires: aspects géométriques de la croissance

Iddo Yekutieli

► **To cite this version:**

Iddo Yekutieli. Figures de souffle et structures cellulaires: aspects géométriques de la croissance. Mécanique statistique [cond-mat.stat-mech]. Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1992. Français. NNT: . tel-03769796

HAL Id: tel-03769796

<https://hal.science/tel-03769796v1>

Submitted on 5 Sep 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Spécialité

PHYSIQUE THÉORIQUE

FIGURES DE SOUFFLE ET
STRUCTURES CELLULAIRES :
ASPECTS GÉOMÉTRIQUES DE LA CROISSANCE

Présentée par

Iddo Yekutieli

pour obtenir le titre de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Soutenue le 30 septembre 1992 devant le jury composé de

E. Brézin, président
D. Beysens
B. Derrida
C. Godrèche
D. Mukamel
N. Rivier

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Spécialité

PHYSIQUE THÉORIQUE

FIGURES DE SOUFFLE ET
STRUCTURES CELLULAIRES :
ASPECTS GÉOMÉTRIQUES DE LA CROISSANCE

Présentée par

Iddo Yekutieli

pour obtenir le titre de DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Soutenue le 30 septembre 1992 devant le jury composé de

E. Brézin, président

D. Beysens

B. Derrida

C. Godrèche

D. Mukamel

N. Rivier

à ma famille

à mes amis

REMERCIEMENTS

Cette thèse a été effectuée au Service de Physique de l'Etat Condensé du CEA. Je remercie toutes les personnes et les organismes qui m'ont permis de réaliser mon travail dans ce laboratoire d'activité scientifique diversifiée.

Claude Godrèche, qui a dirigé cette thèse, a su, dès le début, créer entre nous une ambiance de travail à la fois sérieuse et amicale. Il a réussi, par sa curiosité insatiable alliée à un grand sens de la rigueur, à me pousser en avant dans la voie de la recherche. Je tiens à lui exprimer ma plus profonde gratitude.

J'ai beaucoup apprécié l'interaction enrichissante avec Bernard Derrida, et je le remercie d'avoir accepté de faire partie du jury de thèse.

Daniel Beysens, responsable du SPEC, qui fut mon lien avec la physique expérimentale, a eu l'extrême gentillesse d'être membre du jury.

Je tiens à remercier Edouard Brézin d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Je suis très reconnaissant à David Mukamel et Nicolas Rivier qui ont eu la tâche d'être mes rapporteurs. J'ai aussi profité de discussions fructueuses avec eux.

J'ai eu le grand plaisir de collaborer avec Ivan Kostov, qui m'a éclairé sur quelques mystères de la théorie des champs, et je tiens à le remercier.

Je remercie tout particulièrement Anna Hurwic, Véronique Frandon, Roger Bidaux et Jean-Marc Luck qui ont lu et relu cette thèse afin qu'elle soit mise dans sa forme finale.

Je voudrais finalement remercier tous mes collègues au laboratoire, qui m'ont offert non seulement leur savoir scientifique, mais également leur amitié.

הַבֵּל הַבָּלִים הַכֵּל הַכֵּל

קהלת א

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	1
1 FIGURES DE SOUFFLE	3
1.1 Introduction	3
1.2 Etudes expérimentales	3
1.3 Régime d'échelle	5
1.4 Modèle de gouttes	8
1.4.1 Définition	8
1.4.2 La limite $D \rightarrow d$	9
1.4.3 La limite $D \rightarrow \infty$	12
1.5 Modèle géométrique à une dimension	12
1.5.1 Article : <i>Europhysics Letters</i> 12 , 385 (1990)	13
1.5.2 Article : <i>Physical Review A</i> 44 , 6241 (1991)	19
1.5.3 Calcul par la méthode des caractéristiques	31
1.6 Modèles simplifiés à deux dimensions	32
1.6.1 Modèle géométrique	34
1.6.2 Modèle cellulaire	38
1.6.3 Théorie de champ moyen du modèle cellulaire	42
1.7 Conclusion	44
2 STRUCTURES CELLULAIRES BIDIMENSIONNELLES	45
2.1 Introduction	45
2.2 Statistique des structures cellulaires	46
2.2.1 Généralités	46
2.2.2 Lois empiriques	48
2.2.3 Formalisme d'entropie maximale	49
2.2.4 Approche phénoménologique de la loi d'Abouav	54
2.3 Croissance normale de grains	56
2.3.1 Dynamique d'une paroi	56
2.3.2 Croissance d'une cellule	58
2.3.3 Evolution d'un ensemble de cellules	60
2.3.4 Modèles de Potts et d'Ising	62
2.3.5 Mousses de savon	62
2.4 Constructions géométriques	65
2.4.1 Tessellations de Voronoï	65

2.4.2	<i>Modèles bidimensionnels de figures de souffle</i>	71
2.4.3	<i>Complexes de Laguerre</i>	77
2.5	Modèle de sommets	78
2.5.1	<i>Travaux antérieurs</i>	78
2.5.2	<i>Propriétés générales</i>	81
2.5.3	<i>Simulations</i>	83
2.5.4	<i>Régime d'échelle</i>	87
2.6	Modèles simplifiés de la croissance de domaines	97
2.6.1	<i>Modèle topologique</i>	97
2.6.2	<i>Théorie de champ moyen</i>	99
2.7	Modèles de transformations topologiques élémentaires	104
2.7.1	<i>Modèle de transformations T_1 et T_2</i>	104
2.7.2	<i>Théorie de champ moyen</i>	111
2.8	Modèle de transformations T_1	117
2.8.1	<i>Etat d'équilibre</i>	117
2.8.2	<i>Article soumis à <i>Physical Review Letters</i></i>	119
2.8.3	<i>Discussion</i>	131
2.9	Conclusion	134
	BIBLIOGRAPHIE	137

INTRODUCTION

La présente thèse est consacrée à l'étude de deux problèmes : les figures de souffle et les structures cellulaires.

Ces deux problèmes correspondent à des systèmes en croissance qui tendent à s'organiser au cours du temps. Cette organisation se manifeste par un régime d'auto-similarité où le système possède une longueur caractéristique unique. Les propriétés statistiques de ces systèmes sont décrites par des lois stables à l'échelle de la longueur caractéristique.

Les figures de souffle –ou, dans le langage courant, la buée– sont dues à la condensation de la vapeur d'eau sur une surface, sous forme de gouttes. Grâce à un apport continu de vapeur, les gouttes d'eau croissent. La tension superficielle a pour effet que quand deux gouttes viennent en contact, elles coalescent en une seule goutte. Ces deux processus, en s'équilibrant mutuellement, amènent les figures de souffle vers un régime d'échelle.

Les structures cellulaires sont des matériaux très répandus dans tous les domaines de la vie courante. Ces structures sont parfois dotées d'une dynamique, notamment dans le cas de la croissance de domaines. Cette croissance entraîne le vieillissement de la structure –la taille typique des cellules croît dans le temps.

Dans ces deux problèmes, très différents en apparence, les objets dont le système est constitué –les gouttes dans le premier cas, les cellules dans le deuxième– sont en fait assujettis à une contrainte géométrique très forte : le remplissage de l'espace dans lequel ils résident.

Dans les figures de souffle, la répartition des gouttes dans le régime d'échelle est telle que la surface est remplie de façon à ne pas laisser d'espace libre pour de nouvelles gouttes. La vitesse de croissance des gouttes dépend aussi de la dimension de l'espace.

Dans le cas des structures cellulaires, la totalité de l'espace est répartie entre les différentes cellules. Le remplissage de l'espace entraîne aussi une contrainte topologique sur les formes des cellules, exprimée par le théorème d'Euler.

Les deux sujets traités ici appartiennent donc à une même classe de problèmes située à la croisée de chemins menant vers plusieurs domaines d'intérêt actuel : la formation de structures dans les systèmes hors d'équilibre, la physique des empilements et les lois stables en mécanique statistique.

FIGURES DE SOUFFLE

1.1 Introduction

Quand de la vapeur d'eau vient en contact avec une surface froide, l'eau se condense sur la surface. Si la surface est non-mouillante, l'eau est repoussée et forme des gouttelettes. Cet ensemble de gouttelettes est ce qu'on appelle la buée. Si l'apport de vapeur est continu, l'ensemble des gouttelettes évolue, et on obtient une figure de souffle.

L'étude des figures de souffle est reliée à un certain nombre d'applications technologiques [1-3]. La forme de la condensation de l'eau sur des surfaces est utilisée pour contrôler leur qualité. Une situation analogue aux figures de souffle se rencontre dans la fabrication des films minces, où des ions déposés sur la surface forment d'abord des petits îlots ; ces îlots se joignent ensuite pour former le film. Les propriétés de conduction de la chaleur dans des échangeurs à cycle thermique dépendent fortement du mode de condensation sur les parois. Le plus souvent, la condensation sous forme de gouttes est un effet parasite qu'on essaye de supprimer.

Nous allons présenter les résultats des études expérimentales sur les figures de souffle. Ensuite, nous discuterons les propriétés de ces ensembles de gouttes dans le régime d'échelle où le système est caractérisé par une longueur typique unique. Nous introduirons ensuite des modèles de figures de souffle à différents niveaux de complexité. Parmi ces modèles, définis à une ou deux dimensions d'espace, certains seront résolus analytiquement, tandis que d'autres seront étudiés numériquement. Certains aspects des modèles bidimensionnels seront présentés dans le chapitre suivant, dans le cadre de l'étude des structures cellulaires.

1.2 Etudes expérimentales

Les figures de souffle ont été étudiées en laboratoire ces dernières années [1-2,4-7]. Les expériences consistent à faire passer un gaz saturé de vapeur d'eau au dessus d'un substrat froid. Le substrat utilisé est du verre traité chimiquement pour être partiellement mouillant. L'eau se condense sur la surface sous forme de gouttelettes minuscules. La nucléation des gouttes se fait sur des sites privilégiés, tels que des défauts ou des impuretés sur la surface. Le rayon critique de nucléation des gouttes est trop petit pour être vu avec les moyens utilisés dans les expériences. A la température ambiante, et avec une largeur maximale des gouttes de l'ordre de quelques dizaines de μm , la tension superficielle fait que les gouttes ont une forme quasi-hémisphérique. Notons que pour obtenir un substrat quasi-unidimensionnel, on raye le verre, créant ainsi des sites favorables à la nucléation des gouttes le long des rayures.

Les figures de souffle évoluent par deux processus distincts : la croissance individuelle des gouttelettes, et la coalescence des gouttelettes qui se touchent. Cette évolution peut être séparée en trois régimes dans le temps. Au début d'une expérience, les distances entre les gouttes sont beaucoup plus grandes que leur largeur moyenne, et chaque goutte croît individuellement. Quand les distances entre les gouttes deviennent du même ordre de grandeur que leurs tailles, on observe beaucoup de coalescences entre gouttes qui viennent en contact. Le jeu entre la croissance individuelle et les coalescences amène le système vers le régime d'échelle où les figures de souffle sont auto-similaires dans le temps. L'apparition de nouvelles gouttes marque le début du troisième régime. Aux temps longs, on voit plusieurs générations de gouttes, chaque génération étant caractérisée par une échelle de longueur différente.

En raison de l'apport continu de la vapeur d'eau, les gouttes croissent dans le temps. Il a été observé que le rayon d'une goutte croît en loi de puissance du temps

$$r_i \sim t^\mu \quad (1.1)$$

où l'exposant μ a typiquement la valeur $\frac{1}{3}$.

Deux mécanismes ont été proposés pour expliquer la croissance des gouttes. Selon le premier, l'eau se condense directement sur la surface d'une goutte. Cela implique un taux de croissance du volume d'une goutte proportionnel à sa surface

$$\frac{d(r_i^D)}{dt} \sim r_i^{D-1} \quad (1.2)$$

où D est la dimension de la goutte ($D = 3$ dans les expériences). Par intégration de cette équation, on trouve un comportement linéaire dans le temps du rayon de la goutte, beaucoup plus rapide que le taux de croissance observé.

La température sur la surface d'une goutte est plus élevée que la température du substrat. Il est donc plus probable que l'eau se condense sur la surface qui n'est pas couverte par les gouttes. Des monomères d'eau condensée sur la surface effectuent des mouvements browniens jusqu'à ce qu'ils se collent à des gouttes. Ce mécanisme a été étudié numériquement et analytiquement [8] pour démontrer que la croissance d'une goutte suit une loi de puissance. Avec un flux radial constant des monomères d'eau vers la goutte, ce mécanisme donne le taux de croissance observé pour des gouttes tridimensionnelles : l'équation (1.1) avec $\mu = \frac{1}{3}$.

Quand deux gouttes viennent en contact, la tension superficielle fait qu'elles coalescent en une seule goutte. La nouvelle goutte se trouve au centre de masse des deux gouttes, avec un rayon déterminé par la conservation de la masse

$$r_n = (r_1^D + r_2^D)^{1/D} . \quad (1.3)$$

En fait, cette relation est idéalisée, puisque d'une part, la forme d'une goutte n'est pas rigoureusement hémisphérique et peut changer en fonction de la taille de la goutte. D'autre part, l'adhésion des gouttes au substrat peut entraîner un

frottement qui a pour conséquence que la goutte créée par une coalescence ne se trouve pas au centre de masse de ses deux ancêtres.

Au début d'une expérience, les gouttes sont beaucoup plus petites que les distances qui les séparent, et il n'y a pas de coalescences. Puisque le nombre des gouttes ne change pas, le rayon moyen des gouttes se comporte selon la même loi que les gouttes individuelles (l'équation (1.1) avec $\mu = \frac{1}{3}$).

Quand le rayon moyen des gouttes devient du même ordre de grandeur que la séparation moyenne entre les gouttes, il y a beaucoup de coalescences entre gouttes. Le rayon moyen change alors de comportement. Il continue à croître selon l'équation (1.1), mais avec un exposant différent. Cette transition est un signe que le système entre dans le régime d'échelle, où une figure de souffle est caractérisée par une longueur typique unique. Cela implique que la couverture –la fraction de la surface couverte d'eau– est constante dans le temps.

1.3 Régime d'échelle

Des arguments d'échelle peuvent expliquer certains aspects du comportement du système dans le régime d'échelle [2,4,9]. On considère des figures de souffle sur une surface d'aire fixée. Dans le régime d'échelle, la taille typique des gouttelettes est beaucoup plus grande que la taille des monomères qui les composent, et on peut considérer que les rayons des gouttes sont des variables continues.

On note par $m(r, t)$ le nombre de gouttes de rayon r au temps t . Si on se place à l'échelle de la croissance individuelle des gouttes, on peut définir la distribution $\tilde{m}(y, t)$ de la variable $y = rt^{-\mu}$ par

$$m(r, t) = t^{-\mu} \tilde{m}(rt^{-\mu}, t) . \quad (1.4)$$

Cette distribution reste inchangée par la croissance individuelle des gouttes. Le volume total des gouttes est donnée par

$$V = \int_0^{\infty} dr r^D m(r, t) = t^{\mu D} \int_0^{\infty} dy y^D \tilde{m}(y, t) . \quad (1.5)$$

La conservation du volume dans les coalescences fait que cette intégrale sur y est indépendante du temps. Par conséquent, le volume total se comporte comme

$$V \sim t^{\mu D} . \quad (1.6)$$

Comme le système est caractérisé par une longueur typique unique, l'aire totale couverte par les gouttes

$$A = \int_0^{\infty} dr r^d m(r, t) = t^{\mu d} \int_0^{\infty} dy y^d \tilde{m}(y, t) \quad (1.7)$$

est constante dans le régime d'échelle. La dimension du substrat d est égale à 1 ou 2 dans les expériences. Le nombre totale des gouttes est égal à

$$N = \int_0^{\infty} dr m(r, t) = \int_0^{\infty} dy \tilde{m}(y, t) . \quad (1.8)$$

Dans le régime d'échelle, on suppose que la distribution des gouttes a une forme qui ne dépend que d'une seule variable $z = yt^{-\beta}$

$$\tilde{m}(y, t) = t^{-\alpha} g(yt^{-\beta}) . \quad (1.9)$$

Les différents moments de cette distribution dépendent du temps par un simple facteur de puissance en t

$$\int_0^\infty dy y^k \tilde{m}(y, t) = t^{\beta(k+1)-\alpha} \int_0^\infty dz z^k g(z) . \quad (1.10)$$

Le moment d'ordre $k = D$ est constant dans le temps, et on trouve la relation

$$\beta(D + 1) - \alpha = 0 . \quad (1.11)$$

Le fait que l'aire totale est constante dans le régime d'échelle fournit une deuxième relation entre les exposants

$$\mu d + \beta(d + 1) - \alpha = 0 . \quad (1.12)$$

A partir de ces deux relations, on déduit que $\beta = \mu d / (D - d)$. Le rayon moyen des gouttes est donné par

$$R \sim (V/N)^{1/D} \sim t^{\mu+\beta} = t^{\mu D / (D-d)} . \quad (1.13)$$

Les coalescences ont pour conséquence que le rayon moyen des gouttes croît plus rapidement que le rayon de chaque goutte prise individuellement. L'exposant de croissance du rayon moyen vaut 1 pour un substrat bidimensionnel; il vaut $\frac{1}{2}$ pour un substrat unidimensionnel.

Certains auteurs [9] ont proposé une loi différente pour la croissance des gouttes. La quantité d'eau accumulée par une goutte par unité de temps est proportionnelle à la surface du substrat autour de la goutte, avec une largeur proportionnelle au rayon de la goutte

$$\frac{d(r_i^D)}{dt} \sim r_i^d . \quad (1.14)$$

Le taux de croissance du volume (la taille) d'une goutte $s_i \sim r_i^D$ est

$$\frac{ds_i}{dt} \sim s_i^{d/D} . \quad (1.15)$$

On suppose que, dans le régime d'échelle, la distribution $n_s(t)$ du nombre des gouttes de taille s a la forme

$$n_s(t) = S^{-\theta} f(s/S) , \quad (1.16)$$

où la taille moyenne des gouttelettes $S(t)$ se comporte en loi de puissance du temps

$$S(t) \sim t^z . \quad (1.17)$$

L'exposant θ peut être trouvé en se servant du fait que l'aire totale couverte par les gouttes est constante

$$A = \int_0^\infty ds s^{d/D} n_s(t) \sim S^{1-\theta+d/D} \sim t^0 . \quad (1.18)$$

On trouve que

$$\theta = 1 + \frac{d}{D} . \quad (1.19)$$

Les figures de souffle sont un problème d'agrégation : dans une coalescence, deux gouttes de tailles s_i et s_j deviennent une goutte de taille $s_n = s_i + s_j$. L'équation de Smoluchowski donne une description de type champ moyen (qui néglige la répartition dans l'espace) des problèmes d'agrégation. La distribution $n_s(t)$ du nombre de gouttes de taille s peut évoluer soit par la croissance individuelle, soit par des coalescences. L'évolution de $n_s(t)$ est donnée par l'équation aux dérivées partielles

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_s(t)}{\partial t} + \frac{\partial n_s(t)}{\partial s} \frac{ds}{dt} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^s ds' K(s', s-s') n_{s'}(t) n_{s-s'}(t) - n_s(t) \int_0^\infty ds' K(s, s') n_{s'}(t) . \end{aligned} \quad (1.20)$$

Cette équation est une équation de Smoluchowski de forme inhabituelle, due au terme de croissance individuelle des gouttes. Le noyau $K(s, s')$ est proportionnel à la probabilité que deux gouttes de taille s et s' se trouvent en contact. Sans préciser la forme exacte du noyau, on peut supposer qu'il est une fonction homogène de ses deux arguments. Dans la transformation

$$s \rightarrow as \quad t \rightarrow a^{1/z} t \quad (1.21)$$

le noyau se comporte comme

$$K(as, as') = a^\lambda K(s, s') . \quad (1.22)$$

La forme de la distribution $n_s(t)$, donnée par les équations (1.16-17), fait qu'elle se comporte dans ce changement d'échelle comme

$$n_{as}(a^{1/z} t) = a^{-\theta} n_s(t) \quad (1.23)$$

En effectuant la transformation (1.21) sur les variables dans l'équation (1.20), et en utilisant la loi de croissance (1.15) et les relations (1.22-23), on trouve

$$\begin{aligned} & a^{-\theta-1/z} \frac{\partial n_s(t)}{\partial t} + a^{-\theta-1+d/D} \frac{\partial n_s(t)}{\partial s} s^{d/D} = a^{1-2\theta+\lambda} \\ & \times \left[\frac{1}{2} \int_0^s ds' K(s', s-s') n_{s'}(t) n_{s-s'}(t) - n_s(t) \int_0^\infty ds' K(s, s') n_{s'}(t) \right] . \end{aligned} \quad (1.24)$$

En comparant les puissances de a des deux côtés de l'équation, on trouve que

$$\lambda = \frac{2d}{D} - 1 \quad (1.25)$$

$$z = \frac{D}{D-d} . \quad (1.26)$$

L'exposant de croissance du rayon moyen des gouttes est le même que celui des gouttes individuelles.

Ernst et van Dongen [10] ont étudié les propriétés de la distribution $n_s(t)$ dans l'équation de Smoluchowski, en fonction du degré d'homogénéité du noyau $K(s, s')$. Ils ont trouvé que le comportement du système change radicalement à la valeur critique $\lambda_c = 1$. Pour $\lambda < \lambda_c$, l'agrégation de petits amas est favorisée. La distribution des tailles des amas s'accumule autour de la taille moyenne, et le système tend vers un régime d'échelle. Si par contre, $\lambda > \lambda_c$, l'agrégation de grands amas est favorisée, et on voit apparaître, à temps fini, un amas géant. C'est le cas de la gélification ou de la percolation. Avec la relation (1.25), on voit que

$$\lambda \lesssim 1 \quad \text{selon que} \quad d \lesssim D . \quad (1.27)$$

Cela veut dire, dans le contexte des figures de soufflé, que tant que la dimension des gouttes D est supérieure à la dimension de l'espace d , la couverture de la surface dans le régime d'échelle est inférieure à 1. Si $D \leq d$, la couverture atteint la valeur 1 dans un temps fini.

1.4 Modèle de gouttes

1.4.1 Définition

Pour étudier le comportement des figures de soufflé, le modèle idéalisé suivant de croissance et de coalescence des gouttes a été introduit [1-2,5-7,9,11]. Au temps $t = 0$, on place les gouttes dans des positions aléatoires \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, N$) sur un substrat d -dimensionnel. Les gouttes ont des formes hémisphériques de dimension D (dans le cas réel, $D = 3$). Le rayon de chaque goutte croît dans le temps en loi de puissance

$$r_i(t) = a_i t^\mu . \quad (1.28)$$

L'exposant μ vaut $\frac{1}{3}$ dans les expériences, mais sa valeur précise n'a pas d'importance pour le modèle —elle change seulement l'échelle du temps. Quand deux gouttes se touchent, a lieu une coalescence : deux gouttes en positions \mathbf{x}_i et \mathbf{x}_j possédant des rayons r_i et r_j sont remplacées par une seule goutte de rayon

$$r_n = (r_i^D + r_j^D)^{1/D} \quad (1.29)$$

(afin de conserver la masse). Elle est placée au centre de masse de ses deux ancêtres :

$$\mathbf{x}_n = \frac{r_i^D \mathbf{x}_i + r_j^D \mathbf{x}_j}{r_i^D + r_j^D} . \quad (1.30)$$

Puisque la dimension des gouttes D est supérieure à la dimension de l'espace d , l'équation (1.29) implique une contraction pendant la coalescence. La surface couverte par la nouvelle goutte est inférieure à la surface couverte par ses deux ancêtres

$$r_n^d = (r_n^D)^{d/D} = (r_i^D + r_j^D)^{d/D} < (r_i^D)^{d/D} + (r_j^D)^{d/D} = r_i^d + r_j^d \quad (1.31)$$

tant que $D > d$.

Des simulations numériques de ce modèle [5-7,9,11-13] montrent que le système tend vers un régime d'échelle, de la même façon que les figures de soufflé réelles. Dans ce régime, il y a une longueur caractéristique unique qui croît dans le temps. Les distributions des tailles des gouttes et des distances entre les gouttes restent constantes, à un changement d'échelle près. Une conséquence de cela est que la couverture, la fraction de la surface couverte de gouttes, reste constante. Intuitivement, on comprend que la compensation entre la croissance individuelle des gouttes et la contraction pendant les coalescences donne une couverture constante.

Certains auteurs [9] ont utilisé une généralisation de la loi (1.14) de croissance des gouttes. Par intégration, cette loi implique que le rayon d'une goutte se comporte comme

$$r_i(t) = (t - a_i)^\mu . \quad (1.32)$$

Avec la loi de croissance (1.28) toutes les gouttes ont la même origine dans le temps, à $t = 0$. Avec la loi (1.32), chaque goutte a sa propre origine dans le temps, à $t = c_i$. Nous avons comparé ces deux lois de croissance par des simulation du modèle sur un substrat unidimensionnel. Dans les deux cas le système atteint un régime d'échelle. La valeur de la couverture dans ce régime est la même, ne dépendant que des dimensions d et D .

1.4.2 La limite $D \rightarrow d$

Nous avons vu que quand $D = d$, les gouttes ne se contractent pas dans une coalescence. En conséquence, la surface est complètement couverte d'eau dans un temps fini. Pour voir cet effet, nous avons étudié un modèle simple de croissance *sans coalescences*. Toutes les gouttes croissent linéairement dans le temps. Quand deux gouttes se touchent, elles continuent à croître, avec recouvrement, sans que cela affecte leur croissance.

A une dimension, ce modèle a une solution exacte. On distribue des points indépendamment au hasard sur une ligne. Chaque point est le centre d'une goutte dont les bords avancent vers l'extérieur à une vitesse constante. Au temps $t = 0$, la distribution des distances g entre les bords des gouttes voisines est $G_0(g)$; elle est normalisée à 1. A temps t , cette distribution est égale à

$$G_t(g) = G_0(g + 2t) . \quad (1.33)$$

La probabilité de trouver un espace libre entre deux gouttes est

$$E_t = \int_0^\infty dg G_t(g) = \int_{2t}^\infty dg G_0(g) . \quad (1.34)$$

Au temps t , une goutte peut être soit isolée, avec un diamètre $d = 2t$, soit formée de plusieurs gouttes qui se recouvrent. La distribution de gouttes de diamètre d est donnée par

$$D_t(d) = (E_t)^2 \delta(d - 2t) + (E_t)^2 \theta(d - 2t) \times \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{2t} dg_1 G_0(g_1) \cdots \int_0^{2t} dg_n G_0(g_n) \delta \left(d - 2t - \sum_{i=1}^n g_i \right). \quad (1.35)$$

On introduit la transformée de Laplace de $D_t(d)$

$$\tilde{D}_t(p) = \int_0^{\infty} dx e^{-px} D_t(x). \quad (1.36)$$

Pour que $D_t(d)$ soit normalisée à 1, il faut que $\tilde{D}_t(0) = 1$. En appliquant l'équation (1.35), on trouve que

$$\tilde{D}_t(p) = \frac{e^{-2tp} \int_{2t}^{\infty} dg G_0(g)}{1 - \int_0^{2t} dg e^{-pg} G_0(g)}. \quad (1.37)$$

La distribution $D_t(d)$ peut être trouvée par la transformée de Laplace inverse de $\tilde{D}_t(p)$. Nous nous contentons de donner le premier et le deuxième moments de la distribution

$$\bar{d} = 2t + \frac{\int_0^{2t} dg g G_0(g)}{\int_{2t}^{\infty} dg G_0(g)} \quad (1.38)$$

$$\overline{d^2} - \bar{d}^2 = \frac{\int_0^{2t} dg g^2 G_0(g)}{\int_{2t}^{\infty} dg G_0(g)} + \left[\frac{\int_0^{2t} dg g G_0(g)}{\int_{2t}^{\infty} dg G_0(g)} \right]^2. \quad (1.39)$$

A deux dimensions, nous ne disposons pas de solution du modèle. Il est quand même intéressant de regarder l'évolution du système au cours du temps. Dans les figures (1.1a-f) on voit des disques qui croissent tous à la même vitesse. Les amas des disques qui se recouvrent deviennent de plus en plus grands. Dans la dernière figure, on voit apparaître un amas géant de disques qui traverse tout le carré.

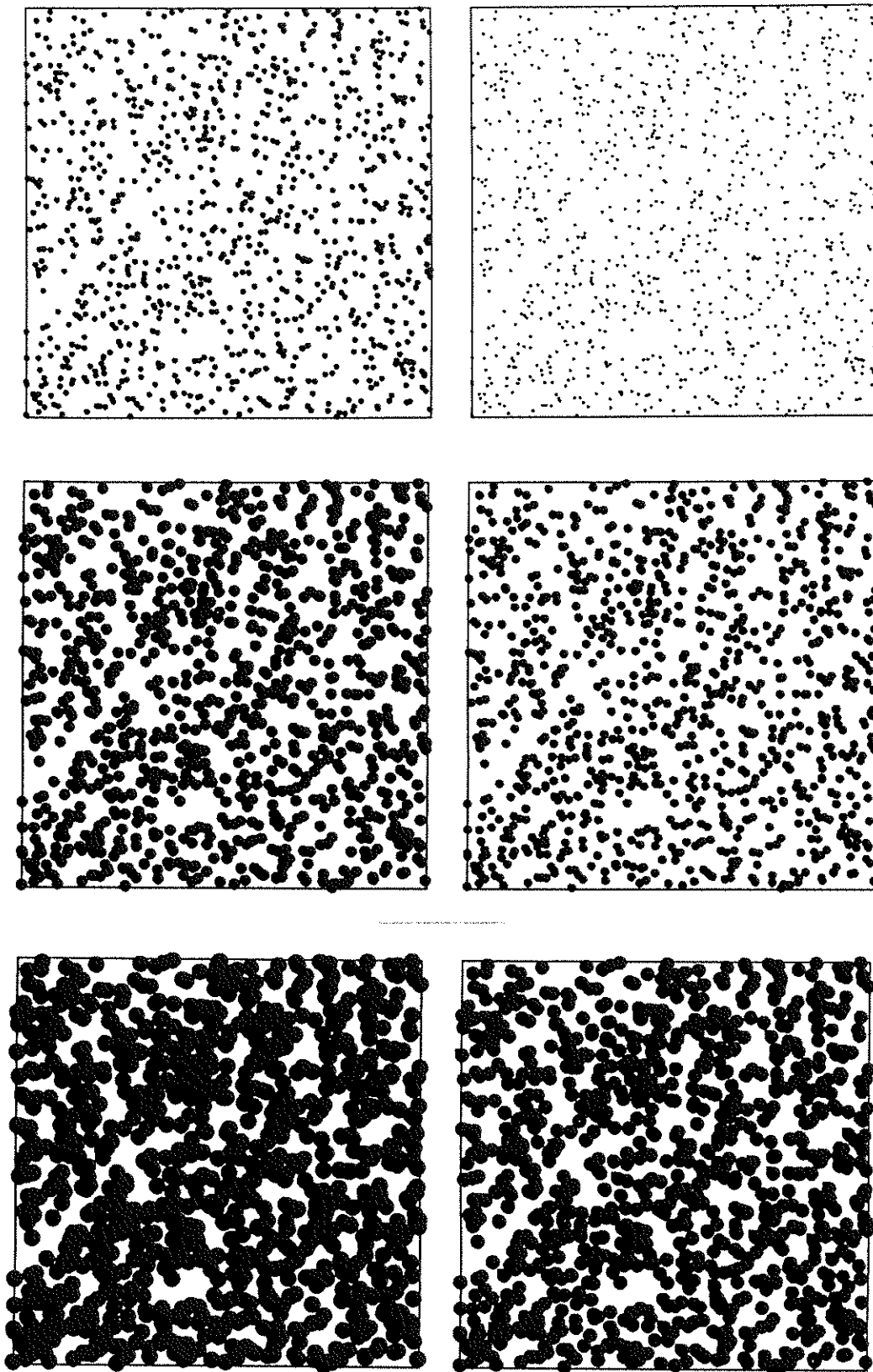


Figure 1.1 : Percolation dans un modèle de croissance *sans coalescence*.

1.4.3 La limite $D \rightarrow \infty$

La limite $D \rightarrow \infty$ représente un cas spécial, puisque l'équation (1.29) devient

$$r_n = \max\{r_i, r_j\} . \quad (1.40)$$

D'après l'équation (1.40) on voit que si la distribution initiale des diamètres des gouttes est monodisperse, elle ne change pas. Si la distribution est polydisperse au début, elle devient de plus en plus monodisperse au cours du temps.

On peut redéfinir le modèle dans la limite $D \rightarrow \infty$: pour une distribution donnée de points dans l'espace, avec des positions \mathbf{x}_i ($i = 1, \dots, N$) et des masses m_i , à chaque itération, on cherche les deux points les plus proches, et on les remplace par un seul point mis sur leur centre de masse

$$\mathbf{x}_n = \frac{m_i \mathbf{x}_i + m_j \mathbf{x}_j}{m_i + m_j} \quad (1.41)$$

avec une masse

$$m_n = m_i + m_j . \quad (1.42)$$

Le diamètre, à chaque instant, est égal à la distance entre les deux points les plus proches.

Nous ne présentons pas de résultats pour ce modèle, car dans les sections suivantes nous allons étudier un modèle encore plus simple, déduit de celui-ci.

1.5 Modèle géométrique à une dimension

Ce modèle est dérivé du modèle des gouttes dans la limite $D \rightarrow \infty$. La simplification consiste à négliger complètement les masses des gouttes. Nous avons étudié deux variantes du modèle à une dimension :

- (1) A chaque itération, on cherche les deux points les plus proches, et on les remplace par un seul point au milieu. Cette variante correspond au cas où toutes les gouttes ont la même masse.
- (2) A chaque itération, on cherche les deux points les plus proches, et on élimine l'un des deux, au hasard. Ici, l'une des gouttes, qui est supposée être plus grande, absorbe l'autre.

Pour voir le lien de ce modèle avec les figures de soufflé, il suffit de placer des gouttes de rayon égal sur chacun des points. Le rayon des gouttes croît, et quand deux gouttes se touchent, elles sont remplacées, selon la règle (1) ou (2), par une seule goutte de même rayon. Au moment d'une coalescence, le rayon des gouttes est égal à la moitié de la distance minimale h_0 entre les points (les centres des gouttes). La couverture est égale à la surface couverte par une seule goutte de rayon h_0 , multipliée par le nombre de points, et divisée par la longueur totale.

L'étude de ces deux variantes du modèle géométrique a fait l'objet de deux articles parus dans *Europhysics Letters* et dans *Physical Review A*. Ces deux articles sont reproduits ici.

Stable Distributions of Growing and Coalescing Droplets.

B. DERRIDA (*), C. GODRÈCHE(**) and I. YEKUTIELI(**)

(*) *Service de Physique Théorique CEA, Saclay - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

(**) *Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique, CEA, Saclay
91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

(received 16 March 1990; accepted in final form 4 May 1990)

PACS. 02.50 – Probability, theory, stochastic processes, and statistics.

PACS. 05.20 – Statistical mechanics.

PACS. 64.70F – Liquid-vapour transitions.

PACS. 68.45 – Solid-fluid interface processes.

Abstract. – We consider two simplified models of the formation of patterns emerging from the growth and coalescence of water droplets on a substrate (breath figures). The study is restricted here to the case of a one-dimensional substrate. In the first model we assume a monodisperse distribution of droplet sizes. In the second model, obtained as a mean-field approximation of the first one, the distribution of distances between neighbouring droplets obeys a Smoluchowski equation. We solve this equation analytically to obtain the coverage of the line (fraction of it covered by droplets) and the distribution of distances between droplets. We conclude by discussing the relevance of the random parking problem for breath figures.

Introduction. – The problem of the combined effects of the growth and coalescence of water droplets condensing on glass surfaces has motivated several recent works, both on experimental and theoretical aspects [1-7]. This problem is the laboratory version of the well-known phenomenon of condensation of vapour on spectacles or dew on grass. Experimental studies of breath figures, *i.e.* the patterns formed by the droplets, performed on two- and one-dimensional substrates [1, 6, 7], show the following features: after a transient regime where the droplets grow individually, coalescences between droplets appear. The coverage of the substrate (the fraction of it occupied by droplets) reaches a constant value in time. In this stage the breath figures are self-similar, *i.e.*, up to a rescaling of lengths, the figures look similar at successive times; the values of the 1- or 2-dimensional coverages are close to those of the random parking problem [8-10] in the same dimensions. In a third regime, new droplets nucleate and grow in the space left between the original droplets.

Inspired by these experiments, and discarding the last regime, the following model has been proposed [2, 3, 5, 7]. At time $t=0$, nucleation sites are randomly distributed on a substrate of dimension d ($d=2$ corresponds to droplets on a plate of glass, $d=1$ on a spider's web). On these sites, droplets of dimensionality D grow ($D=3$ for real droplets); the intrinsic growth (*i.e.* between two coalescences) of the radius of a droplet follows some

power law in time. When a coalescence between two droplets (of radii R_1 and R_2) occurs, a new droplet forms at the centre of mass of these two droplets, with a radius R given by mass conservation

$$R^D = R_1^D + R_2^D. \quad (1)$$

Numerical simulations have been performed for this model [3-7]. They reproduce the experimental observations mentioned above, in particular the existence of a scaling regime at large times. However a detailed analytical treatment of this problem has not yet been proposed.

The purpose of the present work is to introduce two simplified 1- d versions (models *A* and *B*) of the above problem in which the polydispersity in size of the droplets has been eliminated. These models capture the essence of the physical phenomenon, *i.e.* the existence of a scaling regime which, at least for the second model, can be described by an analytical approach.

Model A. – We first consider a system of equally sized droplets on a line (1- d substrate). The radius R of these droplets grows in time. The precise form of this growth law is irrelevant in this model, as will become clear below. When two neighbouring droplets coalesce, a new droplet is created with the same radius R , centred half-way between the coalescing droplets. This model can be formally viewed as a limit of the model of D -dimensional droplets on a 1- d substrate, described in the introduction, when $D \rightarrow \infty$. Since at all times the radii of the droplets are all equal, the problem is reduced to studying the distribution of distances (or bonds) h between the centres of neighbouring droplets. When the radius of the droplets reaches a certain value R , all the pairs of neighbouring droplets which are at a distance $h_0 (= 2R)$ coalesce and all the remaining distances h are larger than h_0 . Therefore if the system is represented by a sequence of points along the line (which are the centres of the droplets), the dynamics of growth and coalescence reduces to searching the minimal distance h_0 between two adjacent points, and replacing these two points by one point midway between them. Hence the two bonds neighbouring the disappearing bond h_0 become longer by $h_0/2$.

If one starts at time $t = 0$ with a system of N bonds, and if we denote by $N g_t(h) \delta h$ the number of bonds of lengths between h and $h + \delta h$ at time t (at which time, the length of the minimal bond is h_0), one can define the fraction $f_t(h)$ of bonds of length h by

$$f_t(h) = g_t(h) \left[\int_{h_0}^{\infty} g_t(h') dh' \right]^{-1}. \quad (2)$$

The length h_0 of the minimal bond is a natural time scale in the problem. It is therefore convenient to rescale the distribution $f_t(h)$, defining the distribution $F(x, t)$ of the reduced variable $x = h/h_0$:

$$f_t(h) = h_0^{-1} F(h/h_0, t). \quad (3)$$

The coverage C_t of the line at time t is then given by

$$C_t = h_0 \left[\int_{h_0}^{\infty} h f_t(h) dh \right]^{-1} = \left[\int_1^{\infty} x F(x, t) dx \right]^{-1}, \quad (4)$$

using the fact that the number of droplets (all of diameter h_0) is equal to the number of bonds.

Figure 1 shows $F(x, t)$, obtained by numerical simulations of model A, at 3 different times, namely when the number of remaining bonds are 100 000, 50 000 and 25 000, starting with a system of 400 000 bonds randomly distributed between 0 and 1. These three curves are superimposable, giving evidence to scaling at large times. It is also found that for large times, $C_t \approx 0.72$, to be compared to $C_t \approx 0.8$ found in 1- d experiments and simulations [7].

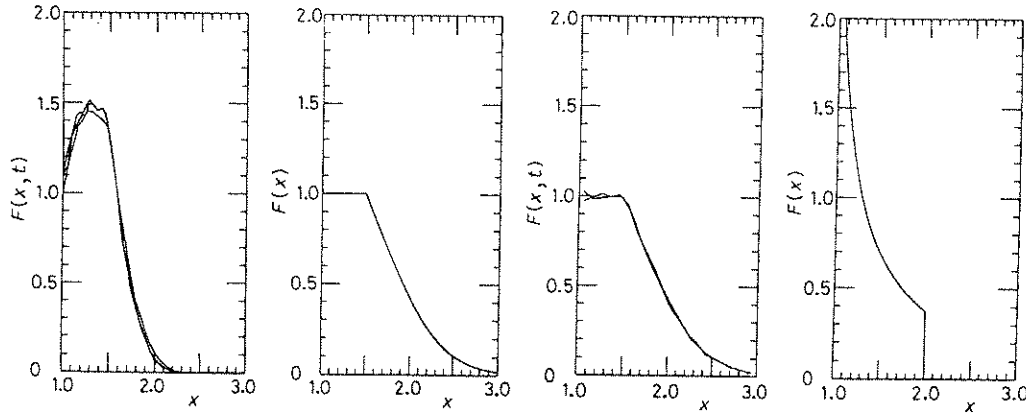


Fig. 1.

Fig. 2.

Fig. 3.

Fig. 4.

Fig. 1. – The scaled distribution $F(x, t)$ obtained by simulation of model A at 3 different times.

Fig. 2. – The scaled stationary distribution $F(x)$ for model B obtained by iteration of eq. (6).

Fig. 3. – Same as fig. 1, for model B.

Fig. 4. – The distribution of distances between the centres of adjacent cars for the random parking problem.

Model B. – This model is a mean-field approximation of model A: the correlations between bonds are neglected. Hence, at each time step, the shortest bond h_0 is cut into two pieces of equal length and the pieces are added to two randomly chosen bonds. If $Ng_t(h) \delta h$ is the number of bonds of length between h and $h + \delta h$ at time t , and if during the time interval $(t, t + \delta t)$ all bonds of length between h_0 and $h_0 + \delta h$ are removed, one can write the following equation for $g_t(h)$:

$$g_{t+\delta t}(h) = g_t(h) + 2g_t(h_0) \delta h \left[g_t \left(h - \frac{1}{2} h_0 \right) \theta \left(h - \frac{3}{2} h_0 \right) - g_t(h) \right] \left[\int_{h_0}^{\infty} g_t(h') dh' \right]^{-1}. \quad (5)$$

The two terms inside the brackets of the r.h.s. of eq. (5) correspond to the gains and the losses in this Smoluchowski equation; the Heaviside function accounts for the fact that no bonds are smaller than h_0 . If we introduce, as in model A, the fraction $f_t(h)$ of bonds of length h and the rescaled distribution $F(x, t)$ (see eqs. (2), (3)), we find from eq. (5) (using the fact that δh and δt are small and that $\int g_{t+\delta t}(h) dh = \int g_t(h) dh - g_t(h_0) \delta h$) that $f_t(h)$ and $F(x, t)$ satisfy

$$f_{t+\delta t}(h) = f_t(h) + f_t(h_0) \delta h \left[2f_t \left(h - \frac{1}{2} h_0 \right) \theta \left(h - \frac{3}{2} h_0 \right) - f_t(h) \right], \quad (6)$$

$$\gamma(t) \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} = F(x, t) + x \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} + F(1, t) \left[2F \left(x - \frac{1}{2}, t \right) \theta \left(x - \frac{3}{2} \right) - F(x, t) \right], \quad (7)$$

where $\gamma(t) = h_0 \delta t / \delta h$ represents the relation between the real time t and the minimal length h_0 . Since this relation is arbitrary in this model, we will choose for simplicity $\gamma(t) = 1$. The whole time dependence of the process is reduced to solving eq. (7) with some initial condition $F(x, 0)$, or, introducing the Laplace transform $\phi(p, t)$ of $F(x, t)$

$$\phi(p, t) = \int_1^{\infty} F(x, t) \exp[-px] dx \quad (8)$$

to solving the differential equation

$$\frac{\partial \phi(p, t)}{\partial t} = F(1, t) [2 \exp[-p/2] - 1] \phi(p, t) - F(1, t) \exp[-p] - p \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial p}. \quad (9)$$

Though we did not find a way of solving analytically eq. (7) or eq. (9) for arbitrary initial conditions, all the stationary solutions $\phi(p)$ of eq. (9) may be obtained, since they satisfy an ordinary differential equation. These solutions are

$$\phi(p) = F(1) \int_p^{\infty} \frac{dt}{t} \exp \left[-t + F(1) \int_p^t du \frac{1 - 2 \exp(-u/2)}{u} \right], \quad (10)$$

indexed by the continuous parameter $F(1)$. The question is what stationary solution is reached for given initial conditions $\phi(p, 0)$ or $F(x, 0)$, if any at all. We can argue that the stationary solution which is obtained for most initial conditions $F(x, 0)$ satisfies

$$F(1) = 1. \quad (11)$$

The argument is as follows. From eq. (10) one can show that for p small

$$1 - \phi(p) \sim p^{F(1)}. \quad (12)$$

So since the first moment of x is given by

$$\bar{x} = \int_1^{\infty} x F(x) dx = -\phi'(0) \quad (13)$$

and noting that $\phi(0) = 1$, the only stationary solution which gives a finite nonzero value of \bar{x} satisfies $F(1) = 1$. $F(1) < 1$ corresponds to $\bar{x} = \infty$, whereas $F(1) > 1$ corresponds to $\bar{x} = 0$. This last case should be ruled out since $F(x)$ is positive and of support $[1, \infty]$.

One can distinguish between the two remaining cases for $F(1)$ by looking at the trajectories of the singularities of $\phi(p)$ [11]. Assume that at time t , $\phi(p, t)$ has some power-law singularity in the complex plane of p at $p_i(t)$

$$\phi_{\text{sing}}(p, t) \sim (p - p_i(t))^\beta. \quad (14)$$

By equating the most singular terms of both sides of eq. (9), we get an equation of motion for the singularity $p_i(t)$

$$dp_i(t)/dt = p_i(t). \quad (15)$$

If the initial condition $F(x, 0)$ is such that $\phi(p, 0)$ has some singularities $p_i(0) \neq 0$ in the complex p plane, these singularities will go to infinity when $t \rightarrow \infty$. One then expects $\phi(p, t)$ to converge to a stationary solution analytic in p , implying that $F(1)$ in eq. (12) has to be an integer. Moreover, since $0 < F(1) \leq 1$, one finds that $F(1) = 1$.

If the initial condition $F(x, 0)$ decays slowly when $x \rightarrow \infty$, so that $\phi(p, 0)$ is singular at $p = 0$, then the singularity of $\phi(p, t)$ might remain at $p = 0$ and $F(x, t)$ might converge to another stationary solution with $F(1) < 1$.

Using eqs. (10), (11), (13) one can calculate \bar{x}

$$\bar{x} = \int_0^\infty \frac{dt}{t^2} \left[1 - \exp \left[-t + 2 \int_0^t \frac{1 - \exp[-u/2]}{u} du \right] \right] \simeq 1.547 \quad (16)$$

and deduce from eq. (4) the coverage $C = 1/\bar{x} \simeq 0.64$ in this mean-field approximation.

In fig. 2 and 3 we compare the stationary distribution obtained by iterating eq. (6) for $F(1) = 1$ (fig. 2), and the results of a simulation of model *B* (fig. 3). We see that the agreement is quite satisfactory.

As a final remark, let us mention that other cases of scaling solutions are known for Smoluchowski equations [12, 13].

Conclusion. – We have performed simulations of the model presented in the introduction with D -dimensional droplets on a line. For all $D \geq 2$, after a transient regime, the patterns emerging are self-similar in time: the distributions of droplet sizes and inter-droplet distances obey simple scaling relations. These distributions resemble, as $D \rightarrow \infty$, the distributions found for model *A*. We will present these results in a future work.

Breath figures display intriguing similarities with the random parking problem. In $1-d$ this is the problem of sequentially parking cars of length 1 at random along an infinitely long street, until the street is «jammed»: the spaces between the cars are all smaller than 1. As mentioned in the introduction, the final density of cars along the street is close to the coverage found in breath figures experiments and simulations on $1-d$ substrates. The same is found for the $2-d$ versions of these problems. All the more, in $1-d$, breath figures in the self-similar regime are in nearly-jammed states. This is seen in fig. 1, where almost all the weight of the distribution of bonds lies between h_0 and $2h_0$, implying that almost all gaps between the droplets are smaller than h_0 . Nevertheless, the analogy is not complete: comparing fig. 1 and 4, we see that the distributions of distances between droplet- and car-centres are very different; in the random parking problem (fig. 4) the distribution diverges (logarithmically) at 1 and drops discontinuously to 0 at 2.

In this paper we have seen that a very simplified mean-field model for the formation of breath figures, solvable analytically, possesses, at least qualitatively, the main features (scaling regime) of more complicated models (the model described in the introduction and model *A*). Starting from this mean-field approach, one should be able to improve it by taking into account some correlations between the lengths of neighbouring bonds. Our first attempts in this direction are encouraging and we hope to present them in a forthcoming paper.

* * *

It is a pleasure to thank D. BEYSENS, P. GUÉNON and A. STEYER for introducing us to the subject and for many helpful discussions, and D. BESSIS for an illuminating discussion on Laplace transforms.

REFERENCES

- [1] BEYSENS D. and KNOBLER C. M., *Phys. Rev. Lett.*, **57** (1986) 1433 and references to earlier works therein.
- [2] VIOVY J. L., BEYSENS D. and KNOBLER C. M., *Phys. Rev. A*, **37** (1988) 4965.
- [3] FRITTER D., KNOBLER C. M., ROUX D. and BEYSENS D., *J. Stat. Phys.*, **52** (1988) 1447.
- [4] FRITTER D., Thesis, University of California, Los Angeles, Cal. (1989).
- [5] MEAKIN P. and FAMILY F., *J. Phys. A*, **22** (1989) 225.
- [6] BRISCOE B. J. and GALVIN K. P., preprint (1989).
- [7] STEYER A., GUÉNOUN P., BEYSENS D., FRITTER D. and KNOBLER C. M., submitted to *Europhys. Lett.*
- [8] RÉNYI A., *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.*, **3** (1958) 109.
- [9] WIDOM B., *J. Chem. Phys.*, **44** (1966) 3888.
- [10] SWENDSEN R., *Phys. Rev. A*, **24** (1981) 504 and other references therein.
- [11] THUAL O., FRISCH U. and HÉNON M., *J. Phys. (Paris)*, **46** (1985) 1485.
- [12] ERNST M. H., *Fractals in Physics*, edited by L. PIETRONERO and E. TOSATTI (Elsevier, Houston, Tex.) 1986, p. 289.
- [13] VAN DONGEN P. G. J. and ERNST M. H., *J. Stat. Phys.*, **49** (1987) 879 and 927.

Scale-invariant regimes in one-dimensional models of growing and coalescing droplets

B. Derrida

Service de Physique Théorique, Commissariat à l'Energie Atomique, Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette CEDEX, France

C. Godrèche and I. Yekutieli

Service de Physique du Solide et de Résonance Magnétique, Commissariat à l'Energie Atomique, Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette CEDEX, France

(Received 4 March 1991)

We consider several simplified models of breath figures in one dimension. For all these models, the combined effects of growth and of coalescence of droplets lead to a scale-invariant regime with a stable distribution of the distances between droplets. We show that at the mean-field level there exist one-parameter families of such stable distributions, each distribution being characterized by its decay at infinity. We explain how the mean-field theory can be improved by taking into account the effect of pair or higher correlations. For some models one can check that the pair and higher correlations are factorized, meaning that correlations are absent and that therefore the mean-field theory is exact. Finally, we show that a very simple model of domain growth related to spinodal decomposition, the one-dimensional Potts model in the limit of an infinite number of states, also possesses a one-parameter family of stable distributions analogous to what we obtained for breath figures.

PACS number(s): 64.70.Fx, 68.45.Da, 02.50.+s, 05.20.Dd

I. INTRODUCTION

Breath figures are the patterns formed by growing and coalescing droplets when vapor condenses on a nonwetting surface. For example, one sees breath figures on a window pane on a cold day.

Laboratory experiments of breath figures may be performed by letting a gas saturated with water vapor pass over a cold surface [1-4]. The water condenses on the surface in the form of droplets, and the evolution of these droplets in time is recorded and analyzed.

One can distinguish three time regimes in an experiment.

In the beginning, droplets nucleate and start growing; they are widely spaced from one another compared to their sizes. The diameter of a droplet is found to be growing as a power law in time.

In the second regime, the droplets have grown to the extent that the distances between them are of the same order of magnitude as their sizes so that now there are many coalescence events. In such an event, two droplets merge very rapidly into a single droplet whose diameter is given by conservation of mass. The center of the new droplet is located between the centers of the two original merging droplets. In this regime the system appears to be statistically self-similar in time: the distributions of droplet sizes at different times are found to superpose after appropriate rescaling. One can also look at the coverage of the surface, that is, the fraction of the surface covered by water droplets, as a function of time. It is seen that after an initial rise of the coverage during the first regime, it attains a plateau in the second regime. This signifies that the spaces between the droplets are scaling in time with the same scaling law as the droplet diameters. Quantitatively, the constant coverages found in ex-

periments are approximately 0.55 for a two-dimensional substrate, and 0.8 for a quasi-one-dimensional substrate [1,2]. These figures are very close to the jamming limit found in random-sequential-adsorption (RSA) processes. One-dimensional RSA (otherwise known as the "parking problem") consists in placing equally sized line segments sequentially at random places along a line without overlaps. When there is no more room left, one is at the jamming limit and the coverage of the line is calculated to be 0.748 [5,6]. A two-dimensional version would be placing equally sized disks on a plane, simulations showing a jamming limit of 0.547 [7]. Inspection of a breath figure in the scaling regime shows that it is almost jammed, that is, one could hardly fit any more droplets, even of the smallest found in the figure, in the spaces left between the droplets.

In a third regime the intervals of time between coalescences and the spaces between the droplets are large enough to allow new droplets to nucleate.

In this article we consider several simplified models of breath figures in one dimension. For all these models, the combined effects of growth and of coalescence of droplets lead to a scale-invariant regime with a stable distribution of the distances between droplets. In Sec. II we present the results of numerical simulations for the system of three-dimensional droplets growing on a one-dimensional substrate. We observe that after a transient regime, a scaling regime emerges as the coverage becomes constant and the distributions of the diameters, gaps, and distances between the droplets become invariant (up to a rescaling). In Sec. III we consider a simplified model (called the "cut-in-two" model) of growing droplets such that a configuration of the system is characterized by the distances between droplets only (all droplets are assumed to be of the same size). We propose a mean-field theory

for this simplified model which gives a result for the scale-invariant distribution of the interdroplet distances qualitatively similar to the one observed in the simulation of the model. We discuss how the result of this mean-field theory can be improved by taking into account the effect of correlations between pairs of neighboring interdroplet distances. One interesting outcome of the mean-field theory is the existence of a one-parameter family of scale-invariant distributions of interdroplet distances indexed by their power-law decay at infinity. In Sec. IV we consider another simplified one-dimensional model (called the "paste-all" model). For this model too, we develop a mean-field theory which, again, gives a one-parameter family of scale-invariant distributions. However, in this second model, one can show that the dynamics does not produce any correlation between successive interdroplet distances along the line, implying that the mean-field theory is exact, as observed in numerical simulations. The existence of a one-parameter family of scale-invariant distributions can also be observed in other problems. In the Appendix, we discuss the simple example of the growth of domains which occurs when a one-dimensional chain of Potts spins is quenched to zero temperature. Finally we conclude by adding some comments on the two-dimensional versions of the models studied in Secs. III and IV and on the possible connection of RSA with this problem.

II. SIMULATIONS OF BREATH FIGURES

In order to illustrate the existence of a scale-invariant regime in breath figures we first describe simulations of a model giving a simple description of the experiments for breath figures on a one-dimensional substrate. Such simulations have already been performed [2,3,8-10]. Here we will concentrate on the distribution of distances between the droplets. The two ingredients necessary to define a model are the growth law of the droplet sizes, and the coalescence rule, i.e., how the size and the position of the new droplet depend on those of the two coalescing droplets. The model described below will serve as a basis to yet simpler ones studied in the following sections.

(i) The law we use for the growth of a droplet diameter is [2,3,8]

$$d_i(t) = A_i t^\mu, \quad (1)$$

where the exponent μ relates to the condensation mechanism. Note that this law fixes a common time origin for all the droplets, the time of the beginning of the experiment. The same time origin remains after coalescences. As a consequence two droplets of the same size at different times will grow at different rates. This law is supported by experimental observations [2,3]. Another form has been proposed [9,10] for the evolution in time of the diameters, namely,

$$\frac{d}{dt} d_i(t) = B [d_i(t)]^\omega \quad (2)$$

which leads to a different time origin for each droplet, but to a time-invariant growth rate. In both cases, the

only important ingredient is that the diameters increase with time, and therefore one expects that replacing Eq. (1) by Eq. (2) would not change any qualitative feature.

(ii) In a coalescence of two droplets of diameters d_i and d_j , mass conservation imposes that the diameter of the new droplet be given by [10,11]

$$d = (d_i^D + d_j^D)^{1/D}. \quad (3)$$

D is the dimensionality of the droplets, equal to 3 for real droplets. We will also consider D different from 3. Whenever $D > 1$, Eq. (3) implies that

$$d < d_i + d_j. \quad (4)$$

Here we will locate the center of the new droplet at the center of mass of the two merging ones. One could also have located it at the center of the largest one ("majority rule"). The physical processes which occur when two droplets coalesce, in particular the movements of droplets on the substrate, are complicated. The resulting position is observed in experiments to be somewhere between the position of the largest droplet and the center of mass of the two coalescing droplets [11]. This has been analyzed in Refs. [10], and [11].

We use periodic boundary conditions to simulate this model. The quantities of interest in the system are droplet diameters d_i , distances between centers of neighboring droplets h_i (which we call intervals), and gaps between the droplets g_i . The coverage of the line is given by

$$C = \sum_i d_i / \sum_i h_i. \quad (5)$$

For convenience we denote the prefactor A of Eq. (1) as

$$A_i = w_i^{1/D} \quad (6)$$

where w_i is a weight factor. The coalescence of droplets i and $i+1$ will result in a droplet of weight $w = w_i + w_{i+1}$. Two droplets coalesce when the gap between them is filled. The gaps are given by

$$g_i = h_i - \frac{1}{2}(d_i + d_{i+1}) = h_i \left[1 - \frac{t^\mu}{\tau_i} \right] \quad (7)$$

with

$$\tau_i = \frac{2h_i}{w_i^{1/D} + w_{i+1}^{1/D}} \quad (8)$$

an effective coalescence time. If $\tau_k = \min_i \{\tau_i\}$ then at time $t = \tau_k^{1/\mu}$ the gap g_k will vanish, while all other gaps will still be nonzero. In this manner one does not need to take small time increments in the simulation, but can advance from one coalescence event to the next one, while keeping count of real time.

The simulations presented here concern systems of 100 000 initial droplets of equal weight with a random distribution of intervals uniformly distributed between 0 and 1. Figure 1 shows the coverage as a function of the average diameter \bar{d} for droplets with $D=3$. The coverage initially rises from zero and eventually reaches a constant value of 0.79. When the plateau is attained there are about 20 000 droplets left. The average diameter at that

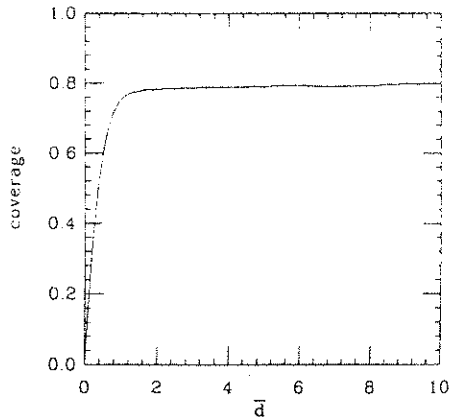


FIG. 1. Coverage as a function of the average diameter in the one-dimensional $D=3$ droplet model.

time is about the size of the largest interval at the beginning of the simulation. Its dependence in time follows a power law, as predicted by the scaling theory [10,11]. In Fig. 2 we plot distributions $p(\cdot)$ of lengths of intervals h , diameters d , and gaps g at five different times in the constant coverage regime, corresponding to 10000, 9000, 8000, 7000, and 6000 droplets left. These plots have been scaled by the average diameter at each time. The plots look superposed, indicating a self-similar regime with a single length scale. Note that there is very little overlap between the distributions of gaps and diameters, i.e., almost all gaps are smaller than the smallest droplet. In other words, these are almost-jammed states. Figure 3 shows the system of droplets along the line obtained by simulation of the model, starting with 1000 droplets, for final states of 50, . . . , 10 droplets left. These results are reproduced qualitatively for different dimensionalities of

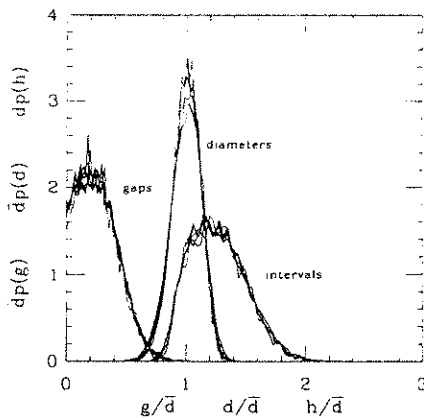


FIG. 2. Distributions of lengths of intervals, diameters, and gaps, in the one-dimensional $D=3$ droplet model, at five different times in the constant coverage regime corresponding to 10 000, 9000, 8000, 6000 droplets left.

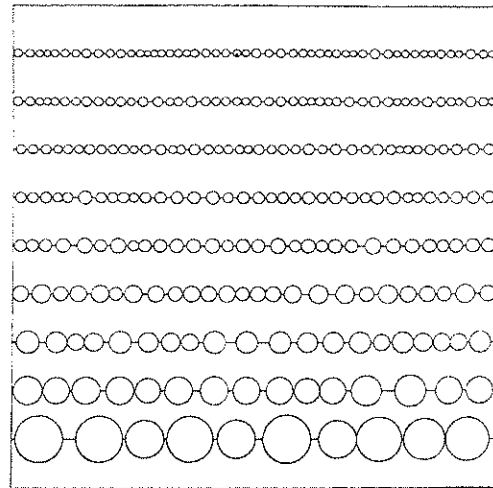


FIG. 3. Simulation of the one-dimensional $D=3$ droplet model: patterns obtained starting with 1000 droplets, for final states of 50, . . . , 10 droplets left.

droplets. The value of constant coverage in the scaling regime depends on the dimensionality of the droplets. In Fig. 4 we plot the constant coverage as a function of D . In the limit $D \rightarrow 1$ the coverage is 1 since in this case there is no contraction of the droplets in the coalescence [cf. Eq. (3)]. In the limit $D \rightarrow \infty$ one finds a coverage of 0.72. For comparison we have marked in Fig. 4 the value of the coverage in the jamming limit. One also finds that the distribution of diameters becomes narrower as D is increased which is a simple consequence of the rule for coalescence of droplets Eq. (3). In the limit $D \rightarrow \infty$, Eq. (3) becomes

$$d = \max\{d_i, d_j\} . \tag{9}$$

Therefore if initially one takes all droplets with the same size, this property remains true all along the evolution of

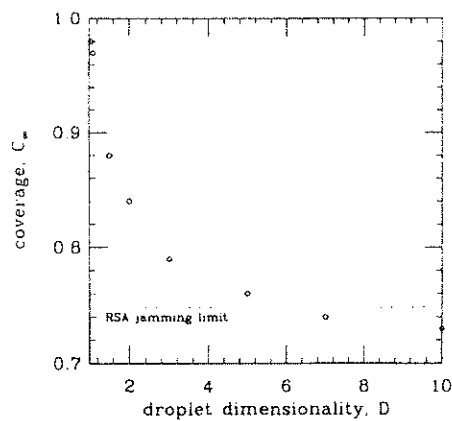


FIG. 4. Limit coverage as a function of the dimensionality D .

the system; in other terms the distribution of diameters is a δ function.

This remark leads us naturally to introduce the geometrical models of the following sections which, though much simpler, capture the essence of the model described in this section.

III. A GEOMETRICAL MODEL: THE "CUT-IN-TWO" MODEL

Consider a line with points scattered on it. At each step, one searches for the two closest points, and replaces these two points by a single point midway between them.

If we denote by h_i the interval separating the points i and $i+1$, the process can be described as searching for the shortest interval, which we denote by \bar{h} , cutting it in two and pasting each half to its neighboring interval.

The connection of this simplified model with the droplet model for breath figures described in the preceding section is seen if we place equally sized droplets, each centered on one of the points on the line, and allow the droplets to grow all at the same rate. When two droplets touch, at which time all the droplets are of diameter \bar{h} , they coalesce into a droplet of the same diameter centered in the middle of the coalescing droplets. This model resembles the infinite D -dimensional droplet model very much, though they differ with respect to the locations of the centers of the droplets after coalescence.

Let us give the results of a simulation of this model. The coverage as a function of \bar{h} may be computed numerically, using Eq. (5), with $d_i = \bar{h}$ for all i . Starting from zero, it rises up to a plateau at a value of $C=0.72$. In Fig. 5 we show the distribution of interval lengths at five different times in the constant coverage regime (same as those taken for Fig. 2), scaled by \bar{h} . This simple geometric model exhibits a long time behavior similar to the droplet model of the preceding section.

A. Mean-field theory

To study this geometrical model analytically, we start with a mean-field approximation, assuming no correla-

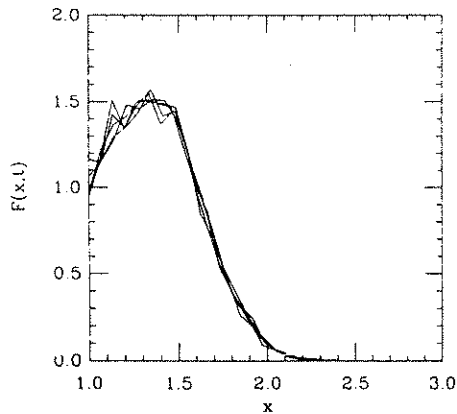


FIG. 5. Distribution of interval lengths at five different times (same as for Fig. 2) in the constant coverage regime, scaled by \bar{h} , for the cut-in-two model.

tions between lengths of neighboring intervals. This approach has already been presented elsewhere [12], but we describe it here for completeness.

To visualize this approximation, consider the following process: one has a sack with sticks of different lengths (representing the intervals). At each step one looks for the shortest stick in the sack, cuts it into two halves, and pastes them to two other sticks chosen at random from the sack.

We define $n_t(h)\delta h$ as the number of sticks of length between h and $h+\delta h$ at time t . The total number of sticks, the total length of the sticks, and the coverage are given, respectively, by

$$N_t = \int_{\bar{h}}^{\infty} n_t(h)dh, \quad (10)$$

$$L = \int_{\bar{h}}^{\infty} hn_t(h)dh, \quad (11)$$

$$C_t = \bar{h}N_t/L. \quad (12)$$

We can describe the evolution of $n_t(h)$ by a Smoluchovski equation [13]. During a time increment δt we coalesce all sticks of length between \bar{h} and $\bar{h}+\delta\bar{h}$. Using the fact that the probability of finding a stick of length h is $n_t(h)\delta h/N_t$, we can write

$$n_{t+\delta t}(h) = n_t(h) + \frac{2n_t(\bar{h})\delta\bar{h}}{N_t} [-n_t(h) + n_t(h - \frac{1}{2}\bar{h})\Theta(h - \frac{1}{2}\bar{h})] \quad (13)$$

the factor 2 arising since there are two sticks involved in each coalescence (apart from \bar{h}). The first term inside the square brackets corresponds to sticks of length h becoming sticks of length $h+\bar{h}/2$ under coalescence, the second to sticks of length $h-\bar{h}/2$ becoming sticks of length h . The total number of sticks remaining is

$$N_{t+\delta t} = N_t - n_t(\bar{h})\delta\bar{h}. \quad (14)$$

We next define $f_t(h)\delta h$ as the fraction of sticks of lengths between h and $h+\delta h$,

$$f_t(h) = n_t(h)/N_t, \quad (15)$$

which obeys, to first order in $\delta\bar{h}$, the equation

$$f_{t+\delta t}(h) = f_t(h) + [-f_t(h) + 2f_t(h - \frac{1}{2}\bar{h})\Theta(h - \frac{1}{2}\bar{h})] \times f_t(\bar{h})\delta\bar{h}. \quad (16)$$

As \bar{h} is the natural length scale in the problem it is convenient to define a scaled distribution $F(x,t)$ with support $(1, \infty)$ by

$$f_t(h) = \bar{h}^{-1}F(h/\bar{h}, t) \quad (17)$$

for which we find in the limits $\delta t \rightarrow 0$, $\delta\bar{h} \rightarrow 0$ a nonlinear partial differential equation

$$\gamma(t) \frac{\partial F(x,t)}{\partial t} = F(x,t) + x \frac{\partial F(x,t)}{\partial x} + F(1,t) [2F(x - \frac{1}{2}, t)\Theta(x - \frac{1}{2}) - F(x,t)] \quad (18)$$

where $\gamma(t) = \bar{h}(d\bar{h}/dt)^{-1}$ relates the minimal length \bar{h} with the physical time t . Since this relation is arbitrary in this model, we set $\gamma(t) = 1$. To solve Eq. (18) we introduce the Laplace transform of $F(x, t)$

$$\phi(p, t) = \int_1^\infty dx \exp(-px) F(x, t) \quad (19)$$

which obeys the equations

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial t} &= -p \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial p} \\ &+ F(1, t) [2 \exp(-p/2) - 1] \phi(p, t) \\ &- F(1, t) \exp(-p). \end{aligned} \quad (20)$$

While we could not solve the complete time evolution of this equation, its stationary solutions [i.e., with the left-hand side of Eq. (20) equal to 0 and $F(1, t) = F(1)$] are easily calculated. There exists a continuum of such solutions, each characterized by a parameter $F(1)$,

$$\phi(p) = F(1) \int_p^\infty dt \frac{1}{t} \exp \left[-t + F(1) \int_p^t du \frac{1 - 2 \exp(-u/2)}{u} \right]. \quad (21)$$

The unsolved question is to know which stationary solution (if any) is selected by a given initial condition. Let us note that Eq. (21) is obtained from Eq. (20) by considering that $\phi(p)$ and $F(1)$ are independent quantities. In fact, from the definition of $\phi(p)$, Eq. (19), they are related by a consistency relation:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} p e^p \phi(p) = F(1). \quad (22)$$

It is easy to check that $\phi(p)$ in Eq. (21) does satisfy this relation. The coverage in this asymptotic regime is given by $C_\infty = 1/\bar{x} = -1/\phi'(0)$. Expanding Eq. (21) for small p ,

$$1 - \phi(p) \sim p^{F(1)}, \quad (23)$$

we see that the only solution producing a finite nonzero value of the coverage is given by the choice $F(1) = 1$. This is in fact the asymptotic value for the scaled distribution found either by simulations of the model, or by iterating Eq. (16), for most initial distributions. In our previous work [12] we gave an argument based on the motion of the singularities in the complex plane of $\phi(p)$ to explain why the system converges to the solution with

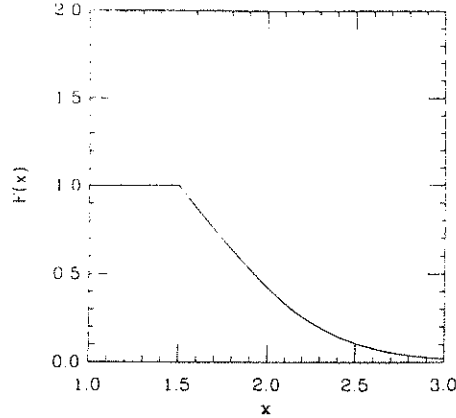


FIG. 6. Scaled distribution of interval lengths $F(x, t)$ in the mean-field theory, for the cut-in-two model.

$F(1) = 1$: if $\phi(p, 0)$ is analytic in the neighborhood of $p = 0$, the singularities go to infinity. Other stationary solutions with $F(1) < 1$ are nevertheless possible for some more special initial conditions. Finally the case $F(1) > 1$ is ruled out since it would correspond to distributions such that $\bar{x} = 0$. For $F(1) = 1$ we calculated a coverage of 0.646. In Fig. 6 we plot the scaled distribution of lengths $F(x, t)$ in the long time limit of the recurrence relation (16). Comparing Figs. 5 and 6, it is clear that the mean-field approach is not accurate enough for a quantitative understanding of this model.

B. Role of correlations

An exact treatment of the model needs to take into account the correlations between interval lengths, which may be done as follows. If we denote by $f_i^{(k)}(h_1, h_2, \dots, h_k)$ the probability of finding a k -tuple of successive intervals of lengths h_1, \dots, h_k at time t , we can write a hierarchy of recursion relations for the evolution in time of these probabilities, assuming that the coalescences occur one at a time. In a small time step δt , during which \bar{h} is changed by $\delta \bar{h}$, the first two equations read

$$\begin{aligned} f_{i+\delta t}^{(1)}(h_1) [1 - f_i^{(1)}(\bar{h}) \delta \bar{h}] &= f_i^{(1)}(h_1) - [f_i^{(2)}(\bar{h}, h_1) + f_i^{(2)}(h_1, \bar{h})] \delta \bar{h} \\ &+ \left[f_i^{(2)} \left[\bar{h}, h_1 - \frac{\bar{h}}{2} \right] + f_i^{(2)} \left[h_1 - \frac{\bar{h}}{2}, \bar{h} \right] \right] \Theta(h_1 - \frac{1}{2} \bar{h}) \delta \bar{h}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} f_{i+\delta t}^{(2)}(h_1, h_2) [1 - f_i^{(1)}(\bar{h}) \delta \bar{h}] &= f_i^{(2)}(h_1, h_2) - [f_i^{(3)}(\bar{h}, h_1, h_2) + f_i^{(3)}(h_1, h_2, \bar{h})] \delta \bar{h} \\ &+ f_i^{(3)} \left[\bar{h}, h_1 - \frac{\bar{h}}{2}, h_2 \right] \Theta(h_1 - \frac{1}{2} \bar{h}) \delta \bar{h} + f_i^{(3)} \left[h_1, h_2 - \frac{\bar{h}}{2}, \bar{h} \right] \Theta(h_2 - \frac{1}{2} \bar{h}) \delta \bar{h} \\ &+ f_i^{(3)} \left[h_1 - \frac{\bar{h}}{2}, \bar{h}, h_2 - \frac{\bar{h}}{2} \right] \Theta(h_1 - \frac{1}{2} \bar{h}) \Theta(h_2 - \frac{1}{2} \bar{h}) \delta \bar{h}. \end{aligned} \quad (25)$$

Unfortunately this infinite hierarchy of equations is intractable. Nevertheless it is possible to consider successive approximations to them. For instance, the mean-field theory approximation Eq. (16) described above consists in considering the intervals as independent, which implies that the probability $f_i^{(2)}(h_1, h_2)$ factorizes into the product $f_i^{(1)}(h_1)f_i^{(1)}(h_2)$ in the first equation. The next step consists in taking into account correlations between nearest neighbors only. This is done by means of a decomposition of sequence of intervals into overlapping independent pairs:

$$\begin{array}{c} \dots, h_1, h_2, h_3, h_4, \dots \\ \downarrow \\ \dots, (h_1, h_2), (h_2, h_3), (h_3, h_4), \dots \end{array} \quad (26)$$

A coalescence event where the three intervals h_1, \bar{h}, h_2 transform into the two intervals $h_1 + \bar{h}/2, h_2 + \bar{h}/2$ will be described by the transformation of four pairs into three

$$\begin{array}{c} (h_3, h_1), (h_1, \bar{h}), (\bar{h}, h_2), (h_2, h_4) \\ \downarrow \\ (h_3, h_1 + \frac{1}{2}\bar{h}), (h_1 + \frac{1}{2}\bar{h}, h_2 + \frac{1}{2}\bar{h}), (h_2 + \frac{1}{2}\bar{h}, h_4) \end{array} \quad (27)$$

The probability of finding a sequence of three intervals h_1, h_2, h_3 is given, in this approximation of independent pairs, by

$$f_i^{(3)}(h_1, h_2, h_3) = \frac{f_i^{(2)}(h_1, h_2)f_i^{(2)}(h_2, h_3)}{f_i^{(1)}(h_2)} \quad (28)$$

Equation (25) becomes

$$\begin{aligned} f_{i+\delta_i}^{(2)}(h_1, h_2)[1 - f_i^{(1)}(\bar{h})\delta\bar{h}] &= f_i^{(2)}(h_1, h_2) - f_i^{(2)}(h_1, h_2) \left[\frac{f_i^{(2)}(\bar{h}, h_1)}{f_i^{(1)}(h_1)} + \frac{f_i^{(2)}(h_2, \bar{h})}{f_i^{(1)}(h_2)} \right] \delta\bar{h} \\ &+ \frac{f_i^{(2)}(\bar{h}, h_1 - \frac{1}{2}\bar{h})f_i^{(2)}(h_1 - \frac{1}{2}\bar{h}, h_2)}{f_i^{(1)}(h_1 - \frac{1}{2}\bar{h})} \Theta(h_1 - \frac{1}{2}\bar{h})\delta\bar{h} \\ &+ \frac{f_i^{(2)}(h_1, h_2 - \frac{1}{2}\bar{h})f_i^{(2)}(h_2 - \frac{1}{2}\bar{h}, \bar{h})}{f_i^{(1)}(h_2 - \frac{1}{2}\bar{h})} \Theta(h_2 - \frac{1}{2}\bar{h})\delta\bar{h} \\ &+ \frac{f_i^{(2)}(h_1 - \frac{1}{2}\bar{h}, \bar{h})f_i^{(2)}(\bar{h}, h_2 - \frac{1}{2}\bar{h})}{f_i^{(1)}(\bar{h})} \Theta(h_1 - \frac{1}{2}\bar{h})\Theta(h_2 - \frac{1}{2}\bar{h})\delta\bar{h} \end{aligned} \quad (29)$$

We also define scaled probability densities $G(x, y, t)$ and $F(x, t)$ by

$$f_i^{(2)}(h_1, h_2) = \bar{h}^{-2} G(h_1/\bar{h}, h_2/\bar{h}, t), \quad (30)$$

$$f_i^{(1)}(h) = \bar{h}^{-1} F(h/\bar{h}, t). \quad (31)$$

The recurrence relation (29)—for which we did not find any analytical treatment—has been iterated in time. Again, after a sharp rise, the coverage settles off at a constant value of 0.69. In Fig. 7 we plot $F(x, t)$ obtained by iterating Eq. (29). Comparing this to Fig. 6 we see that this is a better approximation than the mean-field approximation, particularly in the fact that most of the weight of the distribution is between 1 and 2, signifying an almost-jammed state.

Nevertheless, this approximation, restricted to considering correlations between nearest neighbors, has only limited accuracy since it does not reproduce the full shape of $F(x, t)$ found in Fig. 5, which implies that the model exhibits more complex correlations. When one cuts the interval \bar{h} into two halves and pastes each of them to its neighbor, one creates a correlation between the lengths of the two resulting intervals. This may be checked by plotting (Fig. 8) the scaled correlation function γ_k for lengths of neighboring intervals, defined by

$$\gamma_k = \bar{h}^{-2} \overline{(h_i h_{i+k} - \bar{h}^2)}. \quad (32)$$

Since correlations decay rapidly with k one expects that higher-order approximations would lead to an improved $F(x, t)$, with a rapid convergence rate.

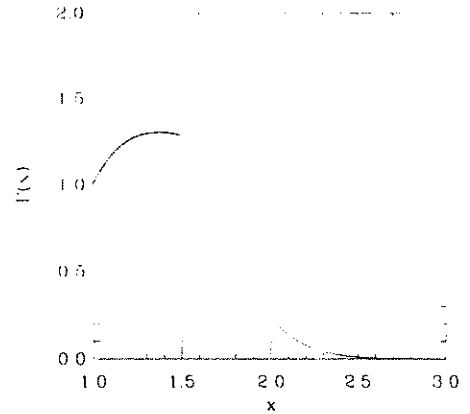


FIG. 7. Scaled distribution of interval lengths $F(x, t)$ in the pair correlation approximation, for the cut-in-two model.

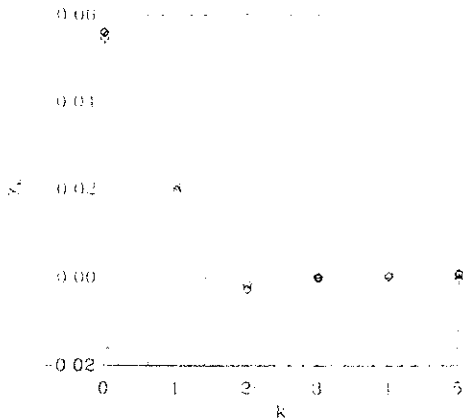


FIG. 8. Scaled correlation function γ_k for lengths of neighboring intervals, for the cut-in-two model.

IV. A SIMPLER GEOMETRICAL MODEL:
THE "PASTE-ALL" MODEL

Let us introduce a variant of the previous model. Again we start with randomly distributed intervals on the line. At each step one searches for the shortest interval which is now pasted as a whole to either one of its neighbors, with equal probability. Here too we look at the long time behavior of the system. A simulation of the model shows that the coverage of the line as a function of \bar{h} attains a constant value of $C \approx 0.56$ after a transient period. In Fig. 9 we show the scaled distribution of inter-

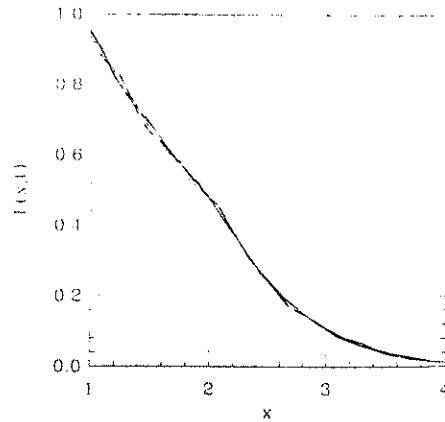


FIG. 9. Scaled distribution of interval lengths $F(x,t)$ for the paste-all model at five different times (same as for Fig. 2) in the scaling regime.

val lengths $F(x,t)$ at five different times in the scaling regime. The interest in this model becomes apparent when one looks at the scaled correlation function for lengths of neighboring intervals γ_k defined in Eq. (32). In Fig. 10 we plot γ_k at different times in the scaling regime. It is seen that there are no correlations between lengths of neighboring intervals, which indicates that a mean-field description should be exact.

This is in fact the case as will be shown now. Consider the first two equations of the hierarchy of recursion relations for the probabilities $f_i^{(k)}(h_1, h_2, \dots, h_k)$ defined as above:

$$f_{i+\delta t}^{(1)}(h_1)[1 - f_i^{(1)}(\bar{h})\delta\bar{h}] = f_i^{(1)}(h_1) - \frac{1}{2}[f_i^{(2)}(\bar{h}, h_1) + f_i^{(2)}(h_1, \bar{h})]\delta\bar{h} + \frac{1}{2}[f_i^{(2)}(\bar{h}, h_1 - \bar{h}) + f_i^{(2)}(h_1 - \bar{h}, \bar{h})]\Theta(h_1 - 2\bar{h})\delta\bar{h}, \tag{33}$$

$$f_{i+\delta t}^{(2)}(h_1, h_2)[1 - f_i^{(1)}(\bar{h})\delta\bar{h}] = f_i^{(2)}(h_1, h_2) - \frac{1}{2}[f_i^{(3)}(\bar{h}, h_1, h_2) + f_i^{(3)}(h_1, h_2, \bar{h})]\delta\bar{h} + \frac{1}{2}[f_i^{(3)}(\bar{h}, h_1 - \bar{h}, h_2) + f_i^{(3)}(h_1 - \bar{h}, \bar{h}, h_2)]\Theta(h_1 - 2\bar{h})\delta\bar{h} + \frac{1}{2}[f_i^{(3)}(h_1, \bar{h}, h_2 - \bar{h}) + f_i^{(3)}(h_1, h_2 - \bar{h}, \bar{h})]\Theta(h_2 - 2\bar{h})\delta\bar{h}. \tag{34}$$

It can now be seen that these probabilities factorize, that is, taking the form

$$f_i^{(k)}(h_1, \dots, h_k) = f_i(h_1)f_i(h_2) \dots f_i(h_k) \tag{35}$$

is consistent with each of the recurrence relations, to first order in $\delta\bar{h}$. Therefore it is sufficient to regard the relation

$$f_{i+\delta t}^1(h) = f_i^1(h) + f_i^1(\bar{h})f_i^1(h - \bar{h})\delta\bar{h}\Theta(h - 2\bar{h}) \tag{36}$$

which is found by the factorization of Eq. (33). Figure 11 shows the scaled distribution of intervals in the long time limit of iteration of Eq. (36), matching very well the distributions in Fig. 9.

The scaled probability distribution $F(x,t)$ obeys the partial differential equation

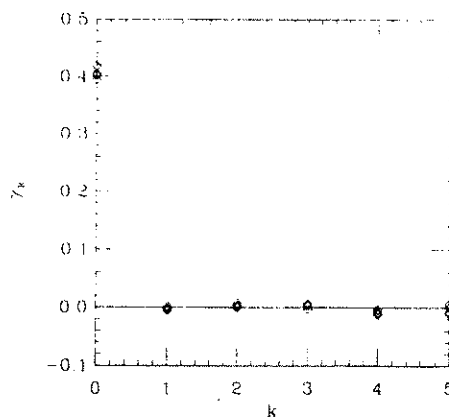


FIG. 10. Scaled correlation function γ_k for the paste-all model.

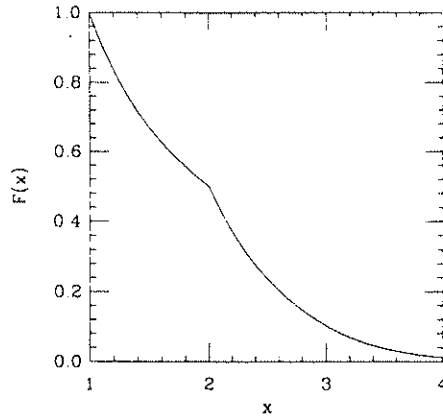


FIG. 11. Scaled distribution of interval lengths $F(x,t)$ for the paste-all model in the mean-field approximation.

$$\frac{\partial F(x,t)}{\partial t} = F(x,t) + x \frac{\partial F(x,t)}{\partial x} + F(1,t)F(x-1,t)\Theta(x-2) \quad (37)$$

[having set $\gamma(t)=1$] which reads, in Laplace space,

$$\frac{\partial \phi(p,t)}{\partial t} = -p \frac{\partial \phi(p,t)}{\partial p} + F(1,t)e^{-p}[\phi(p,t)-1]. \quad (38)$$

The stationary solutions of Eq. (38) are

$$\begin{aligned} \phi(p) &= 1 - \exp \left[-F(1) \int_p^\infty \frac{e^{-u}}{u} du \right] \\ &= 1 - \exp[-F(1)\text{Ei}(p)] \end{aligned} \quad (39)$$

where $\text{Ei}(p)$ is the exponential integral function. Arguing as before, only the solution with $F(1)=1$ corresponds to a distribution with a finite average, and therefore a finite coverage. The coverage C_∞ may be computed by expanding $\text{Ei}(p)$ around $p=0$:

$$\text{Ei}(p) \simeq -\gamma - \ln p \quad (40)$$

where $\gamma \approx 0.577$ is the Euler constant. Hence $\bar{x} = e^\gamma \approx 1.78$, implying that $C_\infty \approx 0.56$.

As mentioned in the preceding section, solutions with $F(1) > 1$ are unacceptable since they give $\bar{x} = 0$ which would correspond to stationary solutions with negative parts.

There remains the question of solutions with $F(1) < 1$. For this class of solutions, $\bar{x} = -\phi'(0) \rightarrow \infty$ which means these are slowly decaying distributions. In Fig. 12 we plot stationary solutions of Eq. (37) obtained by integrating the equation with $F(1)=0.5, 0.9, 0.99, 1$. One sees that indeed for $F(1) < 1$ the distributions display power-law decay, $F(x) \simeq x^{-(1+F(1))}$, while for $F(1)=1$ the decay is much faster. Let us consider the space of the distributions on the support $(1, \infty)$ with the dynamics given by Eq. (37). In this space, fixed points correspond to stationary solutions of Eq. (37) [given, alternatively, by the inverse Laplace transform of Eq. (38)]. It would be in-

teresting to know the size of the basins of attraction of these fixed points and whether there could be trajectories other than those which converge to these attractors.

One can study the stability of these fixed points to perturbations by looking at the eigenvectors of the linear operator obtained by linearizing Eq. (38) around a given fixed point. Consider an eigenvector of the linear operator obtained by linearizing Eq. (38) around a given fixed point. Consider an eigenvector of eigenvalue λ of this linearized operator. Inserting

$$\phi(p,t) = \phi(p) + \epsilon h(p)e^{-\lambda t}, \quad (41)$$

$$F(1,t) = F(1) + \epsilon g e^{-\lambda t}, \quad (42)$$

where $\phi(p)$ is a solution of the form (39), into Eq. (38) and retaining terms of the first order in ϵ , we find a differential equation for $h(p)$,

$$p h'(p) = [\lambda + F(1)e^{-p}]h(p) + g e^{-p}[\phi(p)-1]. \quad (43)$$

The solution of Eq. (43), under the constraint

$$\lim_{p \rightarrow \infty} p e^p h(p) = g \quad (44)$$

coming from the definition of the Laplace transform, is

$$h_\lambda(p) = g \exp \left[-F(1) \int_p^\infty \frac{e^{-u}}{u} du \right] \int_1^\infty \frac{e^{-ps}}{s^{1+\lambda}} ds. \quad (45)$$

Due to the normalization of $F(x)$ we have

$$h(0) = 0 \quad (46)$$

implying that $\lambda > -F(1)$. For $p \ll 1$ we find that $h_\lambda(p)$ behaves as

$$h(p) \simeq \begin{cases} p^{F(1)}, & \lambda > 0 \text{ (stable)} \\ p^{\lambda+F(1)}, & -F(1) < \lambda < 0 \text{ (unstable)}. \end{cases} \quad (47)$$

Since the behavior of $h(p)$ for $p \ll 1$ is related to the decay of the distribution for large x , this linear analysis around the fixed points shows that a given solution is unstable when adding to it perturbations which decrease

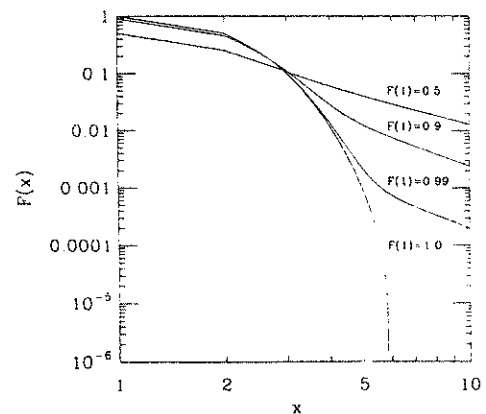


FIG. 12. Stationary solutions obtained by integrating Eq. (37) with $F(1)=0.5, 0.9, 0.99, 1$.

more slowly at infinity. We have not been able to solve the more general problem of the determination of the stationary solution towards which the evolution Eq. (38) converges for a given initial condition. Even generating numerically initial conditions that converge towards other stationary solutions than that given by $F(1)=1$ is not easy (when one starts with slowly decaying initial conditions, the evolution is so slow that we could never reach a stationary solution). Nevertheless we think that there should exist such initial conditions (other than starting with the stationary solution itself). In order to illustrate this possibility we treat in the Appendix a simple model for domain growth which also possesses a one-parameter family of stationary solutions. In this example one may explicitly show that the limiting stationary solution is determined by the tail of the initial distribution.

V. CONCLUSION

In this paper we have considered several simplified models for the problem of breath figures on a one-dimensional substrate. We have written and solved mean-field equations for these simplified models, which are analogous to Smoluchovski equations. These mean-field equations possess one-parameter families of scale-invariant solutions, each distribution being characterized by its decay at infinity. The solutions of these equations are exact for some cases (Sec. IV) whereas they are only approximate for the case discussed in Sec. III. We explained how to systematically improve the mean-field approximation.

The situation found in this problem is reminiscent of that encountered in the central limit theorem: the normal law is stable in the sense that the sum of many independent random variables with a common distribution gives—for most initial distributions—a normal (Gaussian) law after an appropriate rescaling. If the initial distribution is slowly decaying (as a power law) the addition of independent random variables leads to Lévy laws [14,15], i.e., to a one-parameter family of distributions described by a characteristic exponent. Here the distributions are stable in an analogous sense, which generalizes the previous one. The addition of random variables is replaced by the dynamics described in the preceding sections. The one-parameter family of scaled distributions is very similar to Lévy distributions, $F(1)$ playing here the role of the characteristic exponent of Lévy laws. In particular the case where $F(1)=1$, yielding the largest basin of attraction in the present problem, corresponds to the Gaussian, which has the largest basin of attraction for the problem of the addition of random variables.

The existence of such families of distributions is probably a much more general phenomenon, since it occurs also in several growth problems (cf. the Appendix and Refs. [16] and [17]). Moreover, the evolution of the distribution of distances is governed by nonlinear equations [Eqs. (18), and (37)] very similar to those which appear in problems of spinoidal decomposition [18].

The case of two-dimensional breath figures may be treated in the same way. We have computed the scaling distributions of interdroplet distances numerically, for the cut-in-two model or for the paste-all one. In both

cases one finds a scale-invariant curve with a shape similar to that found in the one-dimensional case or for the problem studied in the Appendix.

Finally some comments concerning the link between the RSA problem and breath figures are in order. The patterns found in breath figures look almost jammed and therefore resemble those of the RSA problem. Also the values of the coverages are very close in both problems. However, the distributions of interdroplet distances (in the case of breath figures) or of interbond distances (in the case of the RSA problem) are different [12]. Moreover, in the case of breath figures the system is driven to a scale-invariant regime with no counterpart in the RSA problem.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank D. Beysens, H. Flyvbjerg, P. Guénoun, and A. Steyer for useful discussions.

APPENDIX

In this appendix we give the solution of an extremely simple model of domain growth: a Potts model in one dimension at zero temperature. The problem of domain growth following a "quench" of a system of spins below its transition temperature has incited numerous theoretical works in the last few years. Quite a good understanding has been achieved for continuous theories in arbitrary dimension [19–23], but there still exist very few exactly soluble cases [18,24]. In one dimension Bray [25] has been able to calculate the pair correlation function for an Ising chain at zero temperature. He found an exact asymptotic form valid in the limits of long time and large distance.

Another exactly soluble case, even more simple, is the Potts model in one dimension in the limit of an infinite number of states. The infinite state Potts model has been used for studying the formation of polycrystalline aggregates [26] and the dynamics of soap froth [27,28].

In one dimension, for a large system and in the limit of long time, the dynamics of the Potts model at zero temperature can be treated as the diffusion of domain walls (as the walls are points) [29]. These walls diffuse and when two walls meet (signifying the elimination of a domain) one of two possibilities occurs: (i) if the two domains neighboring the disappearing domain are of the same state, the two walls are annihilated and the two domains merge into one; or (ii) if the two domains neighboring the disappearing domain are of different states, the two walls are replaced by a single diffusing wall between the two domains.

In the case of the Ising model (two states), only the first possibility occurs. In the infinite Potts model case, which we consider, it suffices to look at the evolution of a single domain bounded by two walls performing independent random walks [30]. If the two walls meet, the domain is eliminated, so we are interested only in the case that they do not meet. It is well known that the probability $p(z,y,t)$ of finding the two random walkers (which never meet between time 0 and t) at a distance z at time t , starting at a distance y is

$$\rho(z, y, t) = \frac{\exp[-(z-y)^2/4t] - \exp[-(z+y)^2/4t]}{\sqrt{4\pi t}} \quad (\text{A1})$$

when the diffusion constant of each walker is 1.

Following a quench of the spin system from a high temperature to zero temperature there is a density of sizes of domains, which we shall denote by $\rho(y, 0)$. This means that at time $t=0$ there are $L\rho(y, 0)$ domains of size y in a sample of length L . Given this density at time $t=0$, the density of domains of length z at a later time t is given by

$$\begin{aligned} \rho(z, t) &= \int_0^\infty dy \rho(y, 0) p(z, y, t) \quad (\text{A2a}) \\ &= \frac{\exp(-z^2/4t)}{\sqrt{4\pi t}} \int_0^\infty dy \rho(y, 0) \exp(-y^2/4t) \\ &\quad \times 2 \sinh(zy/2t) \quad (\text{A2b}) \end{aligned}$$

with z positive. The total number of domains decreases with time. For the asymptotic form of $\rho(z, t)$ in the long time limit, as its evolution is governed by a diffusion process, we are interested in z of the order of \sqrt{t} . We first consider the case of an initial density with a finite first moment at time $t=0$. In this case we can develop the integrand of Eq. (A2b) to first order in y/\sqrt{t} to find

$$\rho(z, t) \approx \frac{z \exp(-z^2/4t)}{2\sqrt{\pi t}^{3/2}} \int_0^\infty dy \rho(y, 0) y. \quad (\text{A3})$$

Integrating Eq. (A3) over z we have

$$\int_0^\infty dz \rho(z, t) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \int_0^\infty dy \rho(y, 0) y \quad (\text{A4})$$

from which we conclude that the number of domains diminishes as $t^{-1/2}$. Let us define a scaled distribution function $F(x, t)$, normalized to 1, by

$$F(x, t) dx = \left[\int_0^\infty dz' \rho(z', t) \right]^{-1} \rho(z, t) dz \quad (\text{A5})$$

with $x = z/\sqrt{2t}$, thus obtaining

$$F(x, t) = x \exp(-x^2/2), \quad (\text{A6})$$

which is time independent [30].

Let us compare this result with a simulation of this model. Starting with 10 000 domains on a line with cyclic boundary conditions, with sizes chosen at random from a uniform distribution between 1 and 50, we let the boundary walls perform random walks in parallel. Shown in Fig. 13 are the distributions of domain sizes at four different times (when there are 5000, 4500, 4000, and 3000 domains left) scaled by the average domain size (in diamonds) and Eq. (A6) (solid line, scaled by \bar{x}), showing good agreement.

We next consider the case of a slowly decaying initial density such that its first moment is divergent. We assume that for $y \gg 1$

$$\rho(y, 0) \approx \frac{A}{y^{1+\alpha}} \quad (\text{A7})$$

with $0 < \alpha < 1$. Performing a change of variables in the integral in Eq. (A2b), $u = y/\sqrt{2t}$, we see that only the

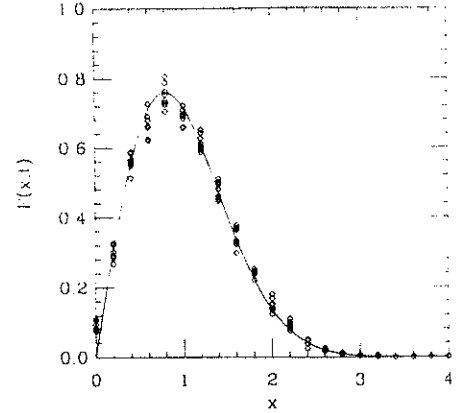


FIG. 13. Stationary distribution for the one-dimensional Potts model with a bounded initial distribution of domains (see text).

asymptotic form (A7) of $\rho(y, 0)$ is important and one obtains

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &\approx \frac{A \exp(-z^2/4t)}{\sqrt{2\pi}(2t)^{(1+\alpha)/2}} \\ &\quad \times \int_0^\infty du \frac{\exp(-u^2/2) 2 \sinh(zu/\sqrt{2t})}{u^{1+\alpha}}. \quad (\text{A8}) \end{aligned}$$

Integrating over z one finds that the number of domains decreases as $t^{-\alpha/2}$. As $0 < \alpha < 1$, the decrease is slower than in the first case. Using Eq. (A5) we calculate the scaled normalized distribution for this case

$$F(x, t) = C \exp(-x^2/2) \int_0^\infty du \frac{\exp(-u^2/2) 2 \sinh(xu)}{u^{1+\alpha}} \quad (\text{A9})$$

where C is a normalization constant. Again we find that $F(x, t)$ is time independent. For $x \gg 1$, $2 \sinh(xu)$

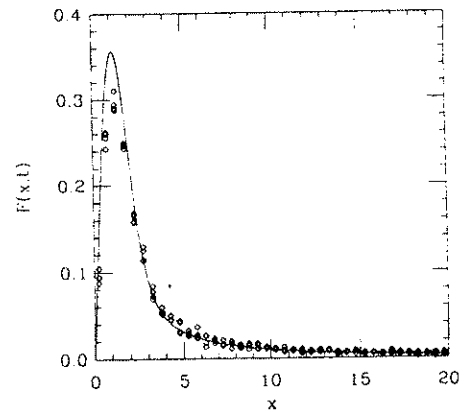


FIG. 14. Stationary distribution for the one-dimensional Potts model with a slowly decaying initial distribution of domains (see text).

$\cong \exp(xu)$ and one can see that $F(x,t)$ decays as $x^{-(1+\alpha)}$.

In Fig. 14 we show the domain size distributions found from a simulation, this time with a slowly decreasing initial distribution of sizes with an exponent $\alpha=0.5$. The distributions (in diamonds) are scaled by $\sqrt{2t}$ and compared with Eq. (A9) (solid line), again in good agreement. This example is thus an exactly soluble model which is driven in the long time limit to stationary scaling distributions. There is a whole family of such stationary solutions, indexed by the exponent α . The solution towards which the system is driven is selected by the initial conditions, specifically by the tail of the distribution. If the initial distribution decays quickly enough, such that its first

moment is finite, it converges to the solution (A6), which exhibits Gaussian decay. This solution is the analog of the solutions with $F(1)=1$ in the preceding sections. If, on the other hand, the initial distribution decays slowly, namely, as a power law, we have seen that it converges to a different stationary solution, (A9), which decays at the same rate as the initial distribution. This is the analog of solutions with $0 < F(1) < 1$ of the preceding sections.

Lastly, let us remark that since the limiting distribution can be found by considering only a single domain, one expects that here, as in Sec. IV, a mean-field theory would give the exact scale-invariant distribution of domains.

-
- [1] D. Beysens and C. M. Knobler, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1433 (1986), and references to earlier works therein.
- [2] A. Steyer, P. Guenoun, D. Beysens, D. Fritter, and C. M. Knobler, *Europhys. Lett.* **12**, 211 (1990).
- [3] D. Fritter, Ph.D. thesis, University of California, Los Angeles, 1989.
- [4] B. J. Briscoe, and K. P. Galvin, *J. Phys. D* **23**, 422 (1990).
- [5] A. Rényi, *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.* **3**, 109 (1958).
- [6] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **44**, 3888 (1966).
- [7] R. Swendsen, *Phys. Rev. A* **24**, 504 (1981), and other references therein.
- [8] D. Fritter, C. M. Knobler, D. Roux, and D. Beysens, *J. Stat. Phys.* **52**, 1447 (1988).
- [9] P. Meakin and F. Family, *J. Phys. A* **22**, 225 (1989).
- [10] F. Family, and P. Meakin, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 428 (1988); *Phys. Rev. A* **40**, 3836 (1989).
- [11] J. L. Viovy, D. Beysens, and C. M. Knobler, *Phys. Rev. A* **37**, 4965 (1988).
- [12] B. Derrida, C. Godrèche, and I. Yekutieli, *Europhys. Lett.* **12**, 385 (1990).
- [13] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [14] P. Lévy, *Théorie de l'addition des variables aléatoires* (Gauthier-Villars, Paris, 1954).
- [15] B. V. Gnedenko, and A. N. Kolmogorov, *Limit Distributions for Sums of Independent Random Variables* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1954).
- [16] A. J. Bray, K. Humayun, and T. J. Newman, *Phys. Rev. B* **43**, 3699 (1991).
- [17] K. Humayun, and A. J. Bray, *J. Phys. A* **24**, 1915 (1991).
- [18] A. Coniglio, and M. Zanetti, *Europhys. Lett.* **10**, 575 (1989).
- [19] J. Langer, in *Solids far from Equilibrium*, edited by C. Godrèche (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1991), Chap. 3.
- [20] A. J. Bray, *Phys. Rev. B* **41**, 6724 (1990).
- [21] O. G. Mouritsen, and J. P. Shah, *Phys. Rev. B* **40**, 11445 (1989).
- [22] O. G. Mouritsen, in *Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces*, edited by M. G. Lagally (Plenum, New York, in press).
- [23] J. P. Shah and O. G. Mouritsen, *Phys. Rev. B* **41**, 7003 (1990).
- [24] D. Kandel and E. Domany, *J. Stat. Phys.* **58**, 685 (1990).
- [25] A. J. Bray, *J. Phys. A* **23**, L67 (1990).
- [26] M. P. Anderson, D. J. Srolovitz, G. S. Grest, and P. S. Sahni, *Acta Metall.* **32**, 783 (1984).
- [27] C. S. Smith, in *Metal Interfaces*, edited by C. Herring (American Society for Metals, Metals Park, OH, 1952), p. 65.
- [28] H. Flyvbjerg, and C. Jeppesen, *Phys. Scr.* **T38**, 49 (1991).
- [29] The same system has been studied independently by H. Flyvbjerg (private communication).
- [30] D. Ben Avraham, M. A. Burschka, and C. R. Doering, *J. Stat. Phys.* **60**, 695 (1990).

1.5.3 Calcul par la méthode des caractéristiques [14]

Nous allons reprendre l'équation (37) de l'article de *Physical Review A*. Cette équation décrit l'évolution temporelle de la distribution des distances entre points voisins, mise à l'échelle de la distance minimale h_0 .

$$t \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} = F(x, t) + x \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} + F(1, t)F(x-1, t)\theta(x-2) \quad (1.43)$$

La fonction $F(x, t)$ est définie pour $x > 1$ et pour $t > t_0$. Il faut remarquer une petite modification par rapport à l'article, le facteur t devant la dérivée temporelle de $F(x, t)$. Cela représente un choix différent de la fonction $\gamma(t)$, que nous trouvons plus avantageux pour la suite. Ce facteur change seulement l'échelle du temps dans l'équation. La transformée de Laplace de $F(x, t)$

$$\phi(p, t) = \int_1^{\infty} dx e^{-px} F(x, t) \quad (1.44)$$

obéit à l'équation

$$t \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial t} = -p \frac{\partial \phi(p, t)}{\partial p} + F(1, t)e^{-p}[\phi(p, t) - 1] \quad (1.45)$$

avec la condition initiale $\phi(p, t_0)$. Les conditions aux limites pour l'équation sont $\phi(0, t) = 1$ et $\phi(p \rightarrow \infty, t) = 0$. Cette équation aux dérivées partielles n'est pas linéaire puisque $F(1, t)$ est donnée par

$$F(1, t) = \lim_{p \rightarrow \infty} p e^p \phi(p, t) . \quad (1.46)$$

Pour résoudre l'équation, nous allons considérer que la fonction $F(1, t)$ est connue, et seulement à la fin, nous allons utiliser l'équation (1.46) comme condition d'auto-cohérence sur la solution.

La méthode des caractéristiques consiste à supposer que la fonction $\phi(p, t)$ a la forme

$$\phi(p, t) = G(p \chi(t), t) . \quad (1.47)$$

La fonction $\chi(t)$ est choisie de façon à éliminer la dérivée partielle de $\phi(p, t)$ par rapport à p . Pour cela, on choisit $\chi(t) = 1/t$. On trouve la solution de l'équation (1.45)

$$\phi(p, t) = 1 - \left[1 - \phi\left(\frac{pt_0}{t}, t_0\right) \right] \exp \left\{ \int_{t_0}^t ds F(1, s) \frac{e^{-ps/t}}{s} \right\} . \quad (1.48)$$

Cette solution a encore une forme implicite, due à la présence de $F(1, t)$.

On peut réécrire la solution

$$\begin{aligned}
[1 - \phi(p, t)] \exp \left\{ \int_p^\infty du F \left(1, \frac{tu}{p} \right) \frac{e^{-u}}{u} \right\} \\
= \left[1 - \phi \left(\frac{pt_0}{t}, t_0 \right) \right] \exp \left\{ \int_{t_0}^\infty ds F(1, s) \frac{e^{-ps/t}}{s} \right\} . \quad (1.49)
\end{aligned}$$

Supposons que $F(1, t)$ est borné dans la limite $t \rightarrow \infty$. Alors, le membre de gauche de (1.49) tend vers une fonction non divergente de p . Pour $t \gg 1$ et p fini

$$1 - \phi \left(\frac{pt_0}{t}, t_0 \right) \sim \left(\frac{pt_0}{t} \right)^\alpha \quad (1.50)$$

où l'exposant α dépend de la décroissance pour x grand de la distribution initiale $F(x, t_0)$. Si cette distribution décroît de façon à ce que son premier moment soit fini, alors $\alpha = 1$. Sinon, si la queue de la distribution se comporte comme $x^{-1-\beta}$ avec $0 < \beta < 1$, alors $\alpha = \beta$. En utilisant le fait que pour $z \ll 1$

$$\int_z^\infty du \frac{e^{-u}}{u} \simeq -\gamma - \ln z , \quad (1.51)$$

on peut exprimer le membre de droit de (1.49), pour $t \gg 1$, comme

$$C \exp \left\{ \int_{t_0}^\infty ds \frac{e^{-ps/t}}{s} [F(1, s) - \alpha] \right\} . \quad (1.52)$$

Dans la limite $t \rightarrow \infty$, cette expression diverge, sauf si

$$F(1) \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} F(1, t) = \alpha . \quad (1.53)$$

La queue de la distribution initiale détermine la forme asymptotique de la distribution. Cette solution a la forme donnée dans l'équation (39) de l'article

$$\phi(p, t) = 1 - \exp \left\{ -F(1) \int_p^\infty du \frac{e^{-u}}{u} \right\} . \quad (1.54)$$

Cette solution vérifie la condition d'auto-cohérence (1.46).

1.6 Modèles simplifiés à deux dimensions

Dans cette section, nous présentons deux extensions du modèle géométrique à deux dimensions d'espace. Dans le cas unidimensionnel, les points sont ordonnés le long de la ligne. Nous avons étudié la distribution des distances entre points voisins. A deux dimensions, les points ne sont plus ordonnés et on a besoin de définir la notion de voisinage

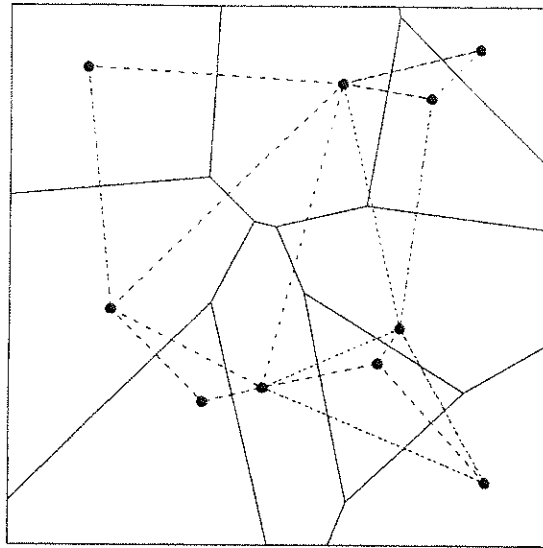


Figure 1.2 : La tessellation de Voronoï de 10 points, en traits continus, et le réseau de Delauney, en traits pointillés.

Celui-ci est déterminé au moyen de la tessellation de Voronoï : étant donné des points \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, N$) dans le plan, à chaque point \mathbf{r}_i on associe l'ensemble des points qui sont plus proches de ce point que des autres points \mathbf{r}_j ($j \neq i$). Dans la figure (1.2), nous présentons la tessellation de Voronoï de 10 points en traits continus. Les traits pointillés qui joignent chaque paire de points voisins constituent le réseau de Delauney, dual à la tessellation de Voronoï.

Pour construire les tessellations, nous avons utilisé l'algorithme itératif de Green et Sibson [15]. Les points sont introduits un par un, la cellule d'un nouveau point introduit est tracée par rapport aux points avoisinants. Le processus de construction d'une cellule est purement local. Le temps de calcul est de l'ordre de $N^{3/2}$, le facteur $N^{1/2}$ venant de la recherche du point le plus proche du nouveau point. Il est aussi possible d'effectuer le processus inverse d'élimination d'un point.

L'introduction de la tessellation de Voronoï sert à étudier les modèles de figures de souffle, mais en même temps, elle définit des modèles de structures cellulaires évolutives. A présent, nous allons étudier certains aspects métriques de ces modèles, tandis que les aspects liés aux structures cellulaires seront présentés dans la deuxième partie.

1.6.1 Modèle géométrique

Ce modèle a la même règle dynamique que le modèle géométrique à une dimension : étant donné des points dans le plan, à chaque itération, on cherche les deux points les plus proches, et on les remplace par un seul point au milieu.

Nous avons simulé ce modèle sur un carré avec des conditions aux limites périodiques. Dans les figures (1.3a-d), nous montrons les figures de souffle, et les tessellations de Voronoï correspondantes, à 4 instants pendant l'évolution du système. La figure (1.3a) montre une configuration initiale de 1000 points mis au hasard. Dans les figures (1.3b-d) il reste, respectivement, 600, 200 et 100 points.

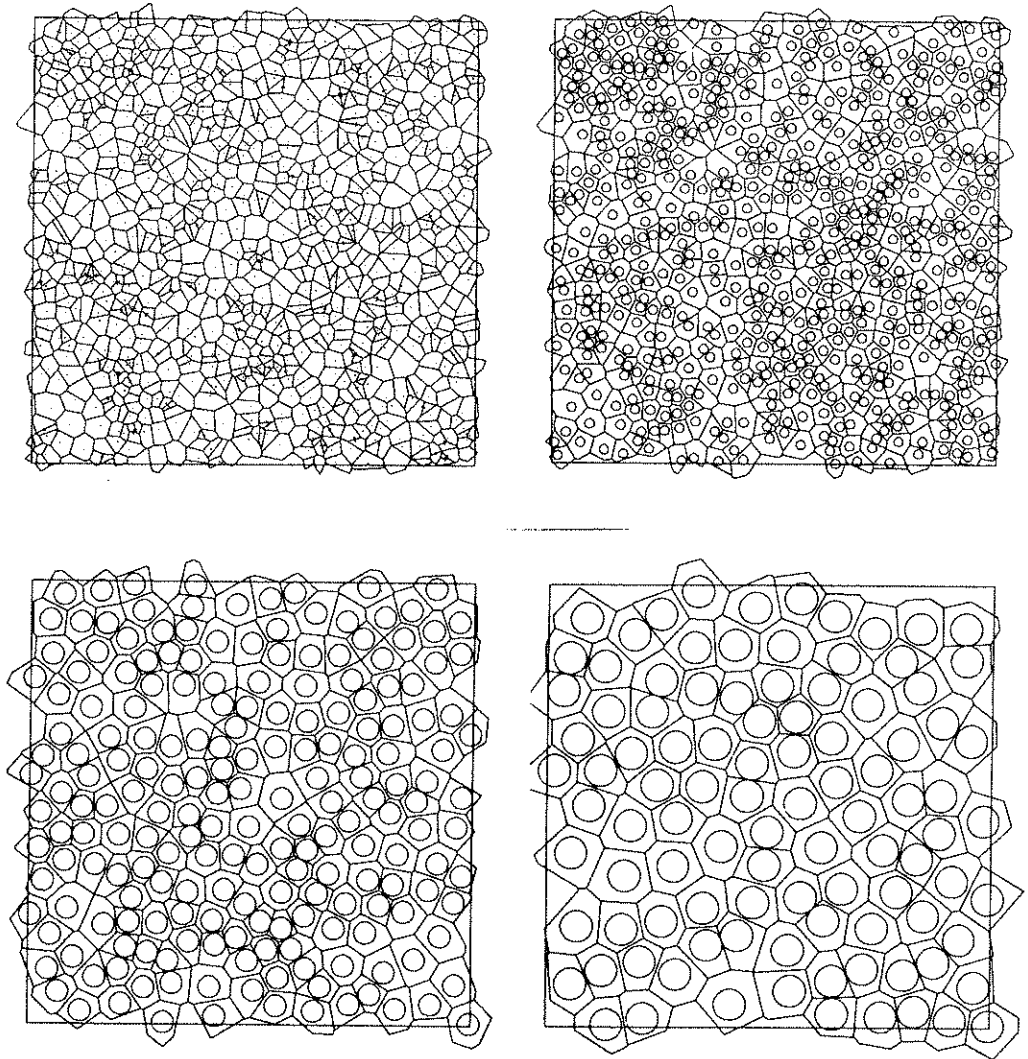


Figure 1.3a-d : Des images du système pendant l'évolution du modèle géométrique, avec les tessellations de Voronoï, quand il reste 1000, 600, 200 et 100 points.

Dans les deux dernières figures, le système est déjà dans le régime d'échelle.

Les figures suivantes sont prises d'une simulation avec 50 000 points initiaux. La figure (1.4) montre le nombre de points en fonction de h_0 , la distance minimale entre les points, en échelle log-log. Cette courbe a un comportement linéaire à partir de $h_0 \sim 0.02$, ce qui est le signe du régime d'échelle, avec une pente de -2 . Puisque l'aire totale est constante, l'aire moyenne des cellules est proportionnelle à $1/N$. Dans le régime d'échelle, l'aire moyenne des cellules est proportionnelle au carré de la longueur minimale, ce qui donne

$$N \sim h_0^{-2} . \quad (1.55)$$

La couverture, tracée dans la figure (1.5), atteint un plateau dans le régime d'échelle, avec une valeur de 0.42.

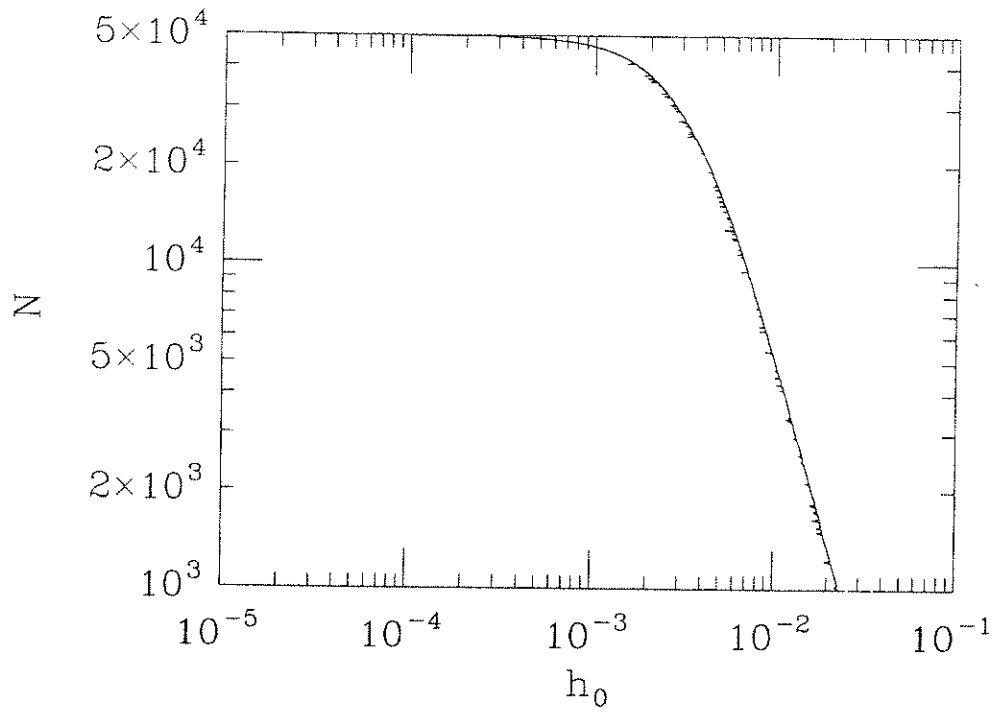


Figure 1.4 : Le nombre de points en fonction de h_0 , la distance minimale entre les points, pour le modèle géométrique à deux dimensions.

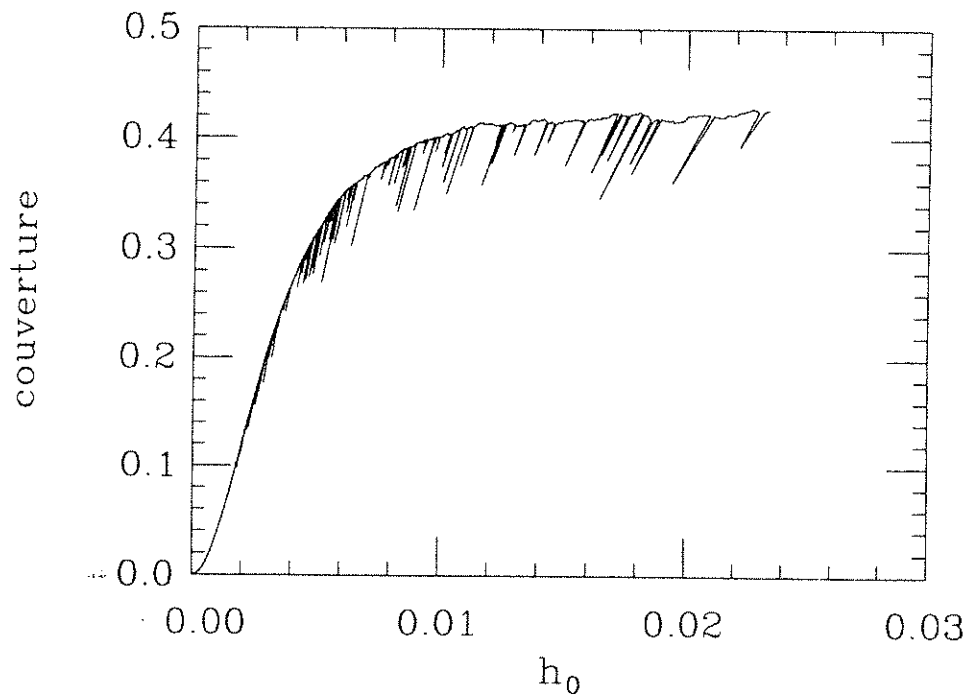


Figure 1.5 : La couverture en fonction de h_0 , atteint un plateau dans le régime d'échelle.

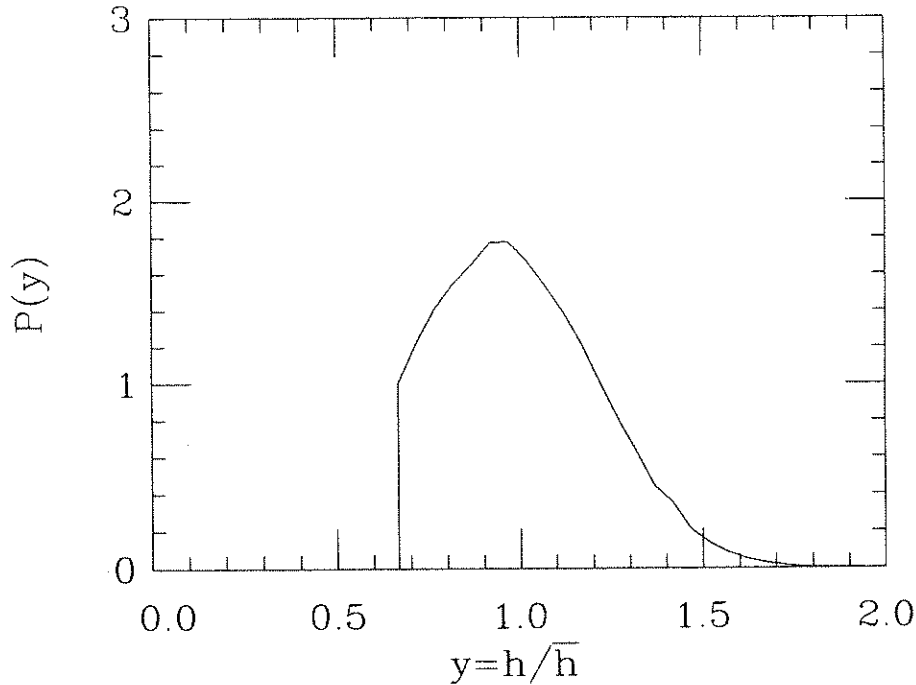


Figure 1.6 : La distribution des distances entre points voisins $P(h)$ dans le régime d'échelle, mise à l'échelle de la distance moyenne \bar{h} .

Les sauts dans ces deux courbes sont dus à des “coalescences multiples” : il peut arriver que le nouveau point créé entre deux points qui coalescent (avec une distance h_0 entre eux) soit à une distance plus petite que h_0 d'un autre point. Ces deux points deviennent les plus proches, et h_0 devient plus petit. La prochaine coalescence s'effectue entre ces deux points.

Dans le régime d'échelle, les différentes distributions restent constantes, à part un changement d'échelle. Dans la figure (1.6) nous avons tracé la distribution des distances entre points voisins $P(h)$. Cette distribution est mise à l'échelle de la distance moyenne \bar{h} et moyennée sur 5 instants différents. La distribution est discontinue à $h = h_0$; il n'y a pas de distances plus petites que h_0 , mais il y a une fraction non nulle de paires de points à des distances plus grandes que h_0 de δh_0 infinitésimal. Nous avons vu le même phénomène dans le cas unidimensionnel.

La notion de limite d'encombrement (*jamming limit*) vient du processus de RSA (*Random Sequential Adsorption*). A deux dimensions, on place itérativement des disques de même rayon en des positions choisies au hasard. Si un nouveau disque recouvre un autre disque déjà placé, ce premier est enlevé, sinon il reste en place. Quand il ne reste plus de place libre pour poser des disques sans recouvrement, on est à la limite d'encombrement. Des simulations numériques de RSA montrent que dans cette limite, 55% de la surface est couverte de disques. Cette valeur est très proche de la couverture des figures de soufflé sur un substrat bidimensionnel, et un peu plus élevée que la valeur de la couverture dans le modèle géométrique à deux dimensions. Cependant, l'état du système

dans le régime d'échelle de ce modèle est presque encombré (*jammed*). Supposons que chaque triplet de gouttes voisines se trouve sur les sommets d'un triangle équilatéral de côtés de longueur h^* . Chacune des gouttes a un diamètre de h_0 , la distance minimale entre les centres des gouttes. Si on veut introduire une goutte supplémentaire de même diamètre entre les trois premières, il faut que h^* soit plus grand que $\sqrt{3}h_0$ (voir la figure (1.7)). Dans le régime d'échelle $h_0 \simeq 0.67\bar{h}$ et, par conséquent, il faut que $h^* \geq 1.16\bar{h}$. L'inspection de la distribution des distances entre les gouttes montre que la plupart des distances sont plus petites que cela.

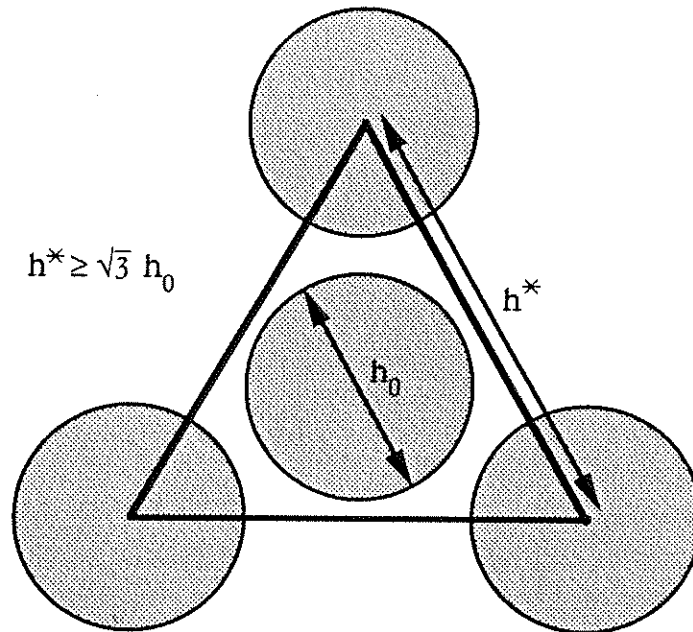


Figure 1.7 : Trois gouttes de diamètre h_0 sont à une distance h^* l'une des autres. Pour pouvoir introduire une goutte de même diamètre entre eux, il faut que $h^* \geq \sqrt{3}h_0$.

La figure (1.8) montre la distribution $P(A)$ des aires des polygones de Voronoï. Là aussi, la distribution est mise à l'échelle de l'aire moyenne \bar{A} et moyennée sur 5 instants différents dans le régime d'échelle. Cette distribution décroît continuellement vers les petites aires.

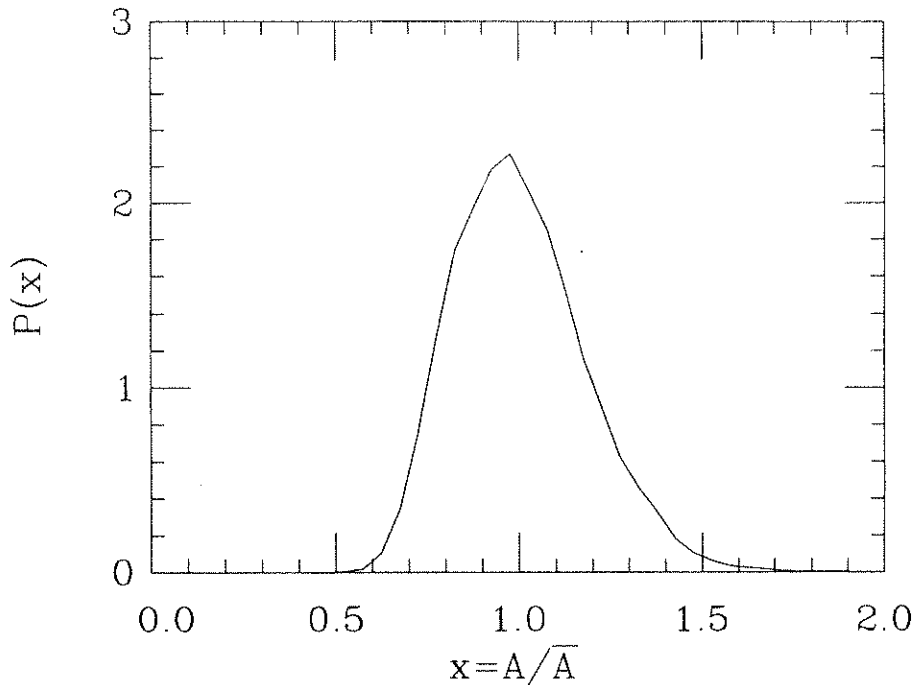


Figure 1.8 : La distribution des aires des polygones de Voronoï $P(A)$ dans le régime d'échelle, mise à l'échelle de l'aire moyenne \bar{A} .

1.6.2 Modèle cellulaire

Dans le modèle géométrique à une dimension, la dynamique consiste à prendre l'objet le plus petit (un intervalle) et à le répartir entre ses voisins. La taille totale des objets (la longueur totale des intervalles) est conservée. Nous avons introduit un modèle à deux dimensions où on effectue une opération similaire, cette fois-ci sur des objets bidimensionnels : étant donné des points dans le plan, à chaque itération, on élimine le point avec le polygone de Voronoï le plus petit.

En éliminant un point, l'aire de son polygone est répartie entre les polygones voisins, et l'aire totale est conservée.

Dans les figures (1.9a-d), nous montrons les points avec les tessellations de Voronoï correspondantes, à 4 instants pendant l'évolution du système. La figure (1.9a) montre la configuration initiale de 1000 points mis au hasard indépendamment, tandis que dans la figure (1.9b) il reste 600 points. Les figures (1.9c-d) montre le système dans le régime d'échelle avec, respectivement, 200 et 100 points restants.

Nous avons simulé le modèle avec une configuration initiale de 50 000 points. Dans la figure (1.10) nous avons tracé le nombre de points en fonction de l'aire minimale des polygones, A_0 . Cette courbe, en échelle log-log, se comporte linéairement à temps long, avec une pente de -1 .

Dans ce modèle, la couverture de la surface n'a plus la même signification que dans le modèle précédent. La règle n'est plus de "coalescer" des gouttes qui sont en contact. La distance minimale entre les points peut rester constante pendant longtemps. Cela se voit clairement dans la figure (1.11) où nous avons

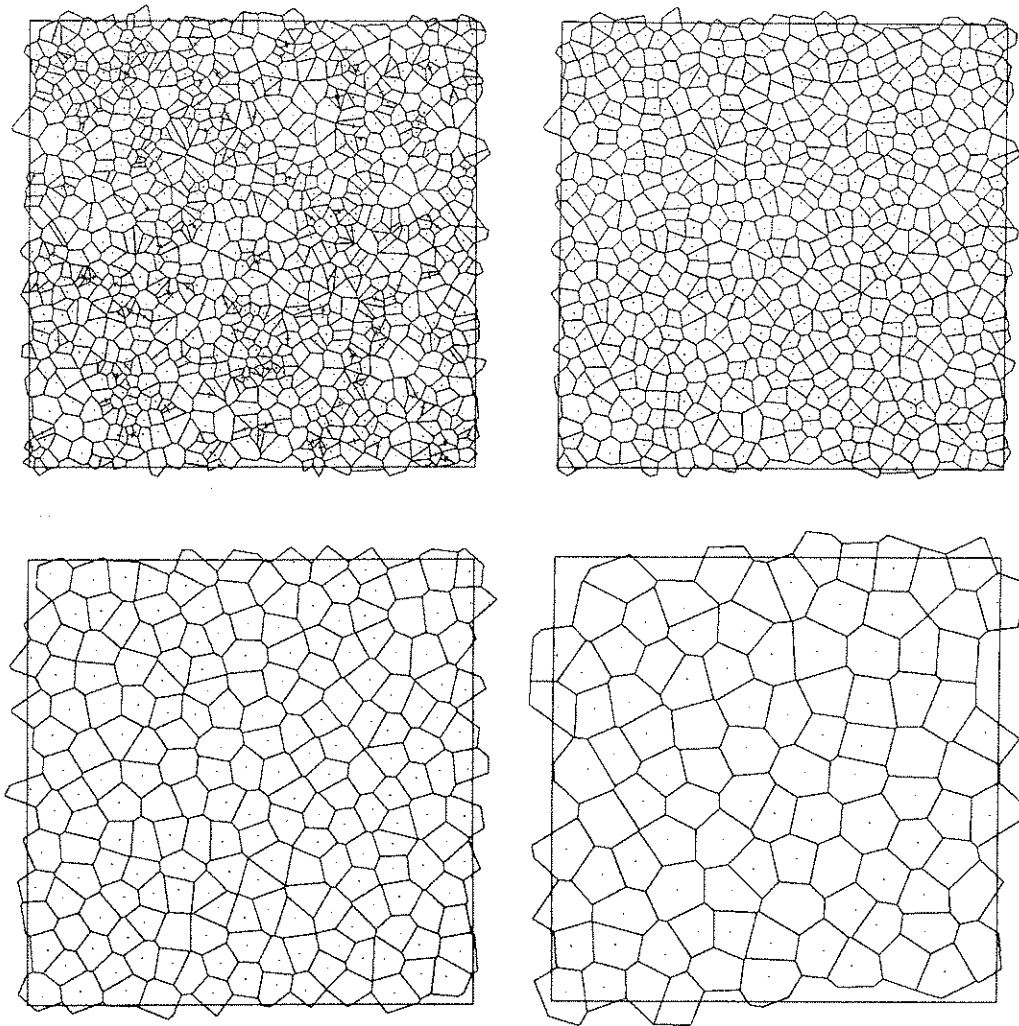


Figure 1.9a-d : Des images du système pendant l'évolution du modèle cellulaire, quand il reste 1000 , 600, 200 et 100 points.

tracé la couverture en fonction de l'aire minimale. La couverture croît par un saut chaque fois que la distance minimale augmente, puis décroît continûment par la décroissance du nombre des points. La couverture fluctue autour d'une valeur de 0.2.

Dans la figure (1.12) nous avons tracé la distribution des distances entre points voisins, dans le régime d'échelle. Cette distribution décroît continuellement vers 0 pour des petites distances. Il n'y a pas une valeur marquée de distance minimale (bien qu'il existe une distance minimale – le système a une taille finie).

La figure (1.13) montre la distribution des aires des polygones de Voronoï $P(A)$. Cette distribution est discontinue à $A = A_0$, l'aire minimale. Cette accumulation des polygones avec l'aire minimale est due au fait qu'on retire le polygone le plus petit à chaque itération. C'est le même phénomène que dans le modèle géométrique, où la distribution des distances entre points voisins est discontinue.

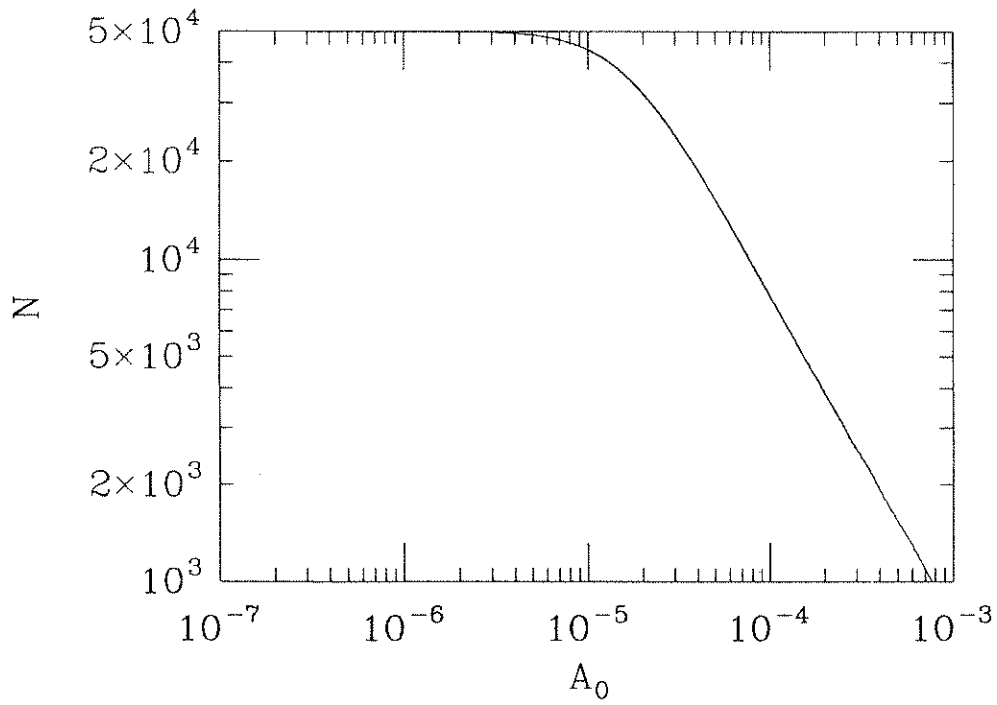


Figure 1.10 : Le nombre de points en fonction de A_0 , l'aire minimale des polygones de Voronoï, pour le modèle cellulaire.

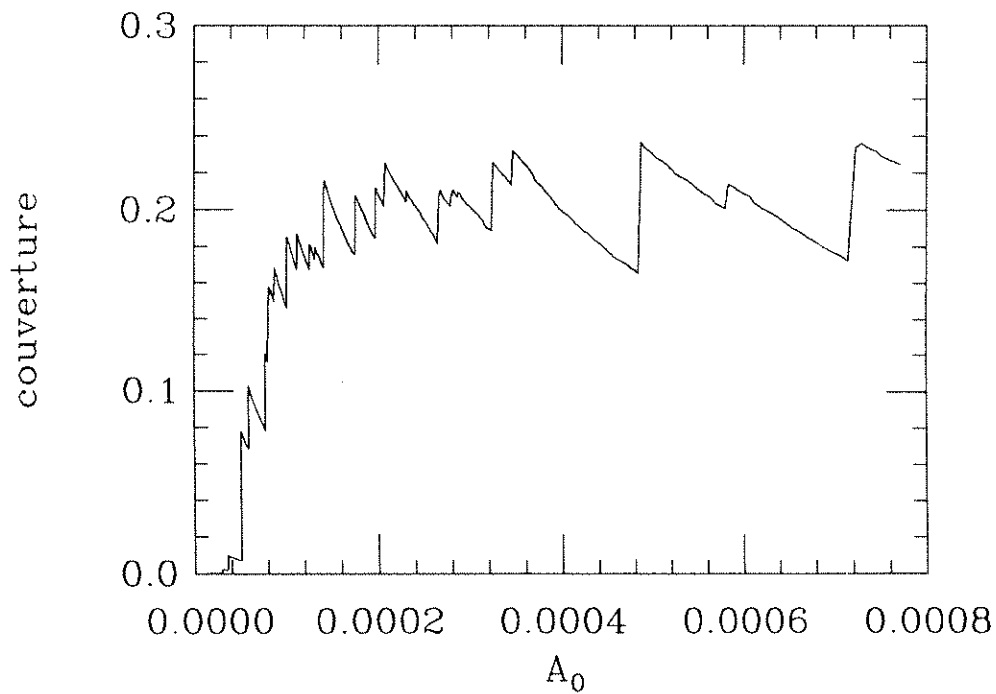


Figure 1.11 : La couverture, en fonction de A_0 , croît par sauts puis décroît continuellement, dans le régime d'échelle.

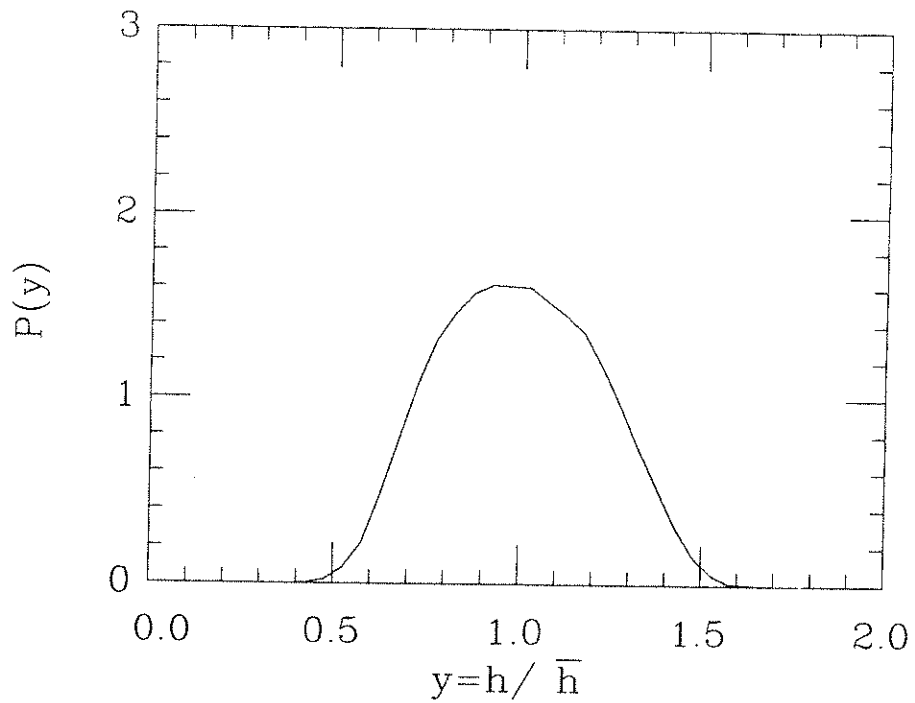


Figure 1.12 : La distribution des distances entre points voisins $P(h)$ dans le régime d'échelle, mise à l'échelle de la distance moyenne \bar{h} .

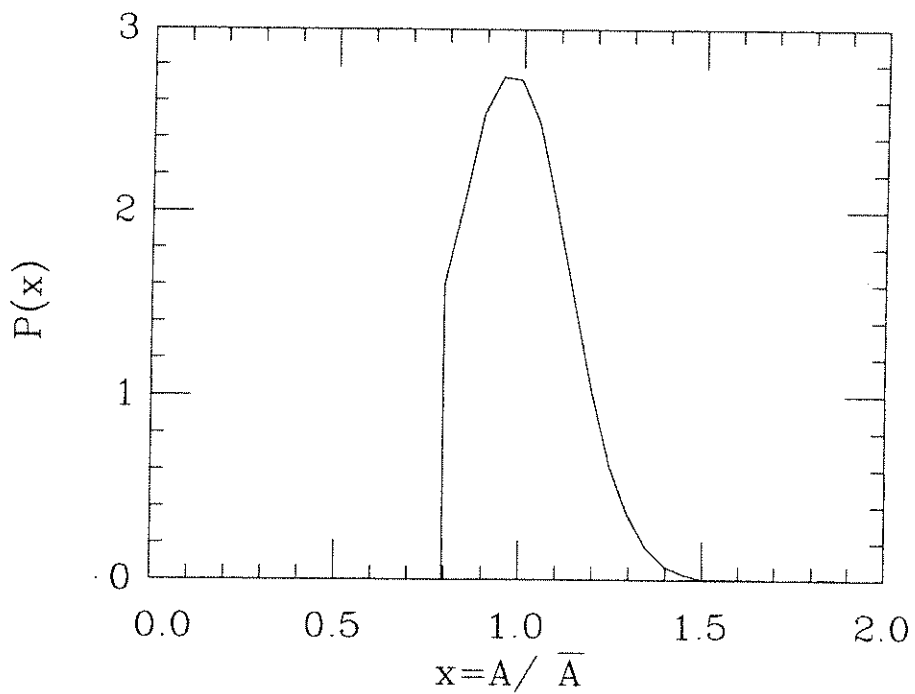


Figure 1.13 : La distribution des aires des polygones de Voronoï $P(A)$ dans le régime d'échelle, mise à l'échelle de l'aire moyenne \bar{A} .

1.6.3 Théorie de champ moyen pour le modèle cellulaire

La dynamique du modèle cellulaire est gouvernée par une seule variable – l'aire des cellules. Cela nous permet de formuler une théorie de champ moyen simple pour l'évolution de la distribution des aires des polygones.

A chaque itération du modèle, on élimine le point avec le polygone le plus petit. L'aire de ce polygone est répartie entre les polygones voisins ; leur nombre est 6 en moyenne. On peut, en première approximation, supposer que l'aire du polygone éliminé est distribuée à parts égales entre 6 autres polygones. De la même manière que pour le modèle géométrique à une dimension, on peut écrire une équation approximative pour l'évolution de la distribution des cellules d'aire A . Notons par $n_t(A)$ la distribution du nombre de cellules d'aire A à temps t , par A_0 l'aire minimale, et par N_t le nombre total des cellules. La distribution $n_t(A)$ est définie pour $A \geq A_0$. Dans l'intervalle de temps entre t et $t + \delta t$, on élimine toutes les cellules d'aire entre A_0 et $A_0 + \delta A_0$, en distribuant chacune d'elles entre 6 autres cellules. Au temps $t + \delta t$, on a

$$n_{t+\delta t}(A) = n_t(A) + \frac{6n_t(A_0)\delta A_0}{N_t} \times \left[-n_t(A) + n_t\left(A - \frac{1}{6}A_0\right) \theta\left(A - \frac{7}{6}A_0\right) \right] \quad (1.56)$$

$$N_{t+\delta t} = N_t - n_t(A_0)\delta A_0 \quad (1.57)$$

$$A_0(t + \delta t) = A_0(t) + \delta A_0 . \quad (1.58)$$

La dernière équation détermine la croissance de A_0 dans le temps.

On définit la fraction des cellules d'aire A ,

$$f_t(A) = n_t(A)/N_t . \quad (1.59)$$

Dans la limite $\delta t \rightarrow 0$, la distribution $f_t(A)$ obéit à l'équation différentielle

$$\frac{\partial f_t(A)}{\partial t} = f_t(A_0) \left[-5f_t(A) + 6f_t\left(A - \frac{1}{6}A_0\right) \theta\left(A - \frac{7}{6}A_0\right) \right] . \quad (1.60)$$

L'intégration numérique de cette équation montre que cette distribution tend asymptotiquement vers une distribution stable, à part un changement d'échelle.

Puisqu'on s'attend à ce que le système atteigne un régime d'échelle, on définit une distribution mise à l'échelle de A_0 par

$$f_t(A) = \frac{1}{A_0} F\left(\frac{A}{A_0}, t\right) . \quad (1.61)$$

Cette distribution est une fonction de $x = A/A_0$ et de t , définie pour $x \geq 1$. Elle obéit à l'équation aux dérivées partielles

$$t \frac{\partial F(x, t)}{\partial t} = x \frac{\partial F(x, t)}{\partial x} + [1 - 5F(1, t)]F(x, t) + 6F(1, t)F\left(x - \frac{1}{6}, t\right) \theta\left(x - \frac{7}{6}\right) . \quad (1.62)$$

On suppose que dans la limite $t \rightarrow \infty$ cette distribution tend vers une distribution constante

$$F(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} F(x, t) \quad (1.63)$$

qui obéit à l'équation (1.62) avec la dérivée temporelle nulle.

Dans les deux articles sur les modèles unidimensionnels, ainsi que dans la sous-section (1.5.3), nous avons traité des équations de formes similaires à l'équation (1.62). Nous avons montré comment la distribution limite est déterminée en fonction de la distribution initiale. Pour une distribution initiale qui décroît suffisamment vite pour que son premier moment soit fini, la distribution limite choisie est celle où $F(1) = 1$. La forme de cette distribution, trouvée soit par intégration dans le temps de (1.60), soit par intégration sur x de (1.62) (avec le membre de gauche nul), est donnée dans la figure (1.14).

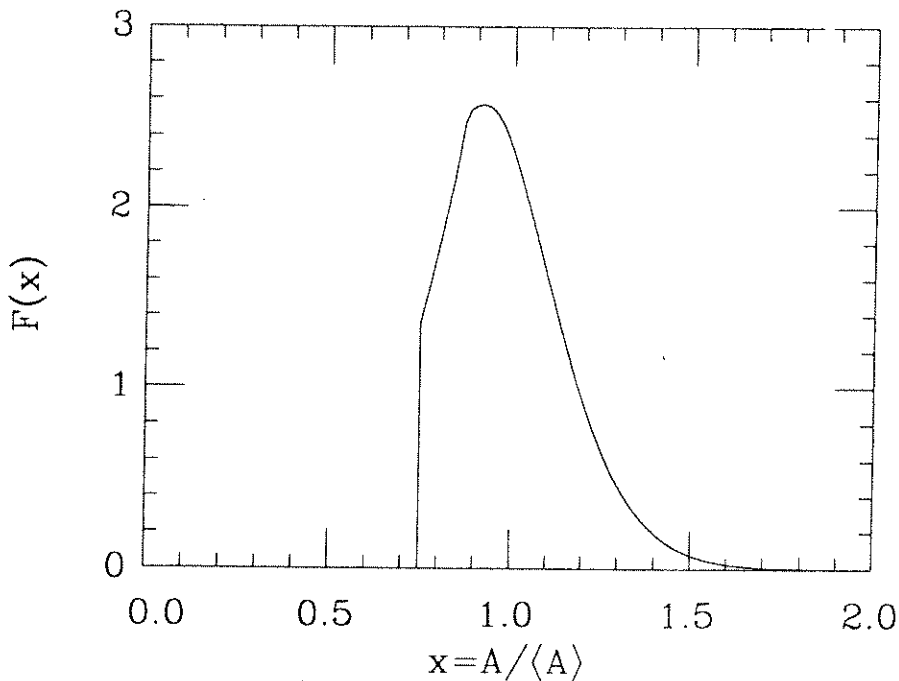


Figure 1.14 : La distribution asymptotique des aires des cellules $F(x)$ de la théorie de champ moyen, mise à l'échelle de \bar{A} .

Cette distribution ressemble beaucoup à la distribution des aires des polygones de Voronoï dans le modèle cellulaire. Cette théorie peut être améliorée : on peut permettre qu'avec une certaine probabilité la cellule la plus petite soit divisée en 5, 6, ou 7 parts ; on peut également diviser la cellule en parts non égales. Ces deux modifications peuvent rendre la distribution du champ moyen encore plus semblable à la distribution du modèle cellulaire.

1.7 Conclusion

L'étude des figures de souffle porte sur différents aspects physiques. Nous avons exploré ici quelques aspects statistiques de ce phénomène de croissance et de coalescence des gouttes.

D'abord, nous avons étudié les figures de souffle en tant que problème d'agrégation. En étudiant l'évolution de la distribution des tailles des gouttes, nous avons expliqué certaines propriétés de ce système dans le régime d'échelle.

En étudiant ensuite la répartition des gouttes dans l'espace, nous nous sommes aperçus de la ressemblance du problème des figures de souffle à des problèmes de remplissage de l'espace ainsi qu'à des problèmes d'empilement [16-24].

Notre approche principale a été de considérer les figures de souffle comme un problème de croissance de domaines. A une dimension de l'espace, nous avons introduit et étudié des modèles de croissance et de coalescence, pour certains desquels nous avons trouvé des solutions exactes. Ces modèles sont fortement liés à d'autres modèles de croissance de domaines unidimensionnels [25-26]. A deux dimensions, les modèles de figures de souffle nous ont ouvert la voie vers les structures cellulaires bidimensionnelles, qui seront étudiées dans le chapitre suivant.

STRUCTURES CELLULAIRES BIDIMENSIONNELLES

2.1 Introduction

Il existe dans la nature une abondance de matériaux structurés en cellules ou en domaines. En biologie, les tissus végétaux ou animaux sont des structures cellulaires [27–29]. En écologie, différents individus de la même espèce – que ce soient des plantes ou des animaux – divisent l'espace entre eux en territoires distincts [30–31]. En géologie, on trouve des structures cellulaires dans les fissures des coulées basaltiques [32–33]. En physique, les exemples sont nombreux. Des systèmes magnétiques à basse température forment des domaines d'aimantation différente [34–36]. Certains solides ont une structure polycristalline composée de grains de cristal, chacun avec une orientation différente [37–43]. La mousse de savon est une structure cellulaire composée de bulles d'air entourées par des films de savon [45–50]. Dans les films de Langmuir, à la transition de phase gaz-liquide, on trouve des domaines gazeux séparés par des parois liquides [51–52].

Il a été observé que ces systèmes, malgré leur différence, ont des ressemblances frappantes, soit dans leur mode d'évolution, soit dans leurs propriétés statistiques. Beaucoup de chercheurs ont essayé de trouver des propriétés universelles communes à toutes ces structures cellulaires. Ce sera aussi le but de l'étude présentée ici.

Une structure cellulaire peut se présenter en une, deux ou trois dimensions. En une dimension – où on parle plutôt de domaines, puisque les parois sont des points – le problème est relativement simple. Il existe des solutions exactes pour la statistique et l'évolution de plusieurs modèles de croissance de domaines unidimensionnels (par exemple, le modèle d'Ising ferromagnétique [25], des modèles de réaction-diffusion [26], ou le modèle géométrique du chapitre précédent). Les structures cellulaires en trois dimensions sont un terrain très peu exploré jusqu'à maintenant [53–55].

Dans ce chapitre, nous allons restreindre l'étude aux structures cellulaires à deux dimensions d'espace. Ces structures peuvent être soit des systèmes purement bidimensionnels, soit des tranches bidimensionnelles de structures tridimensionnelles. Dans la suite, nous utiliserons indifféremment les termes *paroi* et *côté* pour désigner la frontière entre deux cellules ou domaines. Dans ces structures, chaque paire de domaines voisins est séparée par une paroi, et chaque sommet est le point de rencontre de trois parois et de trois cellules. Des sommets avec une valence supérieure à trois existent rarement : pour des systèmes avec une énergie de tension superficielle associée aux parois, de tels sommets sont très instables énergétiquement. Pour des structures aléatoires, ces sommets sont très

rare statistiquement. Dans les structures cellulaires que nous allons étudier, nous supposons qu'il n'existe pas de sommets de valence supérieure à trois.

Nous commencerons par une description générale de la statistique des structures cellulaires et des outils mathématiques utilisés pour analyser ces structures. Nous décrirons ensuite l'évolution de systèmes polycristallins, c'est-à-dire la croissance normale des grains. Les modèles de Potts et d'Ising seront évoqués. Ce sont des modèles dynamiques discrets sur réseau, qui imitent l'évolution des polycristaux ou des systèmes magnétiques. Nous présenterons les mousses de savon et leur modélisation. Nous passerons ensuite aux structures cellulaires engendrées par des constructions sur des points, notamment la tessellation de Voronoï et le complexe de Laguerre. A cette classe appartiennent les modèles bidimensionnels des figures de soufflé. Nous décrirons le modèle de sommets, une structure cellulaire évolutive très simple que nous avons étudiée. Nous présenterons des modèles essentiellement topologiques qui incorporent la loi de von Neumann. Des théories de champ moyen décrivant l'évolution markovienne des lois de probabilité des structures cellulaires seront élaborées. Pour finir nous allons traiter des modèles purement topologiques de structures cellulaires. Pour un de ces modèles, nous présenterons des résultats exacts sur son état d'équilibre.

2.2 Statistique des structures cellulaires

2.2.1 Généralités

Il est utile de définir la fraction P_n des cellules de n côtés dans une structure cellulaire donnée. C'est une probabilité normalisée à 1

$$\sum_n P_n = 1 . \quad (2.1)$$

Dans la suite nous allons parfois utiliser l'expression *la topologie d'une cellule* pour dire *le nombre de côtés de la cellule*. D'après le théorème d'Euler, une structure cellulaire à deux dimensions vérifie la relation suivante entre le nombre de cellules N , le nombre de parois N_P et le nombre de sommets N_S

$$N - N_P + N_S = \chi \quad (2.2)$$

où χ est la caractéristique topologique de la surface ($\chi = 0$ pour la surface d'un tore ; $\chi = 2$ pour la surface d'une sphère). Le nombre total de côtés de toutes les cellules, égal au nombre moyen de côtés d'une cellule

$$\langle n \rangle = \sum_n n P_n \quad (2.3)$$

multiplié par N , vaut $2N_P$. Pour des structures cellulaires avec des sommets trivalents, on a aussi $2N_P = 3N_S$. Par conséquent, dans la limite où le nombre de cellules est très grand, le théorème d'Euler implique que

$$\langle n \rangle = 6 . \quad (2.4)$$

Souvent, on utilise le deuxième moment de P_n

$$\mu_2 = \sum_n (n-6)^2 P_n \quad (2.5)$$

pour caractériser une structure cellulaire.

Pour une structure cellulaire donnée, on peut définir une matrice de voisinage G_{ij}

$$G_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{si les cellules } i \text{ et } j \text{ sont voisines,} \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.6)$$

C'est une matrice symétrique d'ordre $(N \times N)$, nulle sur la diagonale principale, qui contient toute l'information topologique sur la structure. Le nombre de côtés d'une cellule i est

$$n_i = \sum_j G_{ij}, \quad (2.7)$$

et le nombre total de côtés dans la structure est évidemment

$$\sum_i n_i = 6N. \quad (2.8)$$

La fraction P_n des cellules de n côtés est donnée par

$$P_n = \frac{1}{nN} \sum_{ij} G_{ij} \delta_{nn_i} = \frac{1}{N} \sum_i \delta_{nn_i}. \quad (2.9)$$

La probabilité de trouver deux cellules voisines de n et n' côtés respectivement est

$$Q_{nn'} = \frac{1}{6N} \sum_{ij} G_{ij} \delta_{nn_i} \delta_{n'n_j}. \quad (2.10)$$

La somme sur n' de cette probabilité jointe donne

$$Q_n = \sum_{n'} Q_{nn'} = \frac{n}{6} P_n. \quad (2.11)$$

C'est un résultat que nous tenons à souligner : la probabilité Q_n de trouver un côté d'une cellule de topologie n n'est pas égale à la fraction de cellules de topologie n dans l'ensemble, P_n . Une quantité, qui sera évoquée dans la suite, est m_n , le nombre moyen de côtés d'une cellule voisine à une cellule de topologie n , défini par

$$m_n = \sum_{n'} n' Q_{nn'} / \sum_{n'} Q_{nn'}. \quad (2.12)$$

En appliquant cette définition à la relation (2.11) on trouve que

$$\sum_n nm_n P_n = \sum_n n^2 P_n . \quad (2.13)$$

2.2.2 Lois empiriques

Certains chercheurs ont constaté, en étudiant des structures cellulaires variées, que différentes quantités, portant sur des corrélations dans ces structures, prennent des formes linéaires en fonction du nombre de côtés de la cellule.

L'un des premiers à étudier des structures cellulaires était Desch [37] qui a regardé les domaines apparus dans la solidification de métaux. En étudiant la forme de ces domaines, il a trouvé que \bar{L}_n , le périmètre moyen d'une cellule de n côtés, se comportait linéairement en n . Cette relation

$$\bar{L}_n = a + bn , \quad (2.14)$$

est appelée la loi de Desch, avec des constantes a et b caractéristiques du matériau.

Lewis [27-28] a étudié les structures cellulaires dans une grande variété de tissus végétaux et animaux. Il a conclu de la statistique des aires des cellules de différents tissus que l'aire moyenne \bar{A}_n d'une cellule de n côtés était linéaire en n

$$\bar{A}_n = \bar{A} [1 + \lambda(n - 6)] . \quad (2.15)$$

Dans cette formule, dite loi de Lewis, \bar{A} est l'aire moyenne de toutes les cellules, et la constante λ varie selon le type de tissu.

Aboav [40,56-60] a étudié des structures cellulaires diverses : des polycristaux d'oxyde de magnésium, des mousses de savon bidimensionnelles, des films minces de verres d'arsenic-sélénium, ainsi que des structures cellulaires artificielles. Il a notamment calculé les corrélations entre les topologies de cellules voisines. Il a trouvé que le nombre moyen de côtés m_n d'une cellule voisine d'une cellule de n côtés est linéaire en $1/n$

$$m_n = (6 - a) + \frac{6a + \mu_2}{n} , \quad (2.16)$$

dépendant d'un paramètre a typique du système, et de μ_2 –le deuxième moment de la distribution P_n .

Peshkin et al. [61] ont suggéré une forme encore plus radicale pour les corrélations entre topologies de cellules voisines, valable au moins pour certains modèles topologiques qui seront discutés dans la section (2.7). Selon eux, $M_l(n)$, le nombre moyen de cellules de topologie l voisines d'une cellule de topologie n donnée doit être linéaire en n

$$M_l(n) = A_l + B_l n . \quad (2.17)$$

et par conséquent, cette conjecture porte sur la forme de la probabilité Q_{nl} . On trouve que

$$6 \frac{Q_{nl}}{P_n P_l} - n_0 = \frac{(n - n_0)(l - n_0)}{6 - n_0} \quad (2.19)$$

avec un paramètre libre n_0 . Cette forme de Q_{nl} est normalisée à 1, et obéit à la relation (2.11). La forme (2.19) de Q_{nl} implique la loi d'Aboav : avec la définition (2.12) de m_n on retrouve l'équation (2.16) avec la relation

$$n_0 = 6 + \frac{\mu_2}{a} \quad (2.20)$$

entre les deux paramètres. Le paramètre n_0 a une double signification : d'une part, c'est la valeur de n pour laquelle $m_n = 6$; d'autre part, si on trace les courbes de Q_{nl} en fonction de n pour différentes valeurs de l , on trouve que toutes ces courbes se croisent en un seul point situé à $n = n_0$. La valeur $n_0 = 0$ correspond au cas où les topologies de cellules voisines sont indépendantes : $Q_{nl} = Q_n Q_l$.

Toutes ces lois linéaires ne sont pas rigoureusement exactes, ce qui se voit dans des expériences ou des simulations, dès qu'on arrive à rendre les fluctuations statistiques suffisamment petites. Ce sont plutôt des approximations de premier ordre, mais souvent des approximations très bonnes. Il est tout de même très étonnant que des corrélations dans la statistique des structures cellulaires prennent des formes (presque) linéaires. Une explication partielle de ce phénomène vient du formalisme d'entropie maximale.

2.2.3 Formalisme d'entropie maximale

Rivier [33,53,61-70] a utilisé une approche intéressante à l'étude de la statistique de structures cellulaires aléatoires. Un système composé d'un grand nombre de cellules constitue un ensemble statistique. L'idée est d'appliquer des méthodes de mécanique statistique à cet ensemble.

Un système en équilibre peut occuper un de ses états possibles avec une probabilité donnée par la distribution de Boltzmann. Dans la limite thermodynamique (où le nombre de constituants du système et son volume tendent vers l'infini) le système se trouve dans son état le plus probable. Pour un système hamiltonien, on peut, en principe, calculer la distribution de Boltzmann à partir de l'énergie libre pour trouver l'état d'équilibre. Quand un système atteint l'équilibre, il obéit au principe du bilan détaillé. Cela nécessite au préalable que la dynamique du système soit réversible.

Le formalisme d'entropie maximale est une méthode de calcul des propriétés statistiques de l'état le plus probable (l'état d'équilibre, si l'équilibre peut être atteint) du système. Cette méthode a été appliquée aussi, avec succès, à certains systèmes dynamiques hors d'équilibre (voir des références dans [33]). Etant donné un attribut x du système et une distribution de probabilité $P(x)$, non encore déterminée, des valeurs possibles de x , on définit l'entropie d'information du système par la fonctionnelle

$$S[P(x)] = - \int dx P(x) \ln P(x) . \quad (2.21)$$

atteint) du système. Cette méthode a été appliquée aussi, avec succès, à certains systèmes dynamiques hors d'équilibre (voir des références dans [33]). Etant donné un attribut x du système et une distribution de probabilité $P(x)$, non encore déterminée, des valeurs possibles de x , on définit l'entropie d'information du système par la fonctionnelle

$$S[P(x)] = - \int dx P(x) \ln P(x) . \quad (2.21)$$

Normalement, il existe un certain nombre de contraintes sur cette densité de probabilité (notamment, sa normalisation)

$$\int dx P(x) f_\alpha(x) = f_\alpha^0 \quad (\alpha = 1, \dots, M) . \quad (2.22)$$

Par un calcul de variations on cherche la distribution $P(x)$ qui rend l'entropie (2.21) maximale tenant compte des différentes contraintes, qui sont incorporées au moyen de multiplicateurs de Lagrange λ_α . La distribution $P(x)$ d'entropie maximale est

$$P(x) = \exp \left\{ -1 - \sum_\alpha \lambda_\alpha f_\alpha(x) \right\} \quad (2.23)$$

avec une entropie

$$S = 1 + \sum_\alpha \lambda_\alpha f_\alpha^0 . \quad (2.24)$$

Les valeurs des multiplicateurs de Lagrange sont déterminées par les contraintes (2.22).

Définissons, pour une structure cellulaire donnée, la distribution de probabilité $P_n(A)$ de trouver une cellule de topologie n et d'aire A . La probabilité P_n de trouver une cellule de topologie n , et la probabilité $P(A)$ de trouver une cellule d'aire A sont dérivées de cette quantité

$$P_n = \int dA P_n(A) \quad (2.25)$$

$$P(A) = \sum_n P_n(A) . \quad (2.26)$$

L'entropie correspondante est

$$S[P_n(A)] = - \sum_n \int dA P_n(A) \ln P_n(A) . \quad (2.27)$$

Les contraintes sur cette probabilité sont : la normalisation

$$\sum_n \int dA P_n(A) = \sum_n P_n = \int dA P(A) = 1 , \quad (2.28)$$

le théorème d'Euler pour une structure avec des sommets trivalents

$$\sum_n \int dA n P_n(A) = \sum_n n P_n = 6, \quad (2.29)$$

et le remplissage de l'espace

$$\sum_n \int dA A P_n(A) = \int dA A P(A) = \bar{A}. \quad (2.30)$$

Dans cette dernière équation, \bar{A} est l'aire moyenne de toutes les cellules, égale à l'aire totale divisée par le nombre de cellules. La distribution la plus probable, qui donne la valeur maximale de l'entropie avec ces trois contraintes, a la forme

$$P_n(A) = P_n P(A), \quad (2.31)$$

avec

$$P_n = \frac{1}{4} \left(\frac{3}{4} \right)^{n-3} \quad (2.32)$$

$$P(A) = \frac{1}{\bar{A}} \exp\{-A/\bar{A}\}. \quad (2.33)$$

Ce découplage de la dépendance en n et en A est la conséquence du fait qu'aucune des contraintes ne spécifie de corrélations entre l'aire et la topologie d'une cellule.

Pourtant, on sait que dans les structures cellulaires ces corrélations existent. Une façon de les introduire est d'exiger que \bar{A}_n , l'aire moyenne d'une cellule de topologie n , donnée par

$$\bar{A}_n = \int dA A P_n(A) / \int dA P_n(A), \quad (2.34)$$

soit une fonction non constante de n . Les trois contraintes (2.28-30) sont exprimées avec la probabilité P_n

$$\sum_n P_n = 1 \quad (2.28')$$

$$\sum_n n P_n = 6 \quad (2.29')$$

$$\sum_n \bar{A}_n P_n = \bar{A}. \quad (2.30')$$

Parmi toutes les formes possibles de corrélation exprimée par \bar{A}_n , l'entropie est maximale quand \bar{A}_n est linéaire en n . C'est évident, parce que dans ce cas la troisième contrainte est une combinaison linéaire des deux premières. L'élimination

d'une contrainte diminue la quantité d'information *a priori* sur le système et par conséquent augmente l'entropie. La forme précise de \bar{A}_n qui vérifie les trois contraintes est

$$\bar{A}_n = \bar{A}[1 + \lambda(n - 6)] , \quad (2.35)$$

qui n'est rien d'autre que la loi de Lewis, où λ est un paramètre libre du problème.

Il faut quand même préciser que l'imposition de corrélations entre aires et topologies baisse l'entropie, même si ces corrélations sont linéaires en n . On peut s'apercevoir que c'est bien le cas en regardant l'effet de la loi de Lewis sur la probabilité $P_n(A)$ et sur l'entropie. On remplace la contrainte (2.30) par une série de contraintes pour chaque n

$$\int dA P_n(A) \{ A - \bar{A}[1 + \lambda(n - 6)] \} = 0 . \quad (2.36)$$

La contrainte (2.30) est donnée par la somme sur n de (2.36), ce qui montre que ces dernières contraintes sont plus restrictives, et, par conséquent, on s'attend à ce que l'entropie baisse. La probabilité d'entropie maximale avec les contraintes (2.28,29,36) a la forme

$$P_n(A) = \exp \left\{ -\alpha - \beta n - \frac{A}{\bar{A}[1 + \lambda(n - 6)]} \right\} , \quad (2.37)$$

où les valeurs de α et β sont déterminées par les contraintes (2.28,29). Cette fois, la dépendance en n et A ne se découple pas. Le paramètre λ reste un paramètre libre du problème. La borne inférieure de λ est 0, pour que \bar{A}_n ne soit pas décroissante en n . Si on exige que le nombre minimal possible de côtés d'une cellule soit 3, on trouve une borne supérieure de $\frac{1}{3}$. Pour $\lambda = 0$, l'aire et la topologie ne sont pas corrélées, et on retrouve la distribution (2.31-33). Dans l'autre limite, $\lambda = \frac{1}{3}$, la distribution prend la forme

$$P_n(A) = \frac{3}{2} \left(\frac{1}{2} \right)^{n-3} \frac{1}{\bar{A}} \exp \left\{ -\frac{3A}{(n-3)\bar{A}} \right\} , \quad (2.38)$$

et en intégrant sur A on trouve

$$P_n = (n-3) \left(\frac{1}{2} \right)^{n-2} . \quad (2.39)$$

Les distributions P_n du nombre de côtés des cellules dans ces deux cas limites, (2.32) et (2.39), sont tracées dans la figure (2.1). Les distributions $P(x)$ d'aire des cellules dans ces deux cas limites, la distribution (2.33) et la distribution (2.38) sommée sur $n=3, \dots, \infty$, sont représentées dans la figure (2.2).

L'entropie associée à la probabilité (2.37) est égale à

$$S(\lambda) = \alpha(\lambda) + \beta(\lambda)n + 1 . \quad (2.40)$$

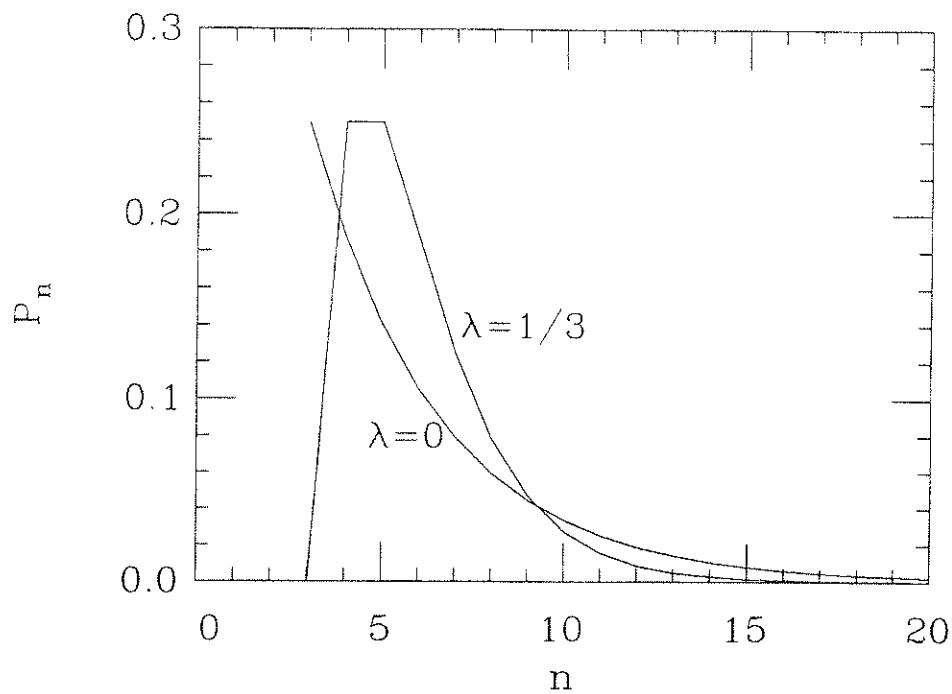


Figure 2.1 : Distribution d'entropie maximale P_n , des nombres de côtés des cellules, quand la loi de Lewis est imposée avec $\lambda = 0, \frac{1}{3}$.

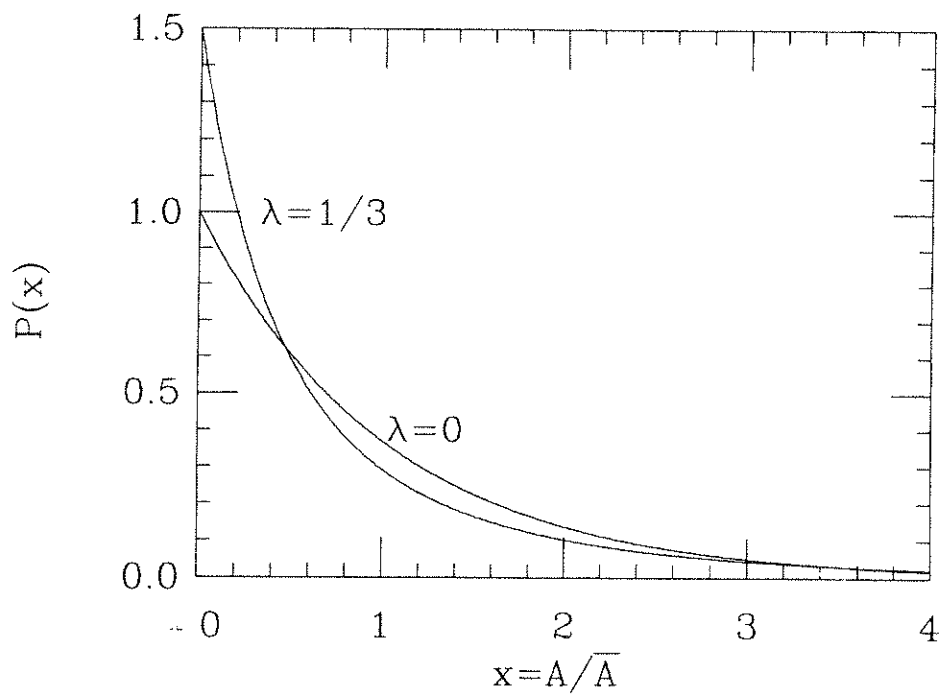


Figure 2.2 : Distribution d'entropie maximale $P(x)$, des aires des cellules, quand la loi de Lewis est imposée avec $\lambda = 0, \frac{1}{3}$.

Nous l'avons évaluée pour trois cas :

$$S(\lambda=0) = \ln \bar{A} + 1 + 4 \ln 4 - 3 \ln 3 \cong \ln \bar{A} + 3.25 \quad (2.41)$$

$$S(\lambda \ll 1) = \ln \bar{A} + 1 + 4 \ln 4 - 3 \ln 3 - 6\lambda^2 + O(\lambda^3) \cong S(\lambda=0) - 6\lambda^2 \quad (2.42)$$

$$S(\lambda = \frac{1}{3}) = \ln \bar{A} + 1 + 4 \ln 2 - \ln 3 \cong \ln \bar{A} + 2.67. \quad (2.43)$$

On constate qu'en imposant la loi de Lewis (2.35), nous avons éliminé une contrainte globale (sur toutes les valeurs de n) en échange d'une série de contraintes sur chaque n , plus restrictives, avec l'effet de *baisser* l'entropie.

Pour résumer, la probabilité d'entropie maximale $P_n(A)$ de trouver une cellule de topologie n et d'aire A a la forme donnée par les équations (2.31-33) avec une dépendance découplée en n et en A . Par conséquent, l'aire moyenne d'une cellule de n côtés \bar{A}_n ne dépend pas de n . L'exigence que \bar{A}_n soit dépendante de n , a pour conséquence de baisser l'entropie. Entre toutes les formes possibles de \bar{A}_n , l'entropie est maximale pour une forme linéaire en n . Toute autre forme est accompagnée d'une baisse supplémentaire d'entropie. Cela amène à croire que, en l'absence de renseignements sur leur forme précise, les corrélations entre aire et topologie prennent la forme de la loi de Lewis. De façon similaire, on peut raisonner sur la validité de la loi de Desch sur les corrélations entre le périmètre d'une cellule et sa topologie, et sur celle de la loi d'Aboav sur les corrélations entre les topologies de cellules voisines.

2.2.4 Approche phénoménologique de la loi d'Aboav

Du point de vue topologique, les modifications d'une structure cellulaire peuvent être décomposées au moyen de deux transformations topologiques élémentaires : la transformation T_1 d'échange de voisinage (voir figure (2.3a)) et la transformation T_2 d'élimination (ou inversement de création) de triangles (voir figure (2.3b)). Toute autre transformation est une combinaison des deux transformations élémentaires.

Blanc et Mocelin [71] ont proposé une explication de la loi d'Aboav par l'analyse des effets des transformations topologiques élémentaires sur les corrélations entre topologies de cellules voisines. Soit M_n la topologie moyenne des cellules voisines à une cellule donnée de topologie n , alors le nombre total de côtés de ses voisines est égal à nM_n . Supposons que cette cellule participe à une transformation topologique :

- (a) Une transformation T_1 est effectuée sur une paroi entre deux cellules voisines de la cellule (voir figure (2.3a) de gauche à droite). La cellule gagne une nouvelle cellule voisine qui avait, avant la transformation, k côtés. Elle devient une cellule de topologie $n + 1$ et le nombre total de côtés de ses voisines est égal à

$$(n + 1)M_{n+1} = nM_n + k - 1 \quad (2.44)$$

puisqu'elle est devenue voisine d'une cellule de $k + 1$ côtés, et deux de ses voisines ont perdu chacune un côté.

- (b) La cellule est voisine d'une cellule de topologie 3 qui disparaît (voir figure (2.3b) de gauche à droit). Elle devient une cellule de topologie $n - 1$ et le nombre total de côtés de ses voisines est égal à

$$(n - 1)M_{n-1} = nM_n - 5 \quad (2.45)$$

puisque'une cellule voisine de 3 côtés a disparu, et deux autres voisines ont perdu chacune un côté.

Les mêmes résultats s'appliquent aux transformations dans le sens inverse.

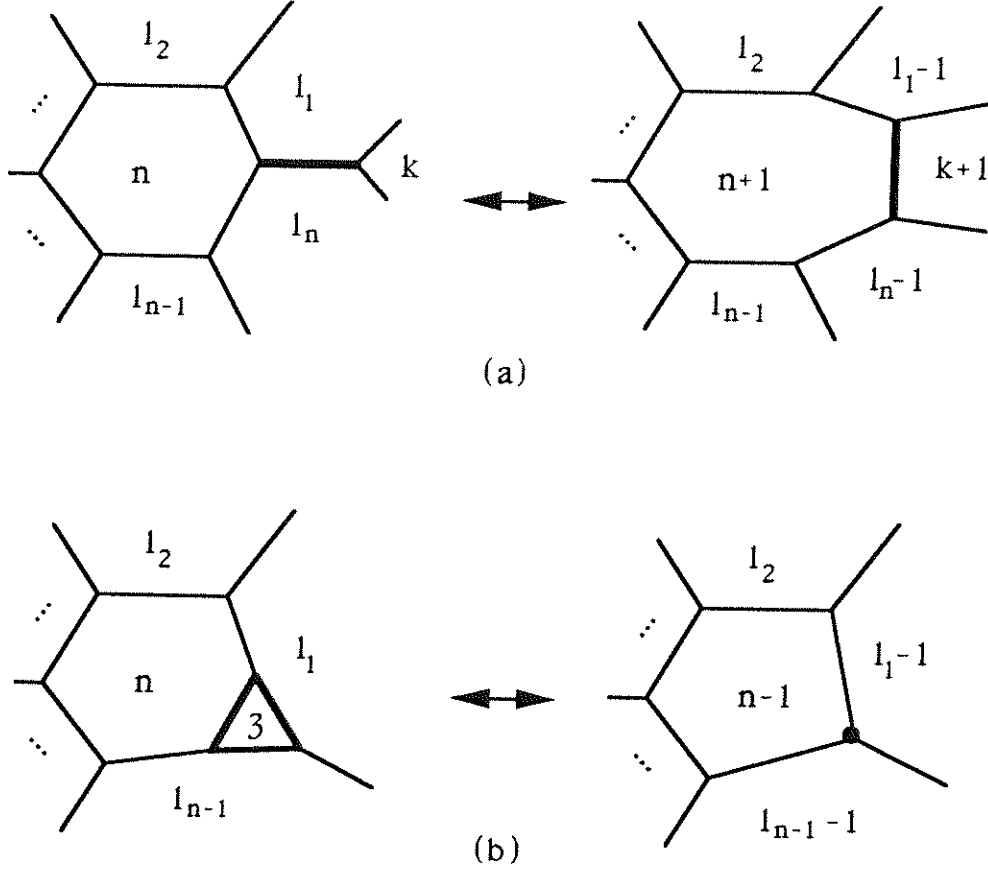


Figure 2.3 : Les transformations topologiques élémentaires : (a) une transformation T_1 d'échange de voisinage et (b) une transformation T_2 d'élimination (ou inversement) de triangles.

Si on fait la moyenne de ces équations sur toutes les cellules, on trouve que

$$nm_n = \begin{cases} (n - 1)m_{n-1} + \langle k \rangle - 1 \\ (n - 1)m_{n-1} + 5 \end{cases} \quad (2.46)$$

pour chacun des deux cas, ou m_n est le nombre moyen de côtés d'une cellule voisine d'une cellule de topologie n . Si on suppose que les corrélations entre topologies de cellules s'étendent seulement jusqu'aux premiers voisins, alors

$$\langle k \rangle = 6 \quad (2.47)$$

et les deux cas donnent le même résultat. La solution de (2.46) est

$$m_n = 5 + \frac{6 + \mu_2}{n} , \quad (2.48)$$

la loi d'Aboav avec $a = 1$.

Il ne faut pas oublier que le nombre total de côtés des cellules voisines d'une cellule donnée, nM_n , fluctue. Ce nombre peut changer par des transformations topologiques sur des voisines de la cellule qui ne modifient pas sa topologie. Puisque ce nombre peut augmenter ou diminuer avec la même probabilité, en moyenne il reste inchangé par ces transformations.

Cette dérivation a pourtant une faiblesse : on essaye de calculer des corrélations au moyen d'une conjecture d'absence de ces mêmes corrélations. Même s'il n'existe que des contraintes entre premières voisines, elles vont engendrer des corrélations entre cellules plus éloignées. De plus, la moyenne effectuée en passant des équations (2.44–45) à l'équation (2.46) n'est pas faite de façon rigoureuse.

2.3 Croissance normale de grains

L'évolution des domaines dans les polycristaux s'appelle la croissance normale de grains. La croissance consiste en une migration des atomes entre les domaines, avec une dynamique tendant à minimiser la longueur des parois entre les grains. La taille typique des domaines croît au cours du temps, et simultanément leur nombre décroît. Au bout d'un temps suffisamment long on voit l'apparition d'un régime d'échelle, ce qui signifie que le système est caractérisé par une seule longueur typique, qui se comporte en $t^{1/2}$. Nous allons développer des équations dynamiques pour la croissance cristalline par un calcul variationnel. Ce calcul est effectué selon les lignes du développement de Kawasaki et al. [94-95] pour le modèle de sommets (voir aussi la section (2.5)).

2.3.1 Dynamique d'une paroi

Si on regarde un polycristal à une échelle de longueur intermédiaire entre la distance interatomique et la taille typique des domaines, on peut représenter les parois de sa structure cellulaire par des courbes continues $\mathbf{r}(\alpha_{ij})$. Nous utilisons une paramétrisation des parois telle que $\mathbf{r}(\alpha_{ij} = 0)$ est la position du sommet i , et $\mathbf{r}(\alpha_{ij} = 1)$ est la position du sommet j . On suppose que ces courbes sont deux fois différentiables pour $\alpha_{ij} \in (0, 1)$. La longueur cumulative le long d'une paroi $s(\alpha)$ est donnée par

$$s(\alpha) = \int_0^\alpha d\beta |\mathbf{r}'(\beta)| . \quad (2.49)$$

La longueur totale de la paroi entre les sommets i et j est $s(\alpha_{ij} = 1)$. On définit un potentiel \mathcal{F} proportionnel à la longueur totale des parois

$$\mathcal{F} = \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_{ij} \int_0^1 d\alpha_{ij} |\mathbf{r}'(\alpha_{ij})| , \quad (2.50)$$

où la somme est prise sur toutes les paires de sommets connectés par une paroi. σ_{ij} est l'énergie par unité de longueur sur la paroi entre les sommets i et j , qui peut varier selon le type des domaines de ses deux côtés.

Pour une courbe $\mathbf{r}(\alpha)$ donnée, le vecteur unité tangent $\mathbf{t}(\alpha)$ est donné par

$$\mathbf{t}(\alpha) = \frac{d\mathbf{r}(\alpha)}{ds(\alpha)} = \frac{\mathbf{r}'(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|}, \quad (2.51)$$

et le vecteur unité normal $\mathbf{n}(\alpha)$ par

$$\begin{aligned} \kappa(\alpha)\mathbf{n}(\alpha) &= \frac{d^2\mathbf{r}(\alpha)}{ds(\alpha)^2} = \frac{1}{|\mathbf{r}'(\alpha)|} \frac{d\mathbf{t}(\alpha)}{d\alpha} \\ &= \frac{\mathbf{r}''(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|^2} - \frac{(\mathbf{r}''(\alpha) \cdot \mathbf{r}'(\alpha))\mathbf{r}'(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|^4} \end{aligned} \quad (2.52)$$

où $\kappa(\alpha)$ est la courbure au point $\mathbf{r}(\alpha)$.

On définit aussi une fonction de dissipation de Rayleigh \mathcal{R}

$$\mathcal{R} = \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\sigma_{ij}}{2L_{ij}} \int_0^1 d\alpha_{ij} |\mathbf{r}'(\alpha_{ij})| (\mathbf{v}(\alpha_{ij}) \cdot \mathbf{n}(\alpha_{ij}))^2 \quad (2.53)$$

où $\mathbf{v}(\alpha)$ est la vitesse de la paroi au point $\mathbf{r}(\alpha)$. La fonction \mathcal{R} implique que le déplacement d'une paroi entraîne un frottement proportionnel à l'aire balayée par ce déplacement (voir figure (2.4)). Le frottement correspond au délai nécessaire pour déplacer, d'un domaine à l'autre, la quantité de matière contenue dans cette aire.

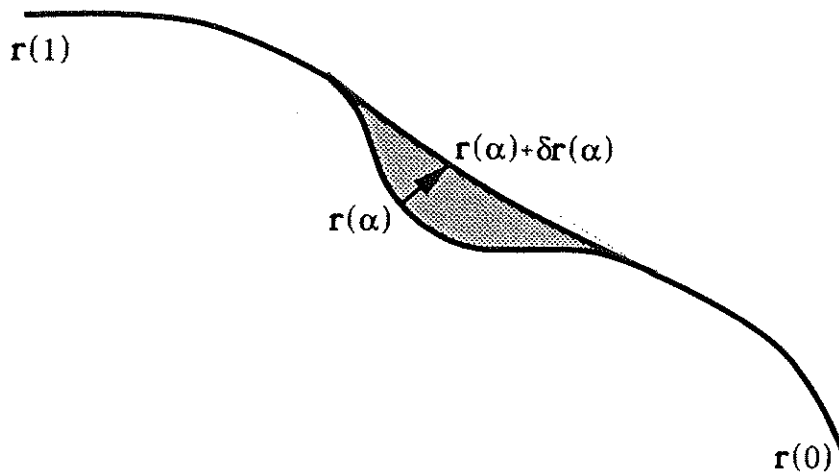


Figure 2.4 : Le déplacement d'une paroi entraîne un frottement proportionnel à l'aire balayée.

Les équations dynamiques des parois sont

$$\frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \mathbf{v}(\alpha_{ij})} + \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{r}(\alpha_{ij})} = 0 \quad (2.54)$$

où $\delta \mathbf{r}(\alpha_{ij})$ et $\delta \mathbf{v}(\alpha_{ij})$ sont des variations infinitésimales de la position et de la vitesse d'une section d'une paroi, respectivement. La variation de \mathcal{F} due à une variation de la courbe $\delta \mathbf{r}$ est donnée par

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{F} &= \int_0^1 d\alpha |\mathbf{r}'(\alpha) + \delta \mathbf{r}'(\alpha)| - \int_0^1 d\alpha |\mathbf{r}'(\alpha)| \\ &\cong \int_0^1 d\alpha \frac{\mathbf{r}'(\alpha) \cdot \delta \mathbf{r}'(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|} \\ &= \frac{\mathbf{r}'(\alpha) \cdot \delta \mathbf{r}(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|} \Big|_0^1 - \int_0^1 d\alpha \left[\frac{\mathbf{r}''(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|} - \frac{(\mathbf{r}''(\alpha) \cdot \mathbf{r}'(\alpha)) \mathbf{r}'(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|^3} \right] \cdot \delta \mathbf{r}(\alpha) \\ &= \frac{\mathbf{r}'(\alpha) \cdot \delta \mathbf{r}(\alpha)}{|\mathbf{r}'(\alpha)|} \Big|_0^1 - \int_0^1 d\alpha |\mathbf{r}'(\alpha)| \kappa(\alpha) (\mathbf{n}(\alpha) \cdot \delta \mathbf{r}(\alpha)) . \end{aligned} \quad (2.55)$$

En reportant ce résultat dans (2.54), on trouve l'équation dynamique d'un point sur une paroi

$$\mathbf{v}(\alpha_{ij}) \cdot \mathbf{n}(\alpha_{ij}) = L_{ij} \kappa(\alpha_{ij}) , \quad (2.56)$$

c'est-à-dire un déplacement proportionnel à la courbure de la paroi κ , dans la direction normale à la paroi. Un déplacement dans la direction tangentielle n'entraîne pas de frottement, mais ne contribue pas non plus à la diminution de la longueur totale des parois.

2.3.2 Croissance d'une seule cellule

Dans la croissance normale de grains, on trouve que les sommets s'équilibrent plus rapidement que les parois. Par conséquent, par rapport à la dynamique des parois, ils sont en quasi-équilibre mécanique, avec un angle de 120° entre chaque paire de parois. La vitesse d'un point sur une paroi est donnée par l'équation (2.56), et nous allons supposer que l'énergie associée à une paroi ne dépend pas des domaines qu'elle sépare : la constante L est homogène, indépendante de i et j . Avec ces deux facteurs, Mullins [72–73] a calculé le taux de croissance de l'aire d'une cellule.

Prenons une courbe simple fermée \mathbf{r} dans le plan, deux fois différentiable partout, sauf sur un nombre fini de points, les n sommets (voir figure (2.5)).

A chaque sommet il y a une discontinuité dans la direction du vecteur unité tangent à la courbe \mathbf{t} , de $\pi - 2\pi/3 = \pi/3$. On paramétrise la courbe

$$\mathbf{r}(\alpha_i) = (x(\alpha_i), y(\alpha_i), 0) \quad (2.57)$$

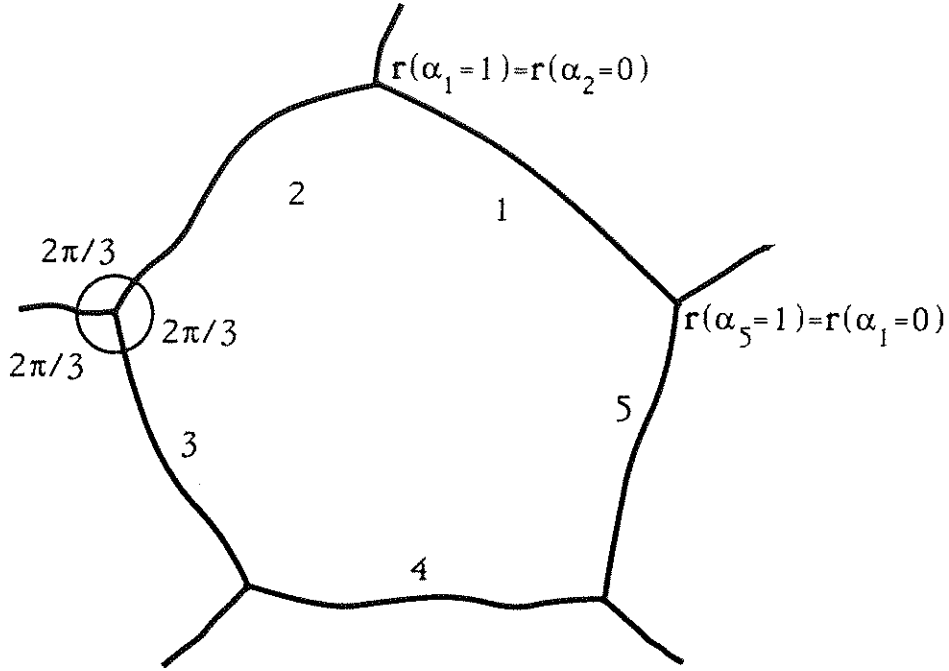


Figure 2.5 : Représentation d'une cellule par une courbe simple fermée, deux fois différentiable partout, sauf sur les n sommets.

où $\hat{\mathbf{z}}$ est le vecteur unité dans la direction perpendiculaire au plan, vers le haut. La dérivée temporelle de A est égale à

$$\begin{aligned} \dot{A} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \int_0^1 d\alpha_i \left(\dot{\mathbf{r}}(\alpha_i) \times \mathbf{r}'(\alpha_i) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \int_0^1 d\alpha_i \left(\mathbf{r}(\alpha_i) \times \dot{\mathbf{r}}'(\alpha_i) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} \\ &= \sum_{i=1}^n \int_0^1 d\alpha_i \left(\dot{\mathbf{r}}(\alpha_i) \times \mathbf{r}'(\alpha_i) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \left(\mathbf{r}(\alpha_i) \times \dot{\mathbf{r}}(\alpha_i) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} \Big|_0^1. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Mais les sommets sont en quasi-équilibre et ne participent pas à cette dynamique. Ainsi, pour tout i

$$\dot{\mathbf{r}}(\alpha_i = 0) = \dot{\mathbf{r}}(\alpha_i = 1) = 0 \quad (2.60)$$

et le deuxième terme de l'équation (2.59) est nul. A l'aide des équations (2.51,52,56) on simplifie le terme restant

$$\dot{A} = L \sum_{i=1}^n \int_0^1 d\alpha_i \left(\mathbf{t}'(\alpha_i) \times \mathbf{t}(\alpha_i) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.61)$$

Le vecteur unité tangent à la courbe $\mathbf{t}(\alpha)$ peut être écrit

$$\mathbf{t}(\alpha) = \left(\cos \theta(\alpha), \sin \theta(\alpha), 0 \right). \quad (2.62)$$

Le vecteur unité tangent à la courbe $\mathbf{t}(\alpha)$ peut être écrit

$$\mathbf{t}(\alpha) = \left(\cos \theta(\alpha), \sin \theta(\alpha), 0 \right) . \quad (2.62)$$

La dérivée de \mathbf{t} par rapport à α est

$$\mathbf{t}'(\alpha) = \theta'(\alpha) \left(-\sin \theta(\alpha), \cos \theta(\alpha), 0 \right) , \quad (2.63)$$

et par conséquent

$$\left(\mathbf{t}'(\alpha) \times \mathbf{t}(\alpha) \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} = -\theta'(\alpha) . \quad (2.64)$$

En appliquant ce résultat dans l'équation (2.61), on trouve

$$\begin{aligned} \dot{A} &= -L \sum_{i=1}^n \int_0^1 d\alpha_i \theta'(\alpha_i) = -L \sum_{i=1}^n \theta(\alpha_i) \Big|_0^1 \\ &= L \left[\sum_{i=1}^{n-1} \left(\theta(\alpha_{i+1} = 0) - \theta(\alpha_i = 1) \right) + \left(\theta(\alpha_1 = 0) - \theta(\alpha_n = 1) \right) \right] . \end{aligned} \quad (2.65)$$

Chacun des $n - 1$ termes dans la somme vaut $\pi/3$, à cause de la discontinuité, et le dernier vaut $\pi/3 - 2\pi$, puisque, en plus de la discontinuité, on a fait un tour complet. Le résultat final est la loi de Mullins

$$\dot{A} = \frac{\pi L}{3} (n - 6) . \quad (2.66)$$

Le taux de croissance de l'aire d'une cellule dépend seulement de la topologie de la cellule. Les cellules de 6 côtés ne changent pas de taille, tandis que des cellules de plus de 6 côtés croissent. Une cellule de moins de 6 côtés décroît dans le temps et à un moment donné disparaît.

2.3.3 Evolution d'un ensemble de grains

La disparition d'une cellule doit être accompagnée de modifications topologiques des cellules voisines pour que le théorème d'Euler reste vérifié. Ces modifications peuvent être décomposées en les deux transformations topologiques élémentaires : la transformation T_1 d'échange de voisinage (voir figure (2.3a)) et la transformation T_2 d'élimination d'un triangle (voir figure (2.3b)).

L'élimination d'un quadrilatère se fait par une transformation T_1 sur sa paroi la plus petite, suivie d'une transformation T_2 . De ses quatre voisins, deux cellules perdent un côté chacune. L'élimination d'un pentagone se fait par une suite de deux transformations T_1 et une transformation T_2 . Deux des cellules voisines perdent un côté et une troisième en gagne un.

Il est intéressant de suivre l'évolution de la structure entière entre deux transformations topologiques successives, décrite par la probabilité $P_n(A; t)$ de trouver une cellule de n côtés et d'aire A à un temps t . En l'absence de

transformations topologiques, la dérivée temporelle totale de cette probabilité est nulle

$$\frac{d}{dt}P_n(A;t) = \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial t} + \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial A}\dot{A} = 0. \quad (2.67)$$

Si on multiplie maintenant cette relation par A et si on fait la somme sur A de 0 à l'infini, on trouve, en se servant de l'équation (2.66), que

$$\frac{d}{dt}(\bar{A}_n(t)P_n(t)) = \frac{\pi L}{3}(n-6)P_n(t). \quad (2.68)$$

Pendant la période qui nous intéresse, $P_n(t)$ est constante et par conséquent

$$\frac{d}{dt}\bar{A}_n(t) = \frac{\pi L}{3}(n-6). \quad (2.69)$$

L'intégration de (2.69) sur le temps depuis la dernière transformation donne la loi de Lewis

$$\bar{A}_n(t) = \frac{\pi L}{3}(n-6)(t-t_0) + \bar{A}_n(t_0), \quad (2.70)$$

mais strictement en l'absence de transformations topologiques. Si on suit l'évolution pendant un temps plus long, la dérivée temporelle totale de $P_n(A;t)$ n'est plus nulle, et il faut introduire des termes de transition dus aux transformations topologiques. Ce sera fait dans le cadre des théories de champ moyen.

La dérivée temporelle de \bar{A} est

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{A_0}{N}\right) = -\frac{A_0\dot{N}}{N^2}. \quad (2.71)$$

où A_0 est l'aire totale. Pendant l'évolution du système, il y a des cellules qui disparaissent, mais il n'y a pas de création de nouvelles cellules. Le nombre de cellules qui disparaissent est égal au nombre de cellules d'aire zéro

$$\dot{N} = -N \sum_n P_n(0;t). \quad (2.72)$$

Dans le régime d'échelle, la distribution $P_n(A;t)$ prend la forme

$$P_n(A;t) = \frac{1}{A}f_n\left(\frac{A}{A}\right) \quad (2.73)$$

et on trouve que

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{1}{A_0} \sum_n f_n(0) \quad (2.74)$$

est indépendant du temps. L'intégration de cette équation montre que l'aire moyenne \bar{A} croît linéairement dans le temps.

2.3.4 Modèles de Potts et d'Ising

Le modèle de Potts est un modèle de variables discrètes sur réseau, souvent utilisé pour l'étude de la croissance cristalline [74–75]. Sur chaque point d'un réseau carré on place un spin de Potts σ_i qui prend une valeur entière entre 1 et Q . Ce modèle constitue un *coarse-graining* d'un polycristal, où la valeur que prend un spin représente l'orientation du cristal autour de ce point du réseau. L'énergie du système est un hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1) , \quad (2.75)$$

où la somme est effectuée sur tous les spins voisins sur le réseau. Seuls contribuent à l'énergie les spins voisins dans des états différents. Les configurations d'énergie minimale sont celles où tous les spins sont dans le même état. L'énergie est concentrée sur les parois qui séparent des domaines de spins dans des états différents. Le modèle de Potts évolue par la dynamique de Glauber selon laquelle, à chaque instant, un spin peut prendre la valeur d'un des spins voisins avec une certaine probabilité. Cette dynamique mène le système vers l'équilibre, par minimisation de l'énergie, comme c'est le cas dans l'évolution de complexes polycristallins. Les études d'Anderson et al. ont montré qu'un système de spins de Potts évolue de façon très similaire aux polycristaux. La croissance, ou la décroissance, de l'aire d'un domaine suit approximativement la loi de Mullins (2.66).

L'avantage du modèle de Potts est que dans ce modèle l'énergie est complètement contrôlée. Des variantes plus réalistes du modèle de Potts ont été aussi étudiées, notamment avec un réseau triangulaire (plus isotrope) et avec des interactions dépendant des valeurs des spins [50,76-77].

Le comportement du système dépend de Q , le nombre d'états différents dans le modèle (voir figure (2.6)). Pour Q grand, l'évolution des domaines ressemble beaucoup à la croissance normale de grains. Pour Q petit, les domaines ont des formes très allongées et enchevêtrées. Cela est dû au fait qu'il y a une forte probabilité pour que deux cellules qui se trouvent en contact, suite à une transformation topologique T_1 , soient dans le même état de Potts (cette probabilité vaut 1 quand $Q = 3$).

Le modèle de Potts à $Q = 2$ est équivalent au modèle d'Ising où les spins prennent les valeurs ± 1 . Son comportement est complètement différent du modèle de Potts à $Q > 2$, puisqu'il n'y a pas de sommets dans la structure des domaines. Un sommet est le point de rencontre de trois domaines distincts, mais on ne dispose ici que de deux états différents. Le résultat est qu'un domaine de spins d'un des deux états est une île de forme très irrégulière entourée d'un domaine de l'autre état.

2.3.5 Mousses de savon

Une mousse de savon est un amas de bulles d'air entourées de films de savon. Les forces qui agissent dans ce système sont les forces associées à l'énergie de

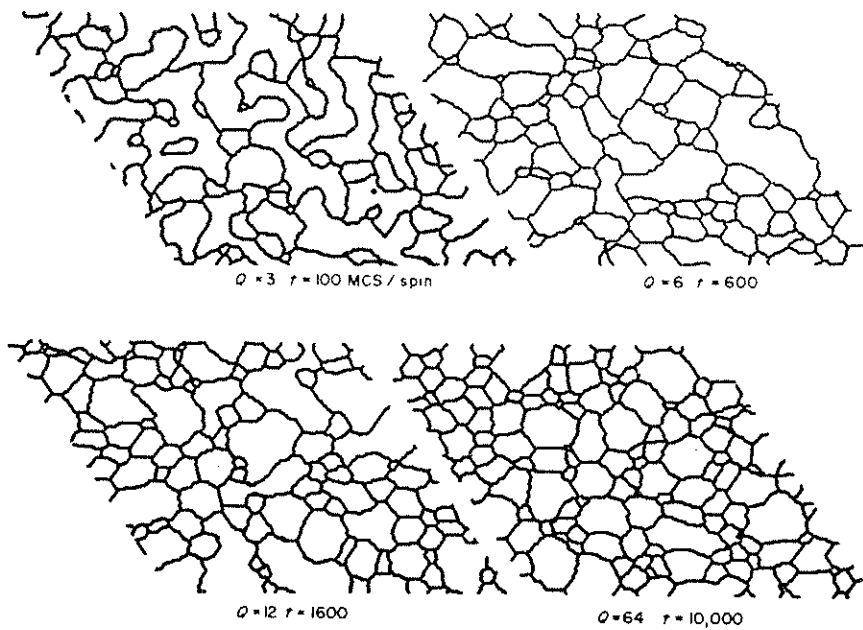


Figure 2.6 : Structures de domaines dans le modèle de Potts, pour différentes valeurs de Q [74].

tension superficielle des films et la pression de l'air à l'intérieur des cellules. La dynamique est basée sur la modification des formes des cellules pour minimiser l'énergie de tension superficielle, et sur la diffusion d'air à travers les films due à des différences de pression entre des cellules voisines.

Smith [44–45], Stavans et Glazier [46–50] ont étudié des mousses de savon placées entre deux plaques parallèles, qui constituent des structures cellulaires quasi-bidimensionnelles (voir figure (2.7)). On peut distinguer quatre échelles de temps typiques aux mousses de savon : le temps d'équilibration de la pression à l'intérieur d'une cellule, le temps d'équilibration des forces sur les sommets, le temps de drainage de l'excès du liquide sur les films (ils ont une épaisseur finie) et le temps associé à la diffusion d'air à travers les parois.

Nous allons supposer une situation idéalisée, où ce dernier temps est largement supérieur aux autres et nous allons regarder le système sur cette échelle de temps. Dans ces conditions, la pression est constante à l'intérieur d'une cellule et la forme d'une paroi est un arc de cercle avec une courbure κ_i proportionnelle à la différence de pression ΔP_i entre les deux cellules

$$\Delta P_i = 2\sigma\kappa_i . \quad (2.76)$$

où σ est l'énergie de tension superficielle par unité de longueur. Bien qu'il y ait des différences de pression entre les cellules, ces différences sont minimes par rapport aux pressions dans les cellules, et on peut considérer l'air dans les cellules comme un gaz incompressible ; une variation du nombre de particules de gaz dans une cellule est équivalente à la variation de l'aire de la cellule. La quantité d'air qui diffuse à travers une paroi est proportionnelle à la différence de pression entre les

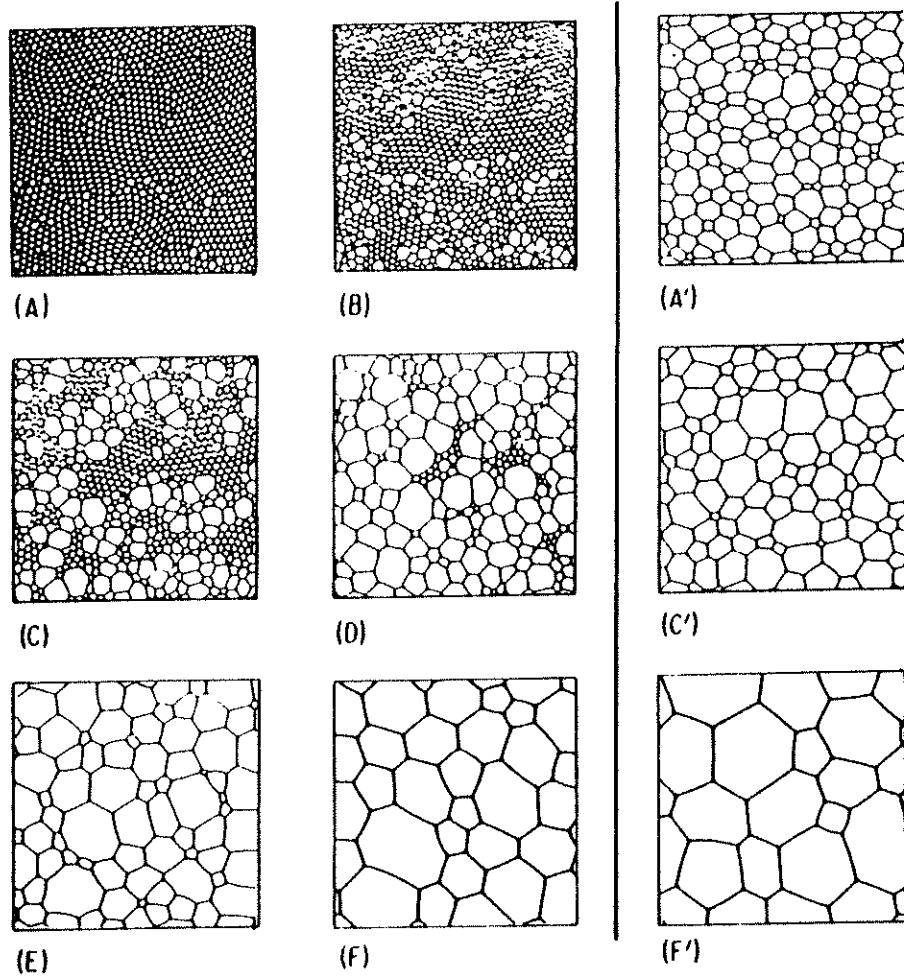


Figure 2.7 : Evolution de mousses de savon bidimensionnelles [46].

deux cellules. Cette relation peut être exprimée par le déplacement de la paroi

$$\dot{r}_i = -D\Delta P_i, \quad (2.77)$$

où r_i est la position d'un point sur la paroi i , en coordonnées radiales. La combinaison des équations (2.76-77) donne un déplacement de la paroi proportionnel à la courbure

$$\dot{r}_i = -2\sigma D\kappa_i. \quad (2.78)$$

En plus, les sommets sont en équilibre mécanique, avec des angles de 120° entre les parois. Ces deux éléments de l'évolution d'une mousse de savon sont les mêmes que dans la croissance normale de grains. Le résultat est un taux de croissance de l'aire d'une cellule qui ne dépend que de la topologie de la cellule

$$\dot{A} = \frac{2\pi\sigma D}{3}(n-6), \quad (2.79)$$

c'est la loi de von Neumann [78]. Cette analyse montre que, à part les formes des parois, une mousse de savon évolue de façon similaire à un polycristal.

Weaire et Kermode [79–84] ont étudié un modèle de mousse de savon idéalisée. Chaque cellule est caractérisée par les positions de ses sommets, son aire et sa pression. Chaque pas de simulation consiste d'abord à changer les aires des cellules selon la loi de von Neumann (2.79) et ensuite à soumettre les positions des sommets et les pressions des cellules à une dynamique qui les amène vers l'équilibre mécanique : des angles de 120° sur les sommets et des courbures selon (2.76). Ce modèle reproduit bien l'évolution des mousses de savon réelles (voir figure (2.8)), ce qui justifie les simplifications utilisées pour décrire les mousses, mais la méthode de simulation est extrêmement compliquée. Dans la phase d'équilibration de la structure, il faut tenir compte des corrélations entre les positions des sommets, les aires des cellules et leurs pressions.

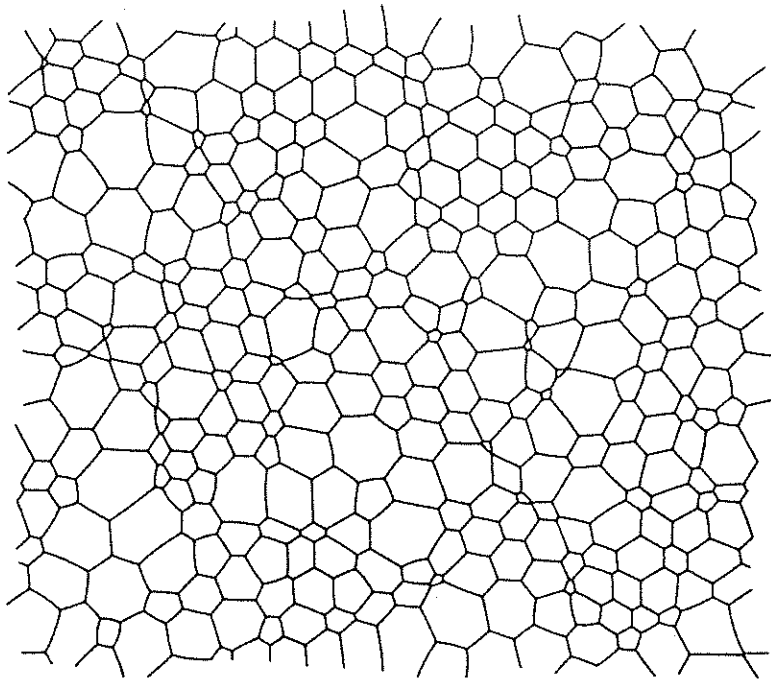


Figure 2.8 : Simulation du modèle de mousse de savon, dans le régime d'échelle [84].

2.4 Constructions géométriques

2.4.1 Tessellations de Voronoï

Une façon d'engendrer des structures cellulaires aléatoires consiste à effectuer des constructions géométriques sur des points mis au hasard dans le plan. La méthode systématique la plus simple est la tessellation de Voronoï.

Etant donné des points \mathbf{r}_i ($i = 1, \dots, N$) dans le plan, la tessellation de Voronoï de ces points est une partition de l'espace telle qu'à chaque point \mathbf{r}_i on associe la cellule C_i contenant tous les points du plan qui sont plus proches de ce point que des autres points \mathbf{r}_j ($j \neq i$)

$$C_i = \{\mathbf{r} \in R^2 \mid \forall (j \neq i) : |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| < |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|\} \quad (2.80)$$

La paroi entre deux cellules voisines est une arête rectiligne constituée de points équidistants des deux points. Les cellules sont polygonales et convexes. Pour une distribution aléatoire de points, la tessellation de Voronoï crée une structure de cellules avec des sommets trivalents (sauf dans des cas très rares statistiquement).

Pour construire le polygone de Voronoï d'un point, on trace les bissectrices de toutes les lignes qui joignent le point avec les autres points. Chaque ligne bissectrice divise le plan en deux, et le polygone de Voronoï du point est l'intersection de tous les demi-plans qui contiennent le point. Nous avons utilisé l'algorithme de Green et Sibson [15] pour construire les tessellations de Voronoï.

Si on trace une ligne entre chaque paire de points voisins, c'est-à-dire des points tels que leurs cellules sont voisines, on obtient le réseau de Delauney, dual de la tessellation de Voronoï. Le réseau de Delauney forme une triangulation du plan. Les sommets des triangles sont les points \mathbf{r}_i . La valence d'un sommet du réseau est égale au nombre de côtés de la cellule correspondante. Pour une distribution aléatoire de points, le réseau de Delauney est un réseau aléatoire.

Les propriétés géométriques de la tessellation de Voronoï dépend de la manière dont les points sont distribués dans le plan. La distribution la plus étudiée est celle engendrée par des points choisis au hasard indépendamment, avec une probabilité uniforme. Cette distribution s'appelle poissonnienne parce que, à une dimension, la probabilité de trouver k points sur une intervalle (a, b) est donnée par la distribution poissonnienne.

Il existe quelques résultats exacts sur les propriétés statistiques des tessellations de Voronoï des points poissonniens [85]. D'autres résultats sont obtenus par simulations numériques [86-92]. Mesurée avec des unités telles que l'aire moyenne d'une cellule dans la tessellation vaut 1, la longueur moyenne d'une arête vaut $\frac{2}{3}$. Sur le réseau de Delauney, la distance moyenne entre deux points voisins vaut $\frac{32}{9\pi}$, et l'aire moyenne d'un triangle vaut $\frac{1}{2}$.

Il est possible de donner une expression analytique de la distribution des nombres de côtés des cellules, P_n . Soit M_0 un point à l'origine et soient M_1, \dots, M_n des points avec des positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n$. On note par $A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ l'aire de l'union des cercles centrés sur M_1, \dots, M_n passant par M_0 . Soit $\chi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ une fonction caractéristique qui prend la valeur 1 si les bissectrices des segments $M_i M_0$ forment un polygone convexe de n côtés, et la valeur 0 autrement. Alors, la distribution des nombres de côtés des cellules est donnée par

$$P_n = \frac{1}{n!} \int \prod_{i=1}^n d^2 r_i \chi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) e^{-A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)}. \quad (2.81)$$

L'évaluation de la distribution doit être faite numériquement.

Nous présentons des courbes de différentes quantités mesurées sur une tessellation de Voronoï de 30 000 points poissonniens. La figure (2.9a) montre la distribution des aires des cellules. Cette distribution est bien représentée par une distribution γ

$$P(A) \sim A^{\nu-1} \exp \left\{ -\frac{\nu A}{A} \right\} \quad (2.82)$$

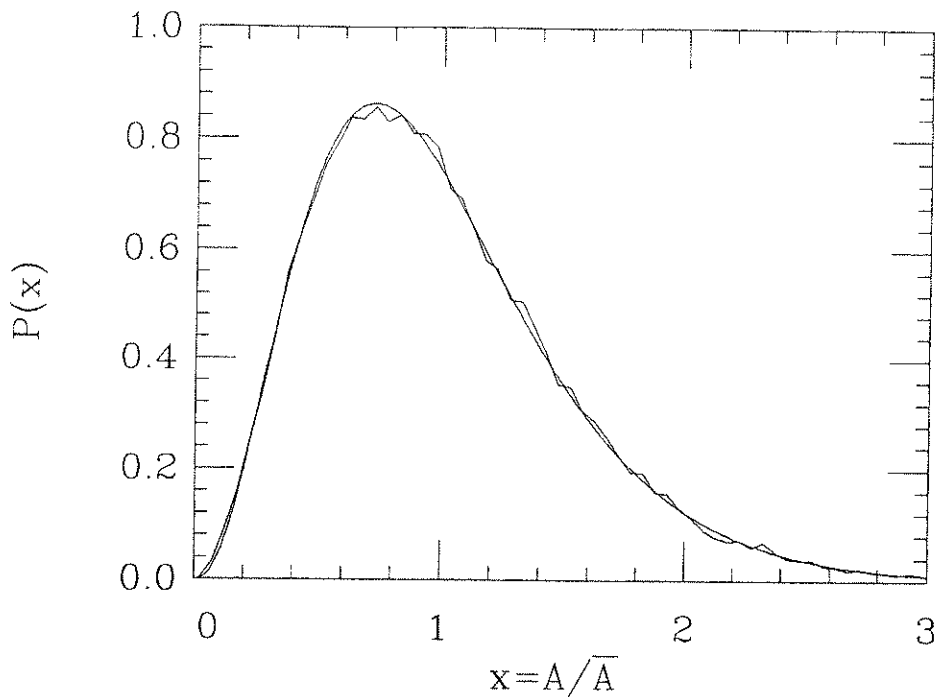


Figure 2.9a : Distribution des aires des polygones de Voronoï de points poissonniens, comparée avec la distribution Γ (équation (2.82)) avec $\nu = 3.6$.

avec $\nu \cong 3.6$.

Dans la figure (2.9b) nous avons tracé la distribution des distances entre points voisins, autrement dit, des longueurs des liens sur le réseau de Delauney. La figure (2.9c) montre la distribution des nombres de côtés des cellules, P_n . Le deuxième moment de cette distribution, μ_2 , vaut 1.78. L'aire moyenne de polygones de n côtés, \bar{A}_n , tracée dans la figure (2.9d), semble être linéaire en n , conformément à la loi de Lewis, avec $\lambda = 0.23$. Nous avons tracé m_n , le nombre moyen de côtés des cellules voisines à une cellule de n côtés, multiplié par n , dans la figure (2.9e). Cette courbe est presque linéaire, mais on voit une légère déviation pour n petit. Nous avons calculé la distribution des cellules voisines avec, respectivement, n et l côtés, Q_{nl} . Dans la figure (2.9f) nous avons tracé Q_{nl} divisée par $P_n P_l$, en fonction de l pour différentes valeurs de n . Ces courbes ne sont pas linéaires, mais il existe un point de focalisation de presque toutes ces courbes, à $n = 8.5$, qui est aussi la valeur pour laquelle $m_n = 6$. Il semble que la loi (2.19) est vérifiée localement autour de $n_0 = 8.5$.

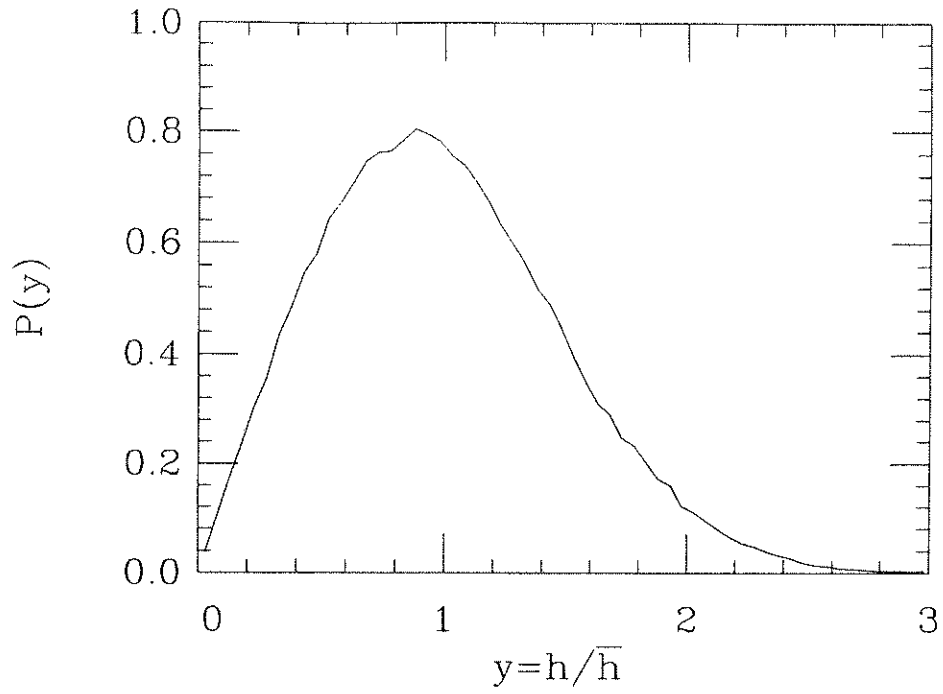


Figure 2.9b : Distribution des distances entre points voisins.

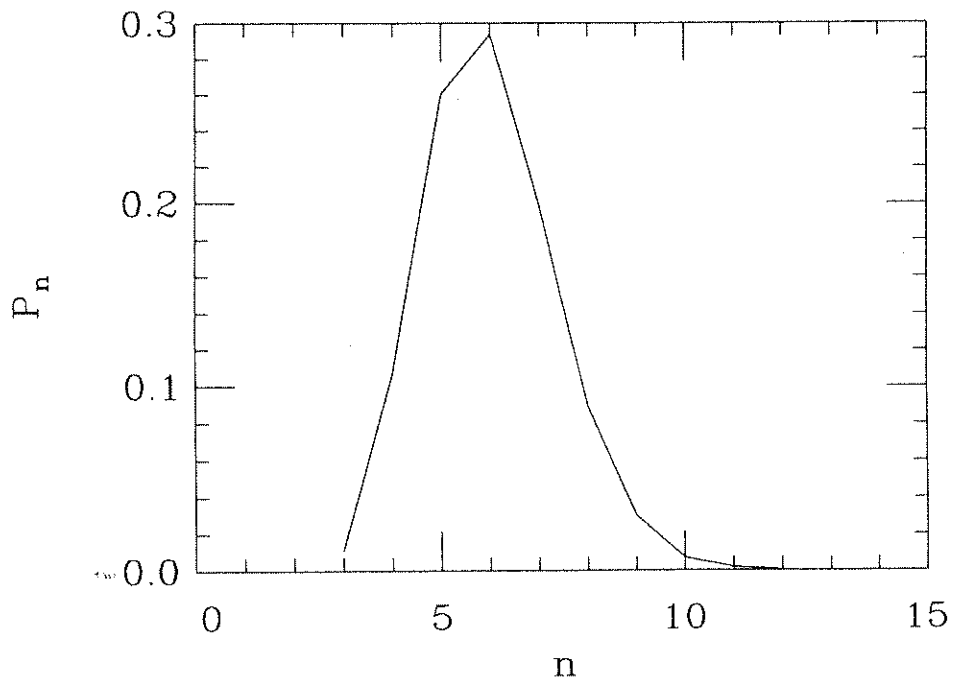


Figure 2.9c : Distribution des nombres de côtés des polygones, P_n .

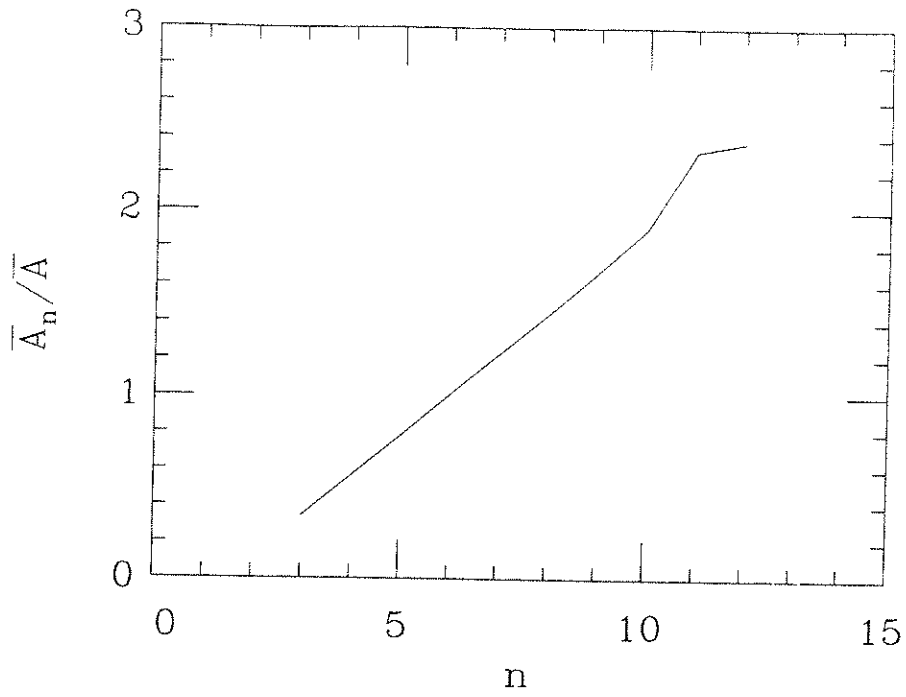


Figure 2.9d : L'aire moyenne de polygones de n côtés semble être linéaire en n , conformément à la loi de Lewis, avec $\lambda = 0.23$.

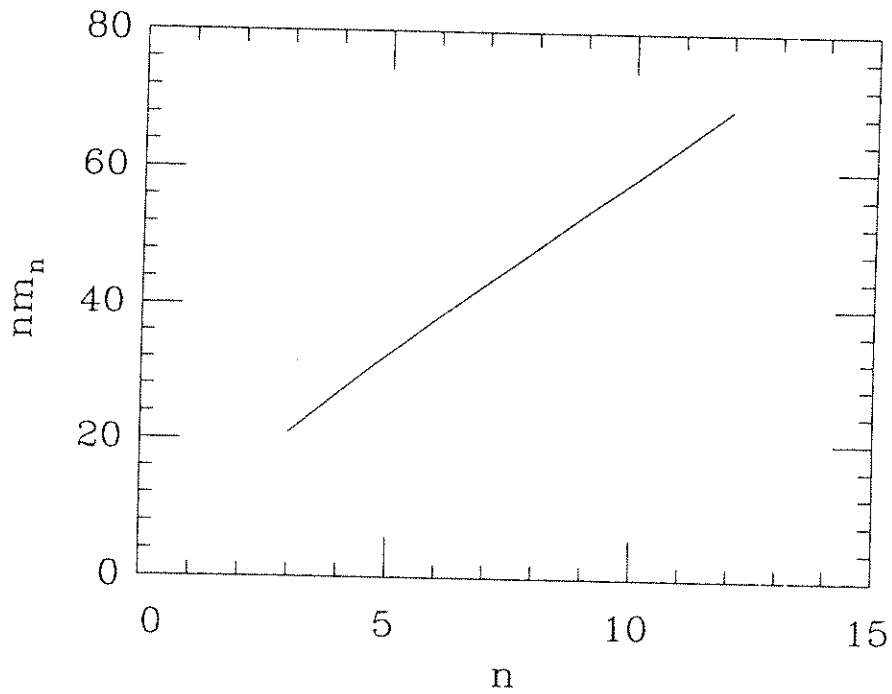


Figure 2.9e : Le nombre moyen de côtés des cellules voisines à une cellule de n côtés, multiplié par n , est presque linéaire en n .

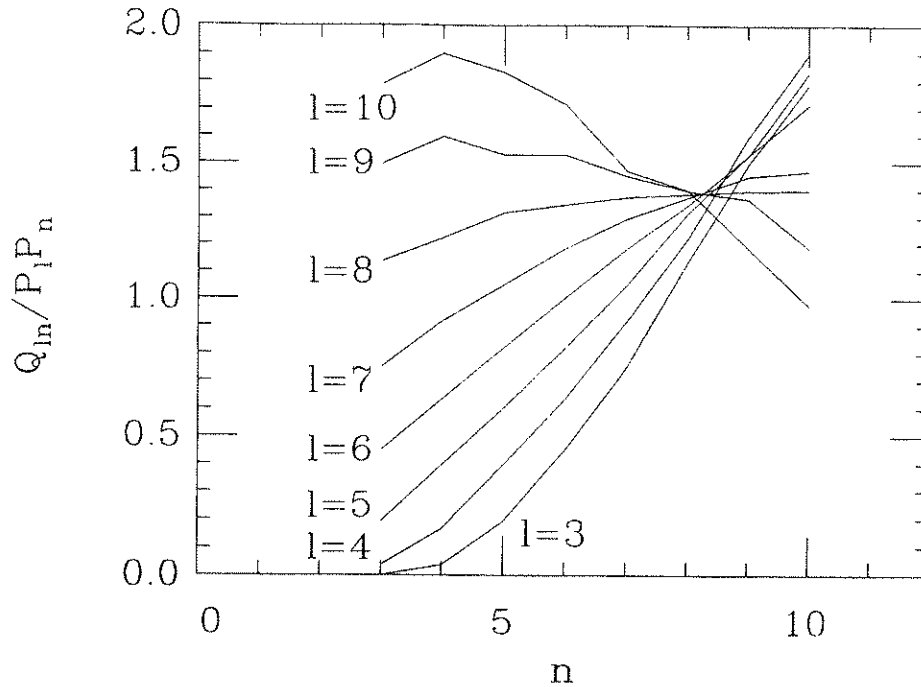


Figure 2.9f : La distribution de cellules voisines de n et l côtés Q_{nl} , divisée par $P_n P_l$, en fonction de n pour différentes valeurs de l .

Une répartition différente de points est engendrée par la méthode de RSA (*Random Sequential Adsorption*). Sur une région de taille finie du plan, on place séquentiellement des disques de même rayon dans des positions choisies au hasard. Si un nouveau disque recouvre un disque déjà placé, on rejette le nouveau. Puisque la région a une taille finie, on ne peut placer qu'un nombre fini de points sans recouvrement ; cela s'appelle la limite d'encombrement (*jamming limit*). La tessellation de Voronoï des centres des disques a une forme plus homogène que celle de points poissonniens [30,87].

Si des points dans le plan possèdent une dynamique, la tessellation de Voronoï de ces points est une structure cellulaire évolutive. Voici trois exemples de processus dynamiques de types différents :

- (1) A partir d'une distribution aléatoire de points, chaque point se déplace vers le centre de son polygone de Voronoï. Le système évolue vers une configuration d'équilibre mécanique où chaque point est au centre de son polygone [30].
- (2) Des modèles de gaz ou de liquide : les points sont en mouvement dans le plan, avec une interaction entre chaque paire de points. Cet ensemble de points va vers l'équilibre au sens de la mécanique statistique [21,23].
- (3) A partir d'une distribution aléatoire de points, on cherche les deux points les plus proches et on les remplace par un seul point au milieu des deux. Ce modèle, étudié dans le chapitre précédent et dans la sous-section suivante, mène le système vers un régime d'échelle où les propriétés statistiques du système sont constantes, à part le changement d'échelle.

La croissance normale de grains appartient à la même classe de processus dynamiques que le modèle (3).

2.4.2 Modèles bidimensionnels de figures de souffle

Dans le chapitre précédent, nous avons introduit des modèles de figures de souffle où les gouttes sont représentées par des points. Pour étudier ces modèles à deux dimensions, nous avons utilisé la tessellation de Voronoï. Dans la section (1.4) nous avons présenté les propriétés métriques du système dans le régime d'échelle : les distributions des distances entre gouttes voisines et les distributions des aires des polygones de Voronoï. Maintenant, nous allons présenter les propriétés topologiques de la tessellation en tant que structure cellulaire évolutive.

Nous rappelons que dans le modèle géométrique, à chaque itération, on cherche les deux points les plus proches, et on les remplace par un seul point placé en leur milieu. Cette dynamique mène le système vers un régime d'échelle, caractérisé par une longueur typique unique. La figure (2.10a) montre μ_2 , le deuxième moment de la distribution P_n , en fonction de h_0 , la distance minimale entre les points. Dans la configuration initiale il y a 30 000 points poissonniens. Quand $h_0 \sim 0.01$, le système arrive au régime d'échelle, et μ_2 atteint une valeur de 0.65.

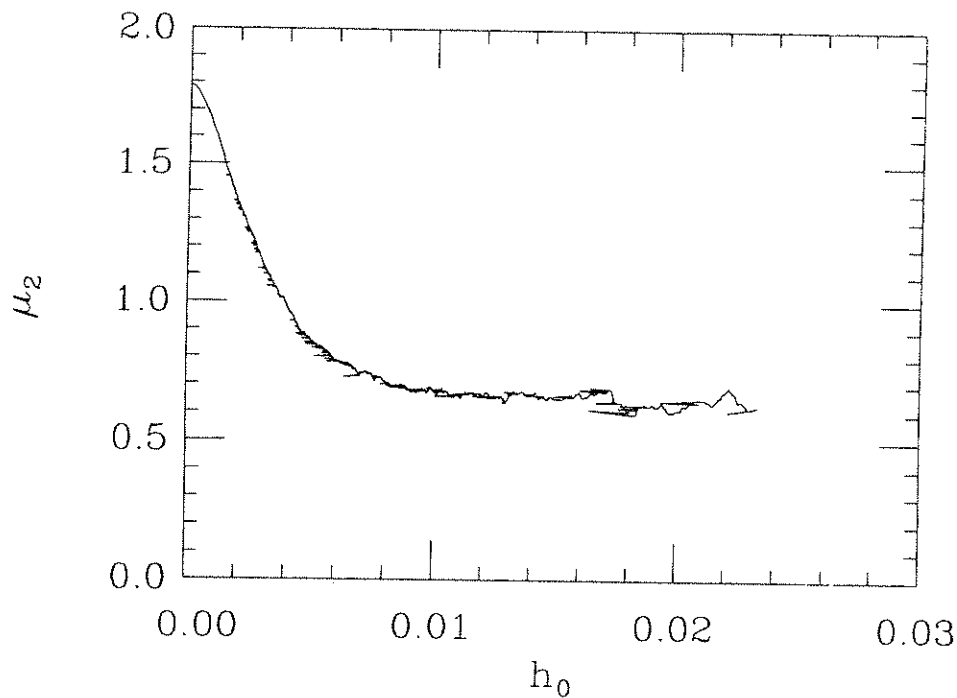


Figure 2.10a : Le deuxième moment de la distribution P_n , μ_2 , en fonction de h_0 , la distance minimale entre les points, pour le modèle géométrique de figures de souffle.

Les fluctuations dans la valeur de μ_2 dépendent de la taille du système, et augmentent avec le temps. Les lignes horizontales dans la courbe sont dues à des "coalescences multiples". La distance minimale h_0 n'est pas strictement croissante dans ce modèle. Il peut arriver que le nouveau point créé entre deux points qui coalescent (avec une distance h_0 entre eux) soit à une distance plus petite que h_0

d'un autre point. Ces deux derniers points deviennent les plus proches, et sont les prochains points à subir une coalescence.

Les figures suivantes montrent des courbes mesurées dans le régime d'échelle. Ces courbes sont le résultat d'une moyenne sur 5 temps différents, quand il reste 3000, 2500, ..., 1000 points. La figure (2.10b) montre la distribution du nombre de côtés des cellules. Elle présente un pic pour $n = 6$, et elle est presque symétrique autour de cette valeur. Pour cette distribution $\mu_2 = 0.65$. Nous avons tracé \bar{A}_n , l'aire moyenne de cellules de n côtés, divisée par l'aire moyenne \bar{A} dans la figure (2.10c). La courbe est linéaire pour $n \geq 6$. Nous avons tracé m_n , le nombre moyen de côtés des cellules voisines à une cellule de n côtés multiplié par n dans la figure (2.10d). Cette courbe est presque linéaire, mais on voit une légère déviation pour n petit. Dans la figure (2.10e), nous avons tracé Q_{nl} , la distribution de cellules voisines avec, respectivement, n et l côtés, divisée par $P_n P_l$, en fonction de l pour différentes valeurs de n . Toutes ces courbes, bien qu'elles ne sont pas linéaires, se croisent au point $n_0 = 6.5$. La loi de Peshkin et al. semble être vérifiée autour de ce point.

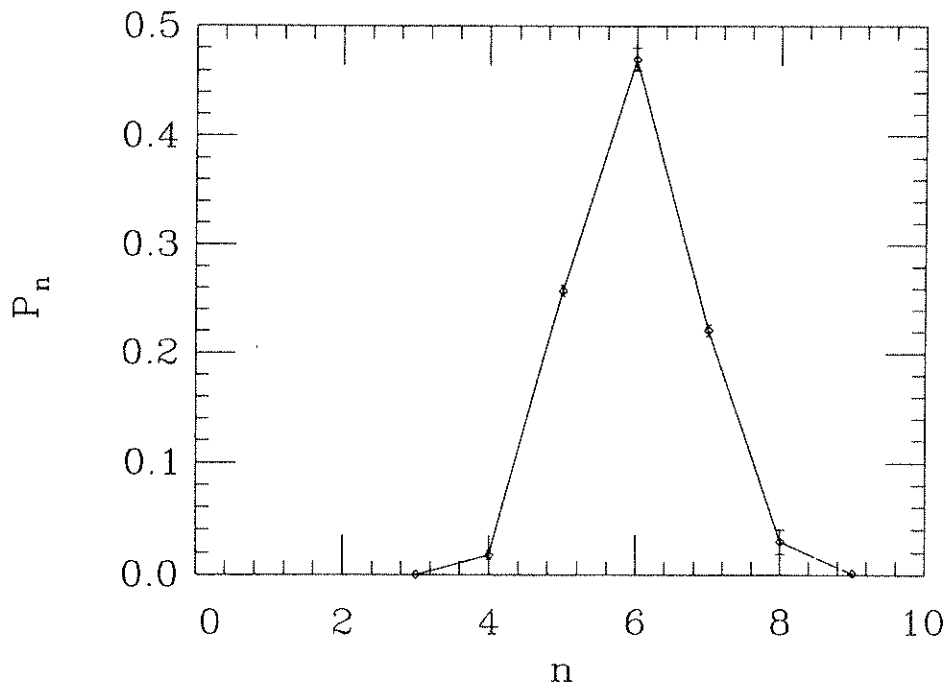


Figure 2.10b : La distribution du nombre de côtés des polygones, P_n .

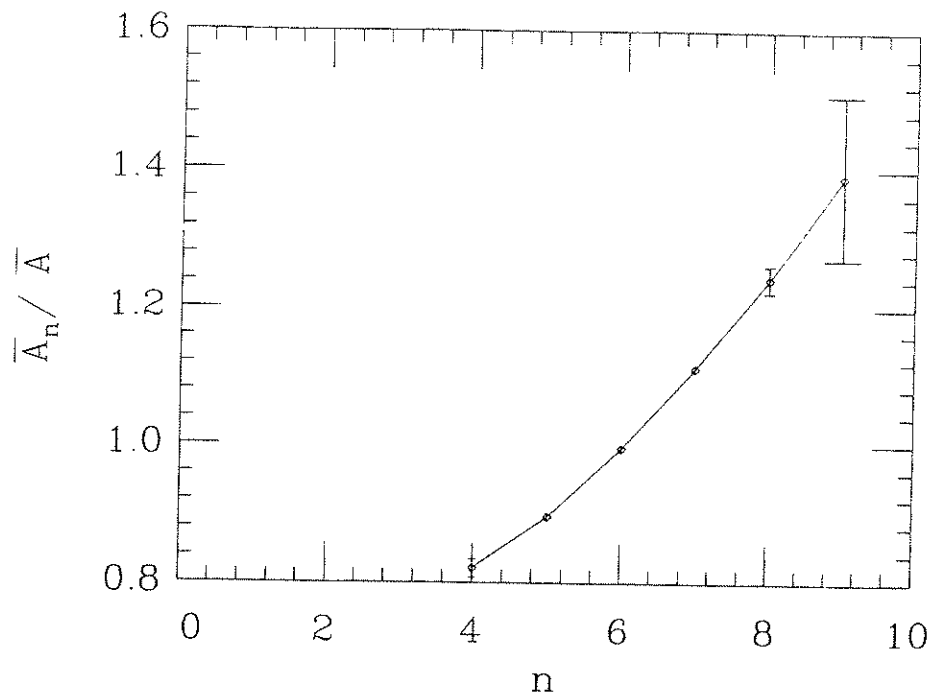


Figure 2.10c : L'aire moyenne de polygones de n côtés est linéaire en n , pour $n \geq 6$.

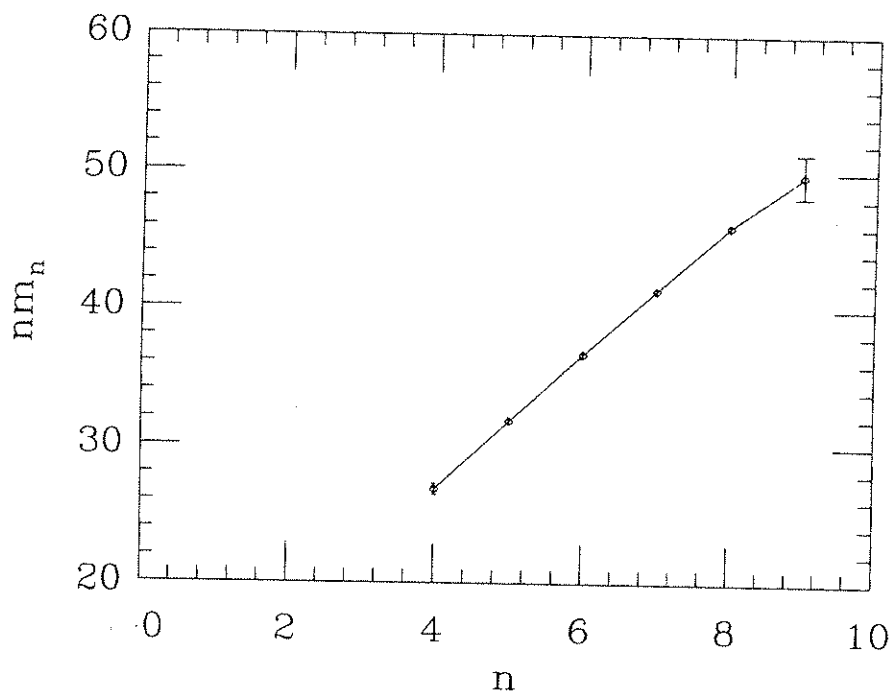


Figure 2.10d : Le nombre moyen de côtés des cellules voisines à une cellule de n côtés, multiplié par n , n'est pas linéaire en n .

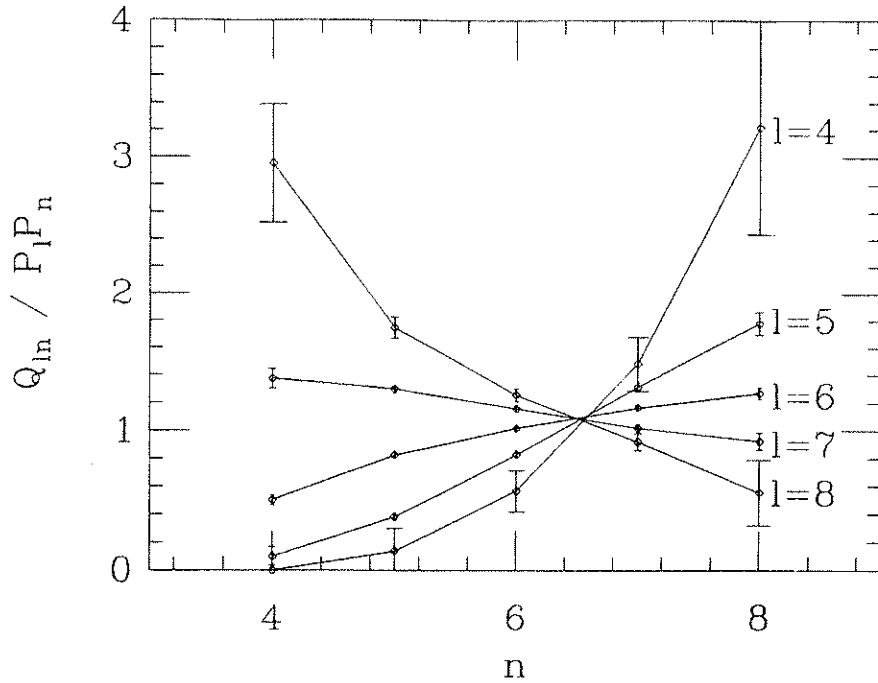


Figure 2.10e : La distribution de cellules voisines avec, respectivement, n et l côtés Q_{nl} , divisée par $P_n P_l$, en fonction de n pour différentes valeurs de l .

Dans le deuxième modèle, le modèle cellulaire, à chaque itération on élimine le point avec le polygone de Voronoï le plus petit. Cette dynamique mène le système aussi vers un régime d'échelle. La figure (2.11a) montre μ_2 , le deuxième moment de la distribution P_n en fonction de A_0 , l'aire du polygone le plus petit. Quand $A_0 \sim 0.0001$, le système arrive au régime d'échelle, et μ_2 atteint une valeur de 0.7.

La figure (2.11b) montre la distribution du nombre de côtés des cellules, avec un pic pour $n = 6$; elle est presque symétrique autour de cette valeur. La loi de Lewis semble être applicable seulement pour n grand (voir figure (2.11c)). m_n multiplié par n , tracé dans la figure (2.11d), est linéaire en n ; il vaut 6 pour $n_0 = 6.5$. Dans la figure (2.11e), nous avons tracé Q_{nl} , la distribution de cellules voisines avec, respectivement, n et l côtés, divisée par $P_n P_l$, en fonction de l pour différentes valeurs de n . Cette figure ressemble beaucoup à la figure correspondante pour le modèle géométrique. Toutes les courbes se croisent à $n = n_0$.

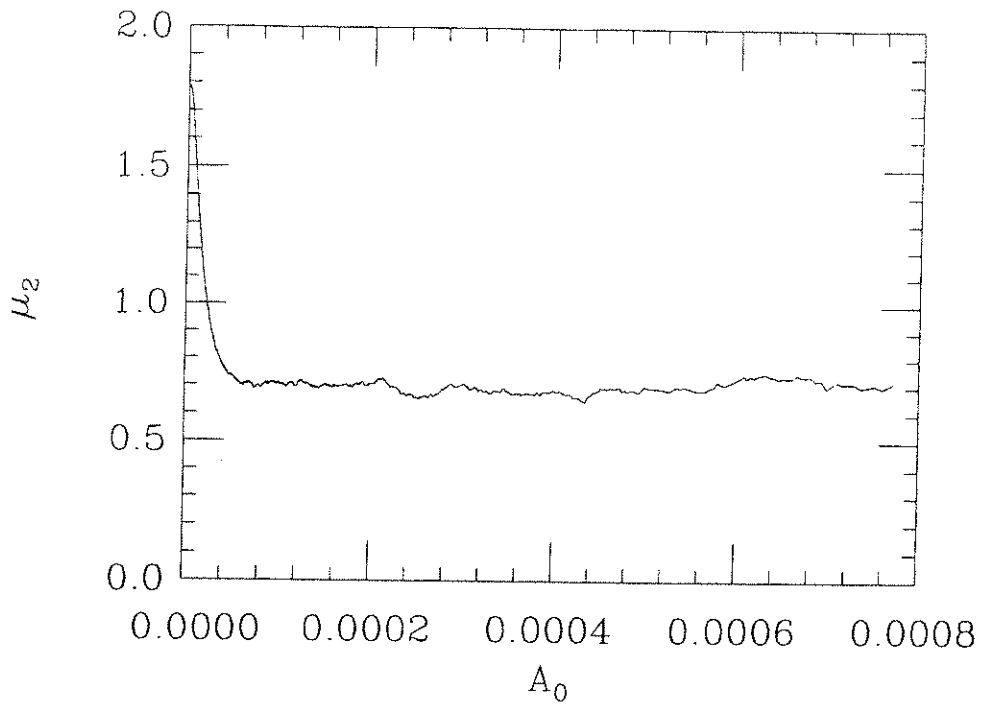


Figure 2.11a : Le deuxième moment de la distribution P_n , μ_2 , en fonction de A_0 , l'aire du polygone le plus petit, pour le modèle cellulaire.

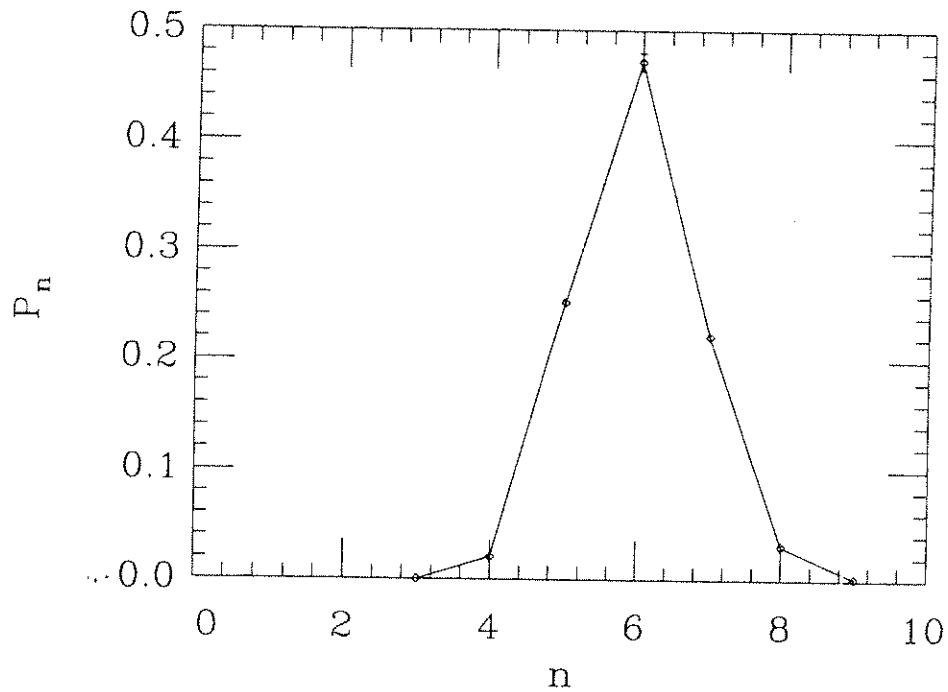


Figure 2.11b : La distribution du nombre de côtés des polygones P_n .

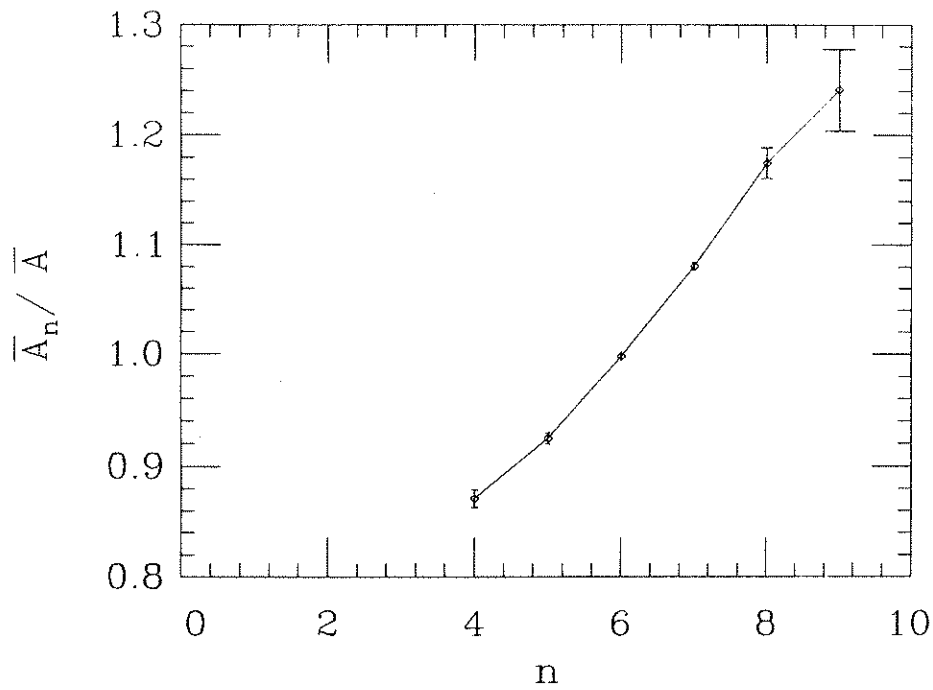


Figure 2.11c : L'aire moyenne de polygones de n côtés est linéaire en n , pour $n \geq 6$.

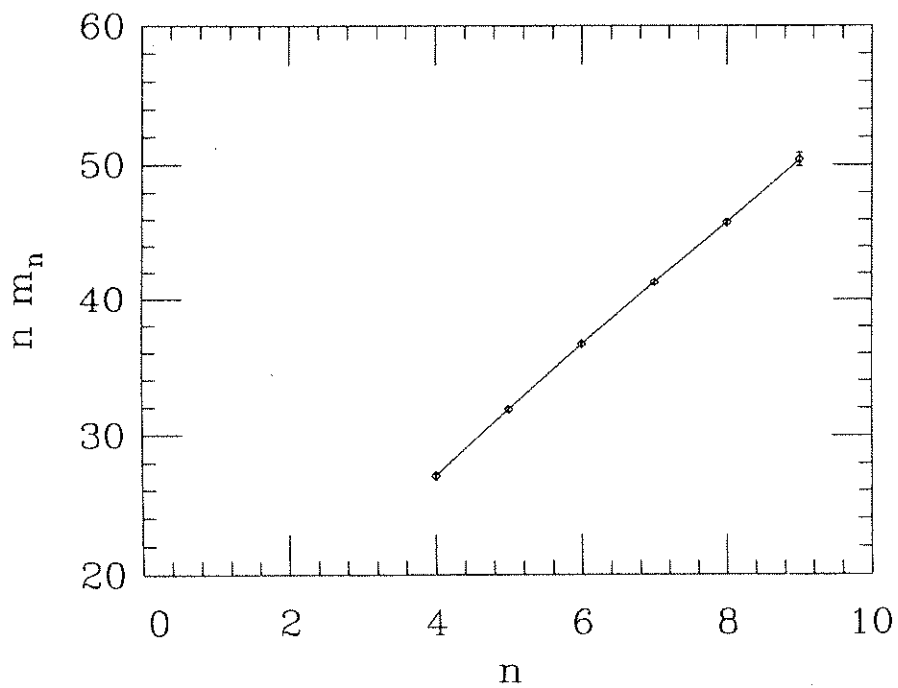


Figure 2.11d : Le nombre moyen de côtés des cellules voisines à une cellule de n côtés, multiplié par n , est linéaire en n .

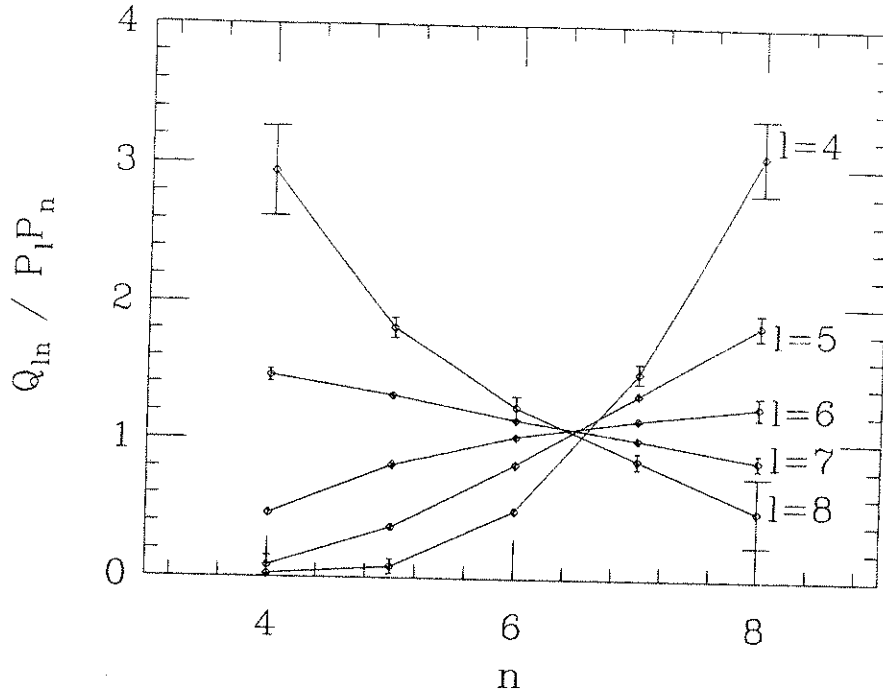


Figure 2.11e : La distribution de cellules voisines avec, respectivement, n et l côtés Q_{nl} , divisée par $P_n P_l$, en fonction de n pour différentes valeurs de l .

2.4.3 Complexes de Laguerre

Un complexe de Laguerre est une autre construction sur des points. Pour un cercle S_i donné, de rayon R_i , centré sur le point \mathbf{r}_i dans le plan, on définit la puissance $p(\mathbf{r}; S_i)$ d'un point \mathbf{r} par rapport au cercle S_i par

$$p(\mathbf{r}; S_i) = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2 - R_i^2 . \quad (2.83)$$

Etant donné un ensemble de cercles S_i ($i=1, \dots, N$) de rayons R_i , centrés sur les points \mathbf{r}_i dans le plan, le complexe de Laguerre est une partition de l'espace telle qu'à chaque cercle S_i on associe la cellule C_i contenant tous les points qui ont une puissance plus petite par rapport à S_i que par rapport aux autres cercles S_j ($j \neq i$) :

$$C_i = \{ \mathbf{r} \in R^2 | \forall (j \neq i) : p(\mathbf{r}; S_i) < p(\mathbf{r}; S_j) \} . \quad (2.84)$$

La paroi entre deux cellules voisines est une arête rectiligne, constituée de points équipotents par rapport aux deux cercles, perpendiculaire au segment $(\mathbf{r}_i; \mathbf{r}_j)$. La tessellation de Voronoï est un cas particulier d'un complexe de Laguerre où tous les cercles ont le même rayon.

Telley [93] a proposé une représentation des complexes de Laguerre au moyen de paraboloides à trois dimensions. Chaque cercle S_i est représenté par le point $(\mathbf{r}_i, z_i=R_i^2)$, où $\mathbf{r}_i \in R^2$. A chacun de ces points on associe le paraboloides P_i

$$P_i = \{ (\mathbf{r}, z) \in R^3 | z = z_i - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^2 \} . \quad (2.85)$$

Il est évident qu'avec cette définition, la coordonnée z d'un point (\mathbf{r}, z) sur le parabolöide P_i est égale à $-p(\mathbf{r}; S_i)$. Si on introduit maintenant un ensemble de parabolöides P_i , on trouve un système qui ressemble à un paysage de montagnes de forme parabolöidale, avec des sommets aux points \mathbf{r}_i et des hauteurs z_i . Une vallée entre deux montagnes P_i et P_j est le lieu des points équipouissants par rapport aux cercles correspondants S_i et S_j . La projection de la structure de vallées sur le plan $z=\text{cste}$ est le complexe de Laguerre.

Ensuite, Telley a doté ce système de parabolöides d'une dynamique. L'idée est d'utiliser la dynamique du modèle de sommets de Fullman (voir le sous-section (2.5.1)) de minimisation de la longueur totale des arêtes de la structure cellulaire. Dans le modèle de Telley, les variables indépendantes sont les positions et les vitesses des sommets des parabolöides (\mathbf{r}_i, z_i) et non pas celles des sommets de la structure cellulaire. Chaque sommet se déplace, horizontalement et verticalement, dans une direction qui tend à diminuer la longueur totale des arêtes. L'évolution des sommets des parabolöides fait que la structure cellulaire correspondante évolue aussi. Le déplacement des sommets peut entraîner des modifications topologiques de la structure cellulaire, des changements de voisinage aussi bien que des disparitions des cellules : si la hauteur z_i du sommet d'un parabolöide devient suffisamment basse par rapport aux parabolöides voisins, ce parabolöide est caché par ses voisins et la cellule qui lui est associée disparaît.

Les points faibles du modèle sont, d'une part, la forme très compliquée des équations de mouvement des parabolöides, et d'autre part, le fait que les conséquences de la dynamique sur la structure cellulaire sont très indirectes.

2.5 Le modèle de sommets

2.5.1 *Travaux antérieurs*

Une difficulté importante dans l'étude des systèmes décrits jusqu'à présent est le manque de données statistiques suffisantes. La plupart des systèmes expérimentaux sont de petite taille, et il est toujours difficile de réaliser des expériences très propres et avec une bonne résolution. Les simulations numériques des modèles déterministes, tels que le modèle de Potts ou le modèle de mousse de savon, sont très coûteuses en temps de calcul. En conséquence, leur propriétés ne sont pas connues assez précisément.

C'est ce qui a motivé l'introduction du modèle de sommets, un modèle de croissance des domaines très simple où les parois entre les cellules sont des arêtes rectilignes. La structure cellulaire, dans ce modèle, est complètement déterminée par les positions des sommets et une liste des voisinages entre sommets. La dynamique du modèle consiste à déplacer chaque sommet dans la direction qui résulte d'une force qui tend à minimiser la longueur totale des arêtes et d'un terme dissipatif opposé à cette force. A cela il faut ajouter des modifications de nature topologique qui s'effectuent quand une arête devient très petite, au moyen de transformations T_1 et T_2 . Les transformations topologiques contribuent aussi à la diminution de la longueur totale des arêtes.

Nous allons reprendre le développement de Kawasaki et al. [55,94–96] qui déduit les équations du mouvement des sommets à partir d'un calcul variationnel. L'intérêt du modèle de sommets est qu'on y restreint beaucoup le nombre de degrés de liberté. Les seules variables dynamiques indépendantes restantes sont les positions des sommets \mathbf{r}_i et leurs vitesses $\mathbf{v}_i = d\mathbf{r}_i/dt$. On définit un potentiel \mathcal{F} et une fonction de dissipation \mathcal{R} , comme dans la croissance normale de grains (équations (2.50,2.53)). La position et la vitesse d'un point sur une paroi sont des combinaisons linéaires des positions et des vitesses des deux sommets aux extrémités de la paroi. Les fonctions \mathcal{F} et \mathcal{R} sont exprimées (après quelques manipulations algébriques) à l'aide des positions et des vitesses des sommets

$$\mathcal{F} = \sigma \sum_{\langle ij \rangle} |\mathbf{r}_{ij}| \quad (2.86)$$

$$\mathcal{R} = \frac{\sigma}{3L} \sum_{\langle ij \rangle} |\mathbf{r}_{ij}| [(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i)^2 + \frac{1}{2}(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i)(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_j)] \quad (2.87)$$

avec les notations $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, et \mathbf{n}_{ij} pour le vecteur unité normal à \mathbf{r}_{ij} . L'équation du mouvement d'un sommet est donnée par

$$\frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \mathbf{v}_i} + \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{r}_i} = 0 \quad (2.88)$$

où $\delta \mathbf{r}_i$ et $\delta \mathbf{v}_i$ sont des variations infinitésimales de la position et de la vitesse du sommet i . En appliquant l'équation (2.88), on trouve

$$\sum_{j(i)} \Gamma_{ij} \cdot (\mathbf{v}_i + \frac{1}{2}\mathbf{v}_j) = \mathbf{f}_i \quad (2.89)$$

où la somme est effectuée sur les trois sommets j connectés au sommet i . Le tenseur Γ_{ij} est défini par

$$\Gamma_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{3L} |\mathbf{r}_{ij}| n_{ij}^\alpha n_{ij}^\beta \quad (2.90)$$

où les indices grecs prennent les valeurs x, y . La force \mathbf{f}_i est donnée par

$$\mathbf{f}_i = - \sum_{j(i)} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \cdot \quad (2.91)$$

La force \mathbf{f}_i sur le sommet i s'annule quand les trois arêtes qui y arrivent forment des angles de 120° entre elles. Le membre de gauche de l'équation (2.89) est un terme dissipatif proportionnel aux vitesses du sommet i et de ses voisins. A cause du caractère tensoriel de l'équation, le déplacement d'un sommet n'est pas nécessairement dans la direction de la force. Le terme $\frac{1}{2}\mathbf{v}_j$ du membre de gauche de l'équation (2.89) est un terme de corrélation entre les déplacements des sommets

connectés. Il faut noter que, contrairement à la croissance normale de grains, la vitesse d'un point sur une paroi n'est pas normale à la paroi.

L'intégration de l'équation (2.89) requiert, à chaque pas de temps, de résoudre $2N$ équations linéaires pour les composantes des vitesses v_i^α . Kawasaki et al. ont aussi étudié des variantes simplifiées de leur modèle, sans le terme de corrélation, ou avec une forme non-tensorielle équivalente à l'équation (2.89).

Fullman[97] a considéré aussi qu'un déplacement d'un sommet entraîne un frottement proportionnel à l'aire balayée par les parois (voir figure (2.12)), ce qui donne l'équation de mouvement d'un sommet

$$\gamma_i \mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i \quad (2.92)$$

où \mathbf{f}_i est donnée par l'équation (2.92) et

$$\gamma_i = \frac{1}{2|\mathbf{f}_i|} \left| \sum_{j(i)} |\mathbf{r}_{ij}| \mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{f}_i \right|. \quad (2.93)$$

Dans cette variante le frottement a un caractère scalaire.

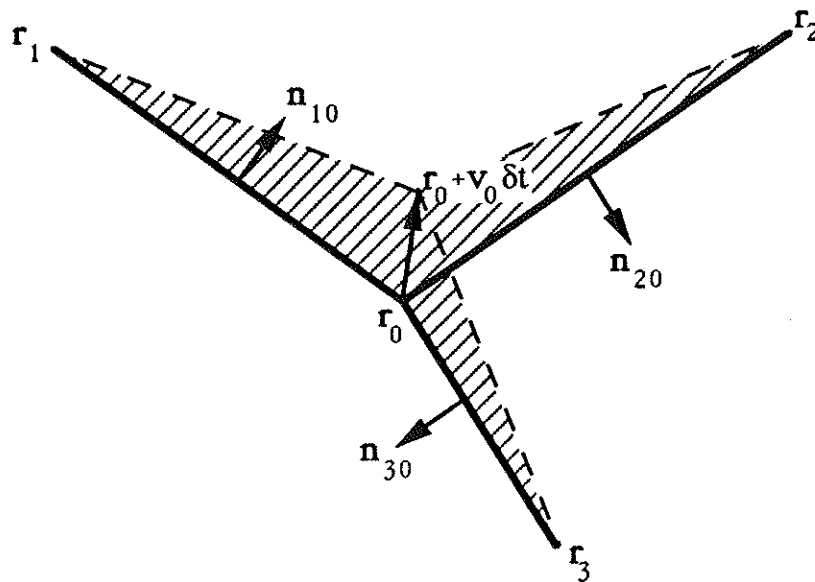


Figure 2.12 : L'aire balayé par le déplacement d'un sommet.

Soares et al. [98-99] ont étudié une variante encore plus simple, où le frottement est considéré comme constant, avec l'équation de la dynamique des sommets

$$\gamma \mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i. \quad (2.94)$$

Avant de continuer, nous allons essayer de donner l'interprétation physique des différentes variantes du modèle de sommets. L'inspection de structures cellulaires variées nous montre que, dans certains cas, les parois entre les cellules sont très peu courbées. Visuellement, le modèle de sommets semble être assez proche des structures cellulaires réelles.

L'imposition des parois rectilignes dans le modèle de sommets constitue une contrainte très forte sur le système. Cette contrainte peut être relaxée si on admet des parois en courbes polygonales. Aux sommets originaux (trivalents) du modèle de sommets on rajoute des sommets intermédiaires (bivalents) sur les parois. On peut écrire des équations de mouvement pour tous ces sommets, équivalentes aux équations (2.89-91). Dans la limite où le nombre des sommets intermédiaires entre chaque paire des sommets originaux tend vers l'infini, et la distance entre chaque paire des sommets tend vers zéro, on retrouve la dynamique de la croissance normale des grains (l'équation (2.56)). La variante de Kawasaki et al. est la variante du modèle de sommets la plus proche des structures cellulaires réelles.

On peut imaginer la situation extrême d'une structure cellulaire où le temps de relaxation associé à l'aplatissement de la courbure d'une paroi est beaucoup plus court que le temps associé au déplacement d'un sommet. Dans une telle structure cellulaire, on va trouver des parois plates, conformément au modèle de sommets. Puisque la force agit directement sur le sommet, il est possible d'effectuer un déplacement infinitésimal du sommet dans la direction de la force, avec des déformations infinitésimales des arêtes autour du sommet. Le frottement dû à ce déplacement sera négligeable, et les déformations des parois se relaxeront tout de suite, sans effet sur la dynamique. Cette situation correspond à la variante de Soares et al. En réalité, c'est plutôt la situation inverse qui se produit. Il est généralement accepté que dans une structure cellulaire réelle, les sommets s'équilibrent plus rapidement que les parois.

2.5.2 Propriétés générales du modèle

Nous avons repris le modèle de sommets et, guidés par la recherche de modèles les plus simples, nous avons opté pour la variante de Soares et al. Si la croissance de domaines a un comportement universel, celui-ci doit apparaître aussi pour les modèles les plus simples, même très éloignés des situations réelles. Pour la clarté de la discussion qui suit, nous redéfinissons cette variante du modèle de sommets.

Etant donnée une structure cellulaire avec des sommets trivalents et des parois rectilignes (des arêtes), on effectue une des deux opérations suivantes :

- s'il existe une arête de longueur inférieure à une longueur minimale d_0 alors, si cette arête appartient à un triangle, on effectue une transformation T_2 qui élimine le triangle, sinon on effectue une transformation T_1 d'échange de voisinage (voire figure (2.13)),
- sinon on déplace chaque sommet selon l'équation

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = - \sum_{j(i)} \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.95)$$

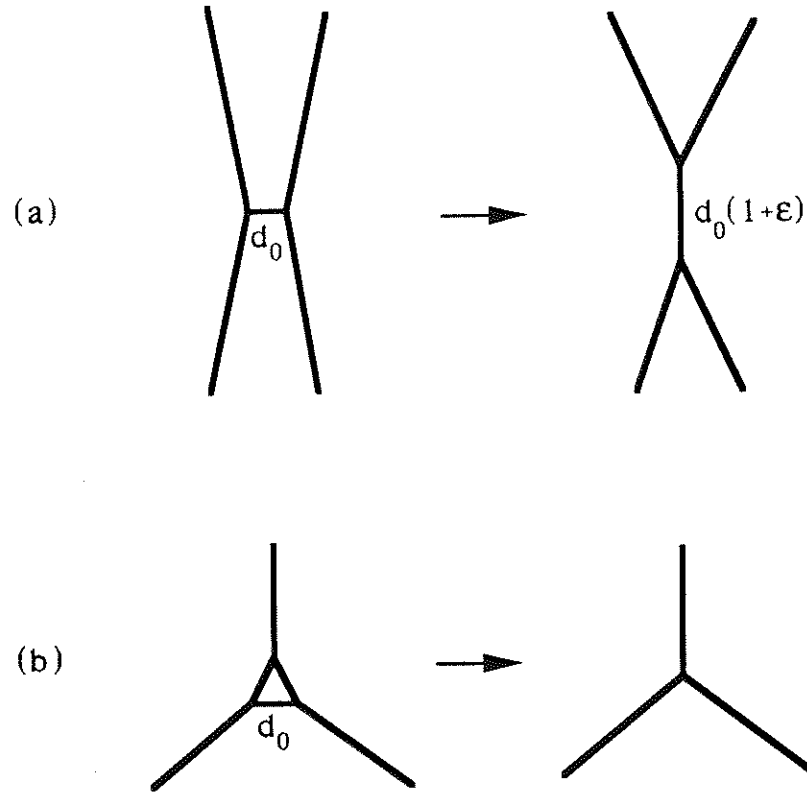


Figure 2.13 : Une transformation topologique (a) T_1 ou (b) T_2 est effectuée quand une arête a une longueur inférieure à la longueur minimale d_0 .

où \mathbf{r}_i est la position du sommet i et la somme porte sur les sommets j connectés au sommet i par une arête.

Une cellule polygonale de n côté a , en moyenne, des angles intérieurs de

$$\frac{n\pi - 2\pi}{n} = \pi \left(1 - \frac{2}{n}\right) . \quad (2.96)$$

Pour $n = 6$ cet angle vaut $\frac{2\pi}{3}$. L'angle est inférieur (supérieur) à $\frac{2\pi}{3}$ si $n < 6$ ($n > 6$). La troisième arête sur chaque sommet est disposée, en moyenne aussi, de manière symétrique par rapport aux deux arêtes qui font partie de la cellule. Tenant compte de cela, la force exercée sur un sommet –le membre de droit de l'équation (2.95)– est égale à

$$f = 1 - 2 \cos \pi \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n}\right) , \quad (2.97)$$

dirigée vers l'extérieur de la cellule. Pour une cellule de moins de 6 côtés cette force est négative : le sommet est poussé vers l'intérieur et la cellule diminue de taille. Pour une cellule de 6 côtés la force s'annule, et elle ne change pas de taille, en moyenne. Le sommet d'une cellule de plus de 6 côtés subit une force vers l'extérieur, et la cellule croît. L'amplitude de la force augmente avec $|n - 6|$, et

s'annule quand $n = 6$. Cela constitue une loi équivalente à la loi de von Neumann, pour le modèle de sommets.

Une autre conséquence géométrique de l'équation (2.96) est que les angles extérieurs d'une cellule de n côtés valent en moyenne

$$\frac{2\pi - \pi \left(1 - \frac{2}{n}\right)}{2} = \pi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{n}\right). \quad (2.98)$$

Mais un angle extérieur d'une cellule est l'angle intérieur d'une cellule voisine. En comparant maintenant l'équation (2.98) avec l'équation (2.96) dans laquelle m_n est mis à la place de n , on trouve une expression pour le nombre moyen de côtés d'une cellule voisine à une cellule de n côtés

$$m_n = \frac{4}{1 - \frac{2}{n}}, \quad (2.99)$$

une forme similaire à la loi d'Aboav.

On s'attend à ce que le système évolue vers un régime d'échelle. Dans ce régime, des quantités comme le nombre total de cellules N ou la longueur moyenne d'une arête \bar{l} se comportent en loi de puissance du temps. De l'équation (2.95) on déduit que dans le régime d'échelle $d\bar{l}/dt \sim 1$ et, par intégration,

$$\bar{l} \sim t. \quad (2.100)$$

Cet exposant n'est pas le même que celui de la croissance normale des grains. La différence est due à notre choix d'un frottement $\gamma = 1$ constant dans le temps. Le frottement est normalement pris proportionnel à \bar{l} , ce qui donne $\bar{l}(d\bar{l}/dt) \sim 1$, et l'exposant habituel de $\frac{1}{2}$. L'aire moyenne \bar{A} , qui est proportionnelle au carré de la longueur moyenne, se comporte en t^2 . Pour un système avec une aire totale constante, l'aire moyenne d'une cellule est donnée par l'aire totale divisée par le nombre de cellules et, par conséquent,

$$N \sim t^{-2}. \quad (2.101)$$

2.5.3 Simulations

Pour les simulations du modèle de sommets nous avons utilisé un rectangle avec des conditions de bord cycliques, afin d'éviter l'influence des bords sur le système. Un autre choix possible est d'introduire des sommets fixes sur le bord, mais dans ce cas, dès que la longueur moyenne des arêtes devient du même ordre de grandeur que la distance moyenne entre les sommets fixes sur le bord, la dynamique s'arrête.

Nous avons utilisé deux méthodes différentes pour engendrer des configurations initiales de structures cellulaires désordonnées :

- (1) On commence avec une structure hexagonale régulière, qui est bien évidemment stable vis à vis de la dynamique du modèle. Cette structure est ensuite

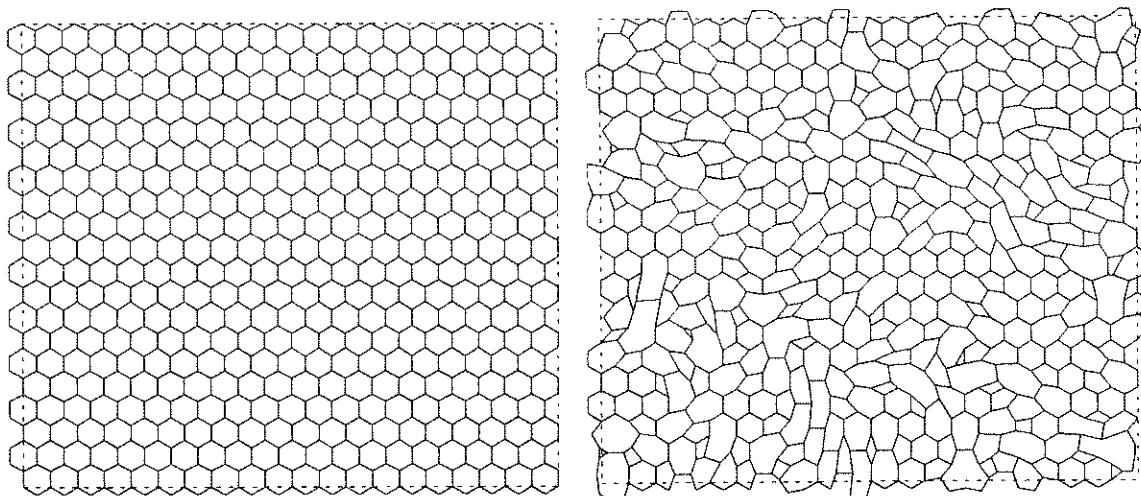


Figure 2.14 : (a) Une structure hexagonale régulière ; (b) une structure hexagonale perturbée par des transformations T_1 au hasard.

perturbée avec des transformations T_1 sur des arêtes choisies au hasard. La figure (2.14) montre (a) une structure hexagonale régulière de 400 points et (b) la structure obtenue par 150 transformations T_1 sur une telle structure ordonnée.

- (2) On fabrique la tessellation de Voronoï des points poissoniens. Nous avons trouvé que de telles structures sont trop inhomogènes : pour un grand nombre de cellules, on peut trouver des arêtes beaucoup plus petites que la longueur moyenne des arêtes. Le pas de temps dans la simulation doit être plus petit que la longueur minimale des arêtes et par conséquent le temps de calcul est très ralenti. Pour homogénéiser le système, les points poissoniens sont ensuite soumis à la dynamique du modèle géométrique des figures de souffle (voir chapitre 1) : à chaque pas d'itération, on cherche les deux points les plus proches et on élimine l'un des deux. Dans la figure (2.15), nous montrons (a) la tessellation de Voronoï de 400 points poissoniens et (b) une tessellation de 400 points résultant de l'application de 400 itérations du modèle géométrique sur 800 points poissoniens.

Les résultats suivants concernent des simulations de systèmes de 40 000 cellules initiales. Pendant la simulation, nous avons suivi l'évolution du nombre total des cellules N , la longueur moyenne des arêtes \bar{l} , et le second moment de la distribution du nombre de côtés des cellules μ_2 .

Nous présentons maintenant les résultats des simulations du modèle avec des configurations initiales obtenues par la méthode (1). La figure (2.16) montre N en fonction du temps en échelle log-log. On voit que cette courbe a asymptotiquement un comportement linéaire avec une pente de -2 , ce que confirme la prédiction de $N \sim t^{-2}$. De la même manière, la figure (2.17) montre, en échelle log-log, \bar{l} en fonction du temps avec une pente de 1 à temps long. Finalement, μ_2 est tracé en fonction du temps dans la figure (2.18). On voit qu'après une montée initiale, μ_2 atteint un plateau d'une valeur de 3.5. Cela signifie que la distribution du

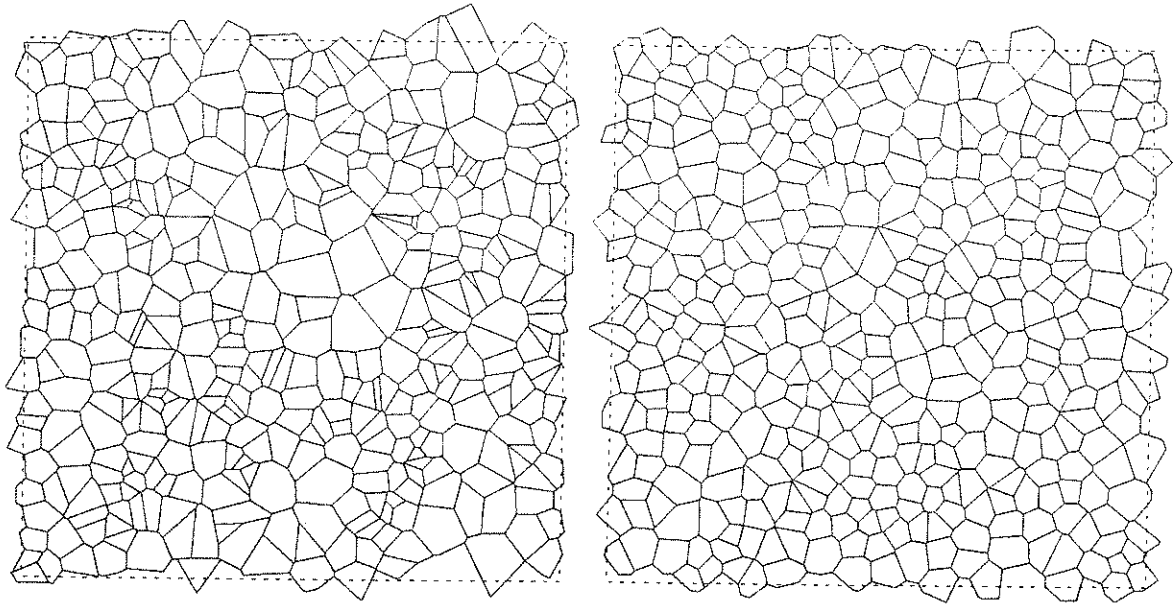


Figure 2.15 : (a) La tessellation de Voronoï des points poissonniens ; (b) la tessellation de Voronoï des points poissonniens soumis à la dynamique du modèle géométrique de figures de souffle.

nombre des côtés est elle aussi constante. L'amplitude des fluctuations autour de la valeur moyenne de μ_2 est dépendante de la taille du système (N) et augmente dans le temps, avec la diminution du nombre de cellules. Le comportement de ces trois quantités met en évidence la présence d'un régime d'échelle dans le système, à temps long. Dans ce régime, le système possède une seule longueur typique et toutes les quantités métriques en dépendent, tandis que les quantités topologiques sont fixes.

La figure (2.19) montre la structure cellulaire à la fin d'une simulation de 40 000 cellules initiales, quand il reste 1 000 points.

Il est intéressant de noter que la situation change radicalement si on introduit un seul défaut, par une transformation T_1 , dans une structure hexagonale ordonnée. Dans ce cas, le système évolue seulement autour du défaut. On voit apparaître un amas de quelques cellules géantes, avec des très grands nombres de côtés, qui grossissent rapidement en dévorant les cellules voisines. Ce phénomène s'appelle la croissance *anormale* des grains [100]. C'est grâce à l'interférence entre les différents défauts dans la structure hexagonale que le système se met à évoluer par la croissance *normale*.

Nous avons simulé aussi des systèmes avec des configurations initiales engendrées avec la méthode (2), afin de vérifier que les propriétés du système dans le régime d'échelle ne dépendent pas des conditions initiales. Nous avons trouvé que c'est bien le cas, et dans la figure (2.20) nous montrons μ_2 en fonction du temps pour une telle simulation. La valeur initiale de μ_2 est différente, ainsi que le comportement transitoire, mais la valeur dans le régime d'échelle est la même.

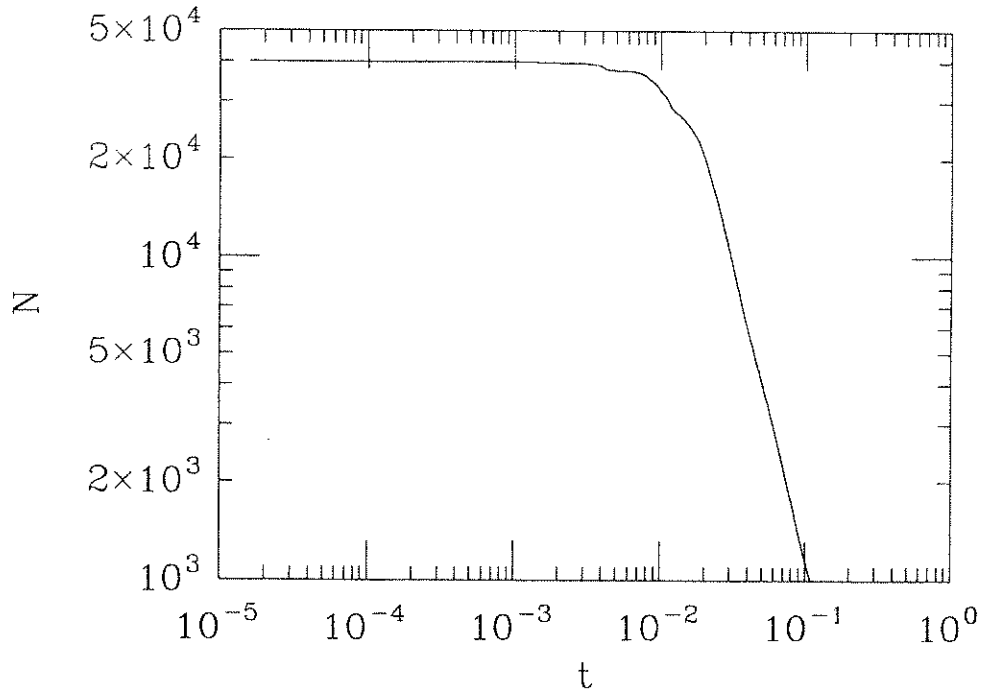


Figure 2.16 : Le nombre total de cellules en fonction du temps. La configuration initiale est hexagonale perturbée.

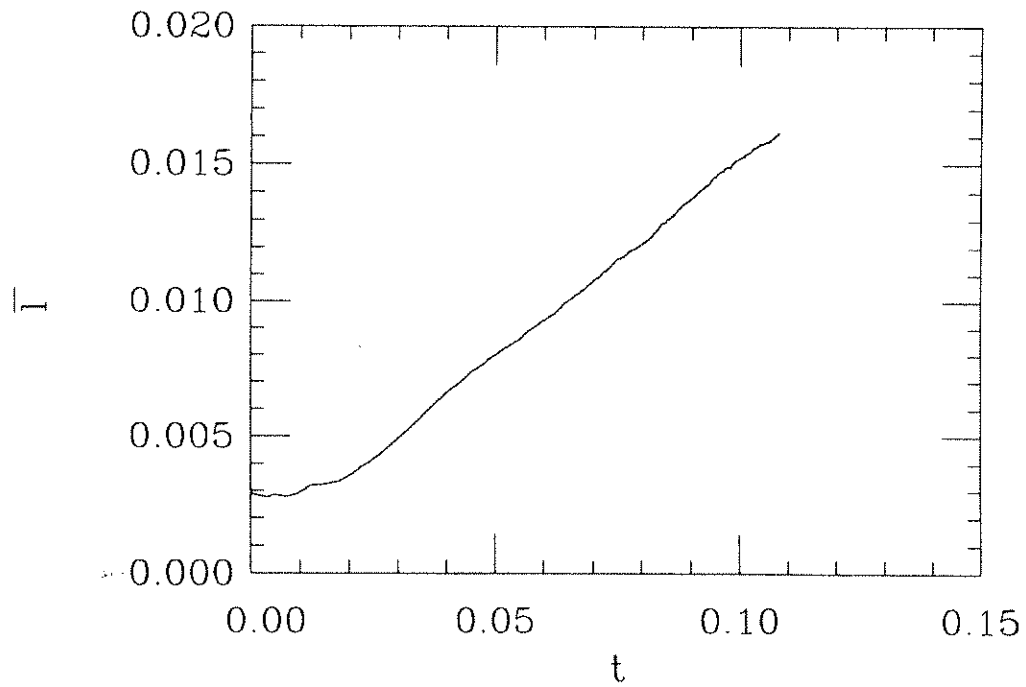


Figure 2.17 : La longueur moyenne des arêtes en fonction du temps.

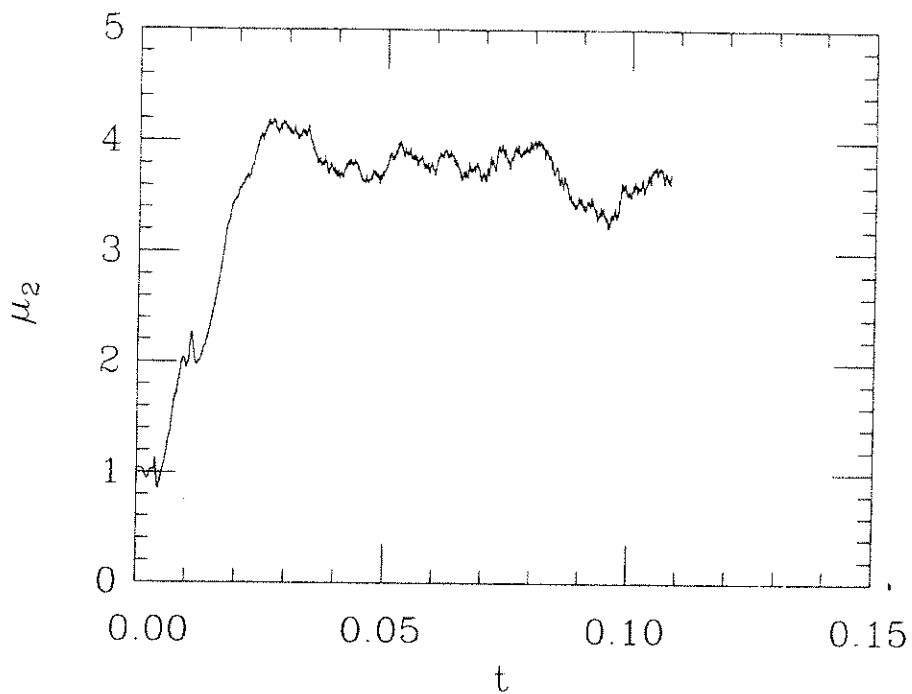


Figure 2.18 : Le deuxième moment de la distribution des topologies des cellules, μ_2 , en fonction du temps.

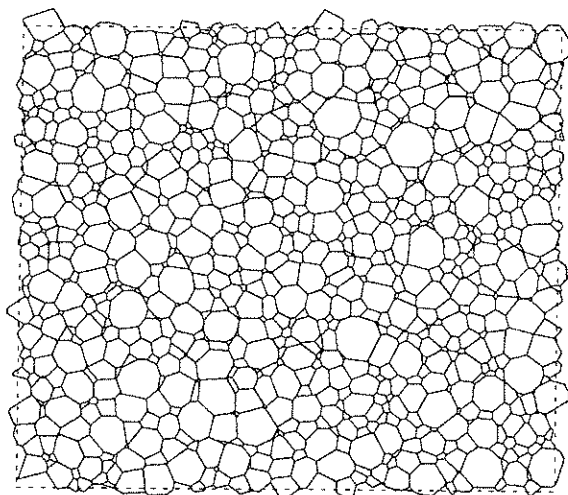


Figure 2.19 : La structure cellulaire à la fin d'une simulation du modèle de sommets, avec 1 000 points restant.

2.5.4 Régime d'échelle

Nous avons vu que le système atteint un régime d'échelle avec une longueur typique \bar{l} , la longueur moyenne des arêtes se comportant comme t . Toutes les autres quantités métriques sont déduites de \bar{l} , et notamment l'aire moyenne des cellules qui se comporte en t^2 . Dans le régime d'échelle, les distributions de différentes quantités métriques restent constantes, à un changement d'échelle près. Nous

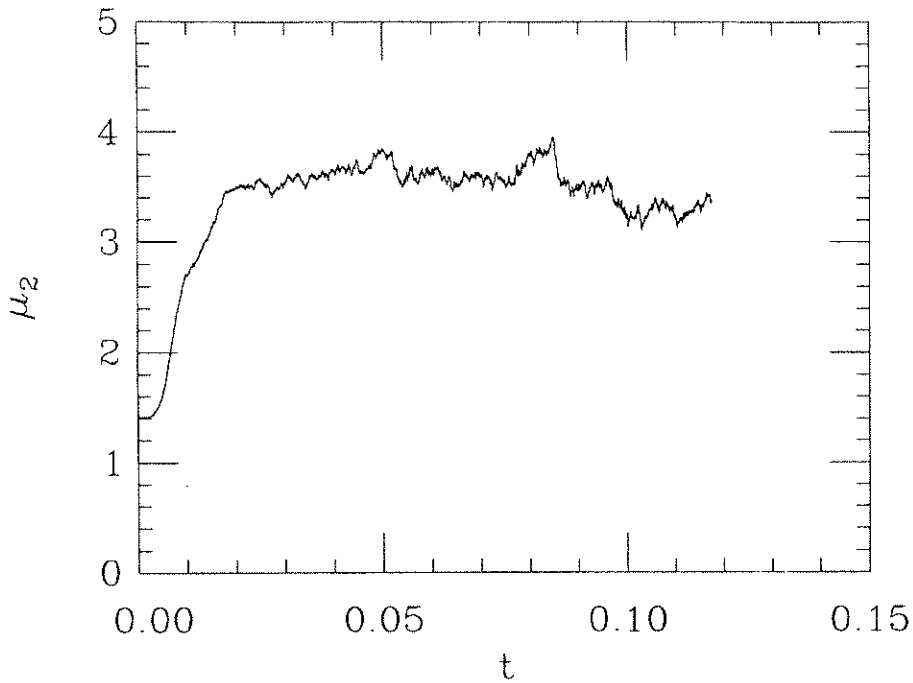


Figure 2.20 : Le deuxième moment de la distribution des topologies des cellules, μ_2 , en fonction du temps, avec comme configuration initiale une tessellation de Voronoï de points poissonniens soumis à la dynamique du modèle géométrique.

avons vérifié que c'est bien le cas, et dans la suite nous présenterons toutes les quantités métriques mises à la même échelle. Pour simplifier les notations, nous allons remplacer chaque variable par la variable mise à l'échelle en la divisant par sa valeur moyenne. Par exemple, nous allons noter par la variable A l'aire divisée par l'aire moyenne \bar{A} .

Dans les figures qui suivent nous allons montrer les courbes de différentes quantités dans le régime d'échelle. A chaque fois, nous avons mesuré ces quantités à 10 instants différents, quand il restait 10000, 9000, ..., 1000 cellules, nous les avons mises à la même échelle, puis nous avons moyenné sur les différents temps.

Dans la figure (2.21) nous avons tracé les distributions des aires de cellules $P(A)$. Nous avons tracé aussi dans cette figure la distribution

$$P(A) = \exp(-A) \quad (2.102)$$

qui est la distribution qu'on attend à partir des arguments d'entropie maximale. On voit que l'accord avec la courbe tirée de la simulation n'est pas très bon. En termes d'entropie maximale, cela veut dire qu'il existe des contraintes supplémentaires sur la distribution des aires.

Dans la figure (2.22) nous présentons les distributions des aires des cellules de nombre de côtés donné $P_n(A)$. Ces courbes ressemblent aux courbes de $P_n(A)$ dans les simulations du modèle de Potts [74-75]. Etant donné que la vitesse de croissance, ou de décroissance, d'une cellule dépend de sa topologie, on voit que l'aire moyenne d'une cellule de topologie n croît avec n . De plus, on voit que

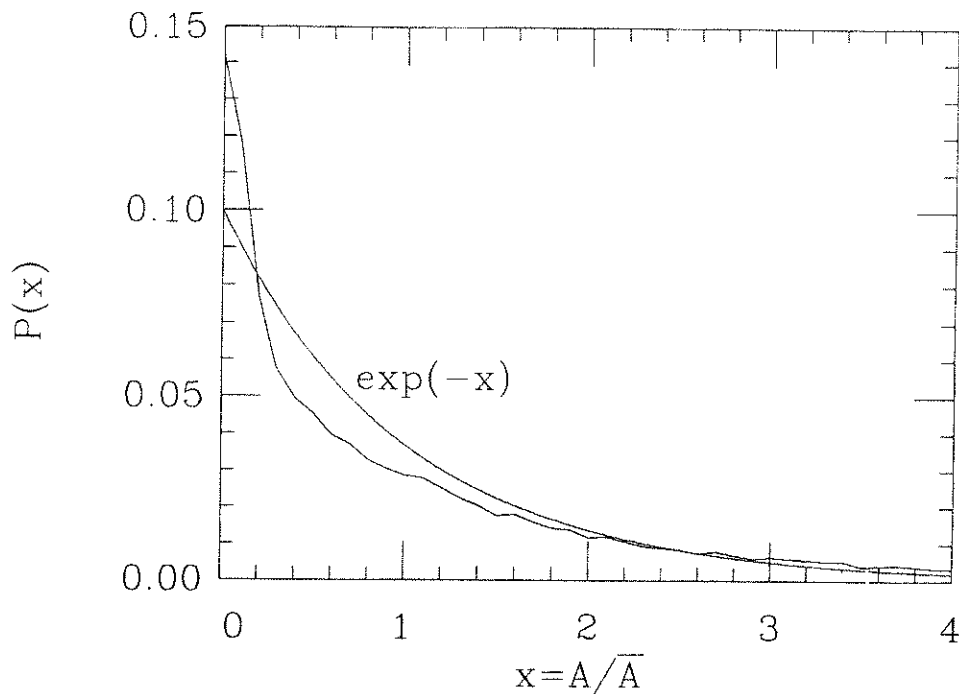


Figure 2.21 : La distribution des aires des cellules dans le régime d'échelle, comparée avec la distribution exponentielle.

$P_n(0) > 0$ seulement pour $n \leq 5$, parce que ce sont les cellules de moins de 6 côtés qui décroissent, et disparaissent à la longue.

La loi de Lewis exprime que l'aire moyenne des cellules de n côtés, \bar{A}_n divisée par \bar{A} est linéaire en n . La courbe de \bar{A}_n dans la figure (2.23) montre que cette loi empirique ne s'applique pas au modèle de sommets. La loi de Lewis est fortement liée à la loi de von Neumann. Puisque cette dernière n'est pas valable pour le modèle de sommets où le taux de croissance de l'aire A d'une cellule de n côtés dépend de façon compliquée de A et de n ainsi que de la forme de la cellule, on ne s'attend pas vraiment à trouver la loi de Lewis vérifiée. De la même façon, la loi de Desch, qui prévoit une dépendance linéaire en n du périmètre moyen d'une cellule de topologie n , est loin d'être applicable au modèle de sommets (voir figure (2.24)).

La distribution du nombre des côtés des cellules P_n est constante dans le régime d'échelle. Cette distribution est représentée dans la figure (2.25), et elle ressemble aux distributions trouvées dans plusieurs autres structures cellulaires. Apparemment, cette forme générique de P_n est due aux contraintes de normalisation, de nombre moyen des côtés égal à 6, et du fait que les cellules de moins de 6 côtés ont tendance à disparaître. Les variations entre les distributions trouvées dans des systèmes différents sont dues aux détails précis de leur propre dynamique.

Selon la loi d'Aboav, le nombre moyen des côtés des cellules voisines d'une cellule de n côtés, m_n , est linéaire en $1/n$. Dans la figure (2.26) nous présentons

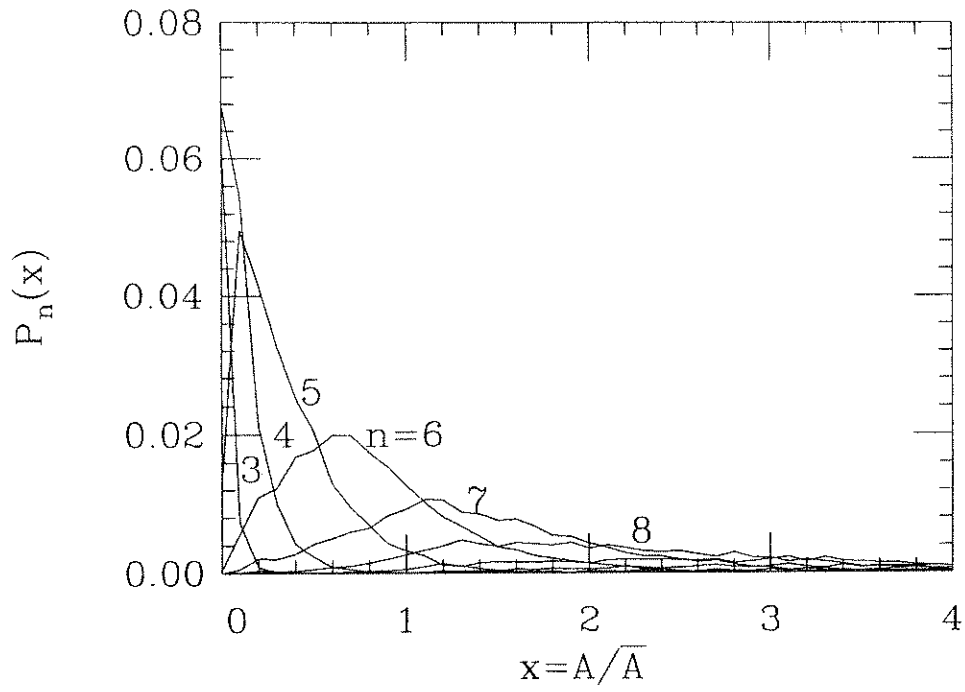


Figure 2.22 : Les distributions des aires de cellules de topologie n donnée, pour différentes valeurs de n .

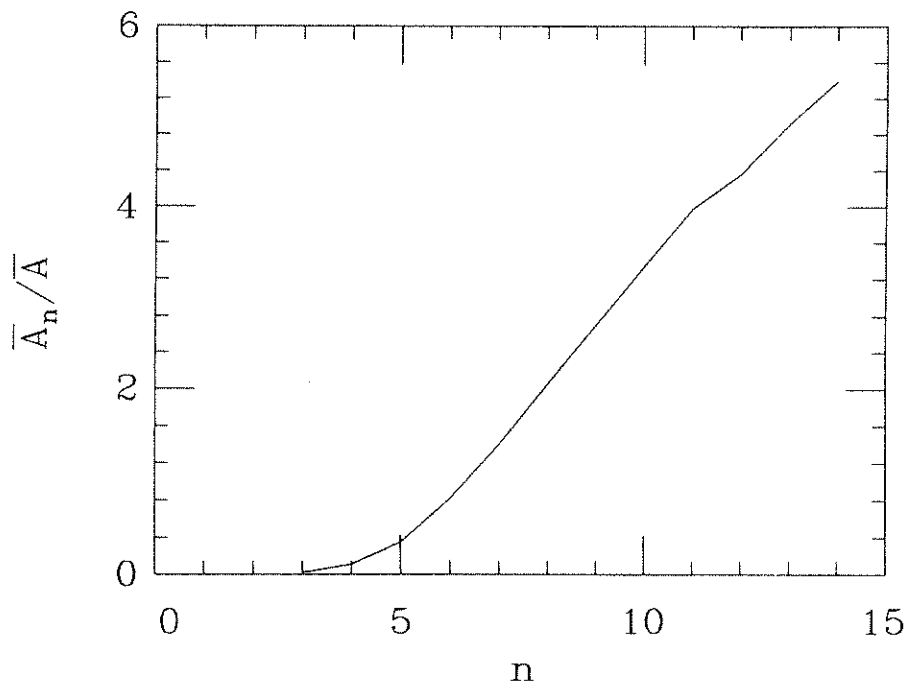


Figure 2.23 : L'aire moyenne de cellules de topologie n , divisée par l'aire moyenne de toutes les cellules, en fonction de n .

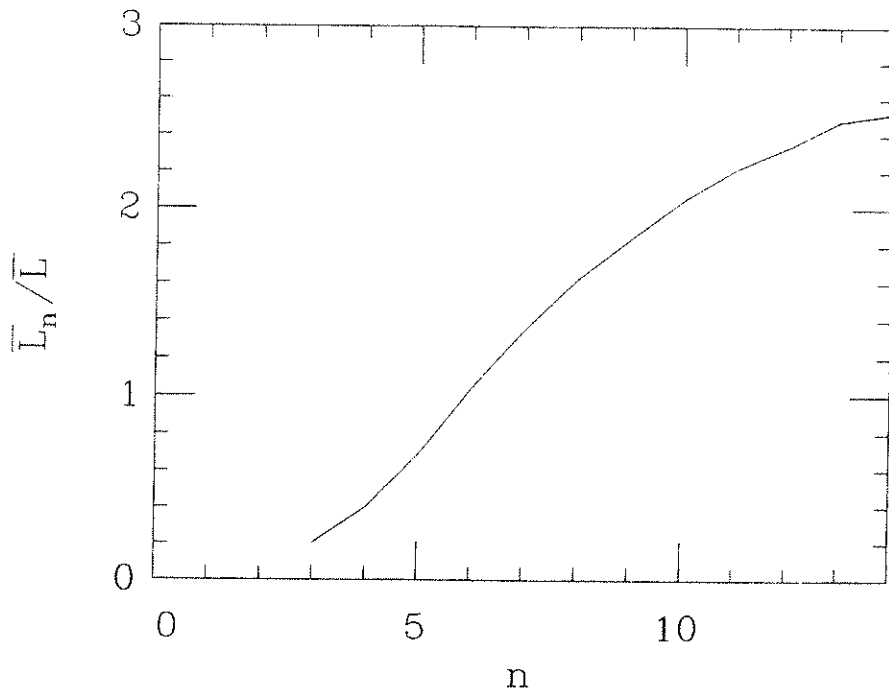


Figure 2.24 : Le périmètre moyen de cellules de topologie n , divisée par le périmètre moyen de toutes les cellules, en fonction de n .

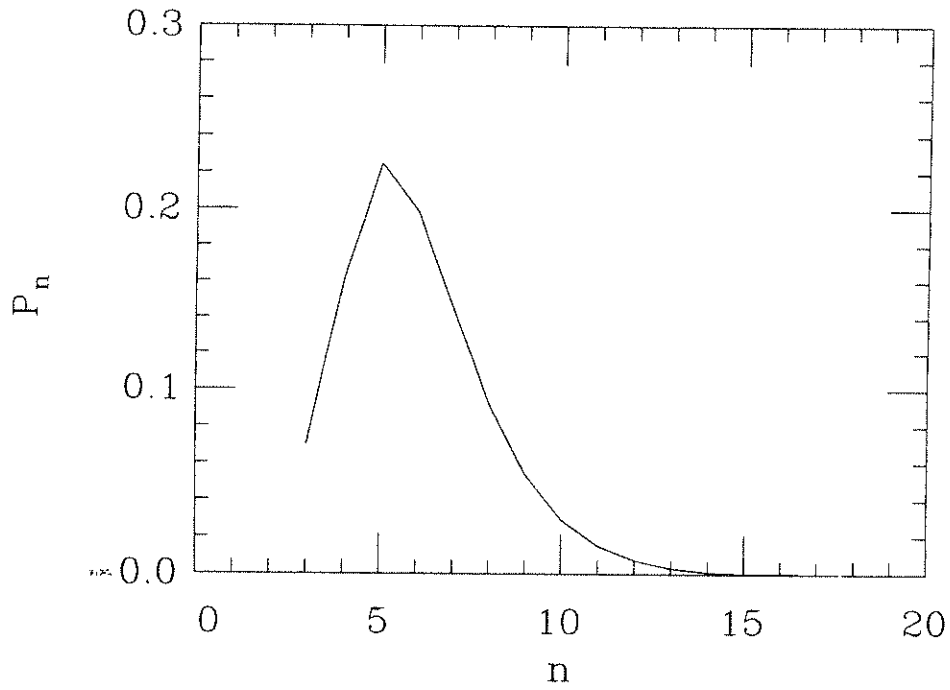


Figure 2.25 : La distribution de nombres de côtés des cellules.

nm_n , en fonction de n . Cette courbe est presque linéaire, avec une valeur approximative de $a = 0.8$, mais on y voit clairement des déviations par rapport à la linéarité supérieures aux fluctuations statistiques.

Une mesure plus détaillée des corrélations est donnée par Q_{nl} , la distribution de cellules voisines de topologies n et l respectivement. Dans la figure (2.27), nous avons tracé $Q_{nl}/(P_n P_l)$ en fonction de l pour différentes valeurs de n , dans le régime d'échelle. Ces courbes ne sont pas linéaires en n . L'hypothèse de Peshkin et al. [61] semble ne pas être applicable au modèle de sommets. D'ailleurs, m_n est toujours supérieur à 6.

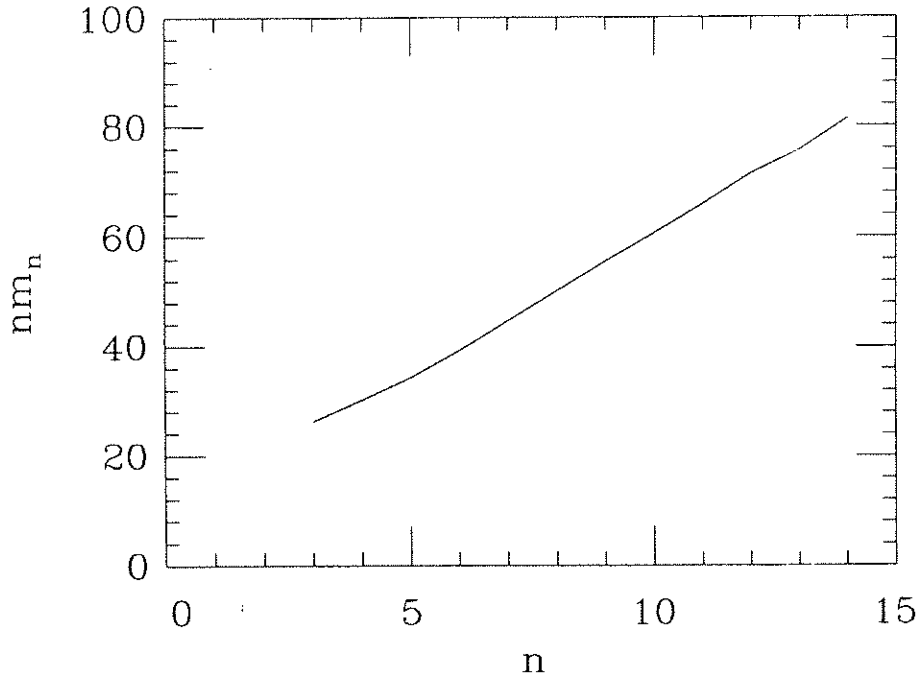


Figure 2.26 : m_n , la topologie moyenne de cellules voisines d'une cellule de topologie n , multipliée par n .

Dans les expériences sur les mousses de savon, il a été constaté qu'on observe rarement des transformations T_1 . Les cellules de 4 et 5 côtés disparaissent directement sans passer par des transformations T_1 suivies d'une transformation T_2 . Dans les simulations du modèle de sommets, par contre, la disparition de telles cellules intervient par des transformation T_1 , une pour un quadrilatère ou deux pour un pentagone, suivie(s) d'une transformation T_2 . Mais il est possible que cette séquence soit si rapide qu'effectivement les quadrilatères et les pentagones disparaissent immédiatement, comme dans la mousse de savon.

Pour clarifier ce point, nous avons mesuré la durée de vie de différentes configurations qui interviennent dans la disparition des cellules, notamment le temps entre :

- (1) la création d'un triangle par une transformation T_1 sur une arête qui se trouve

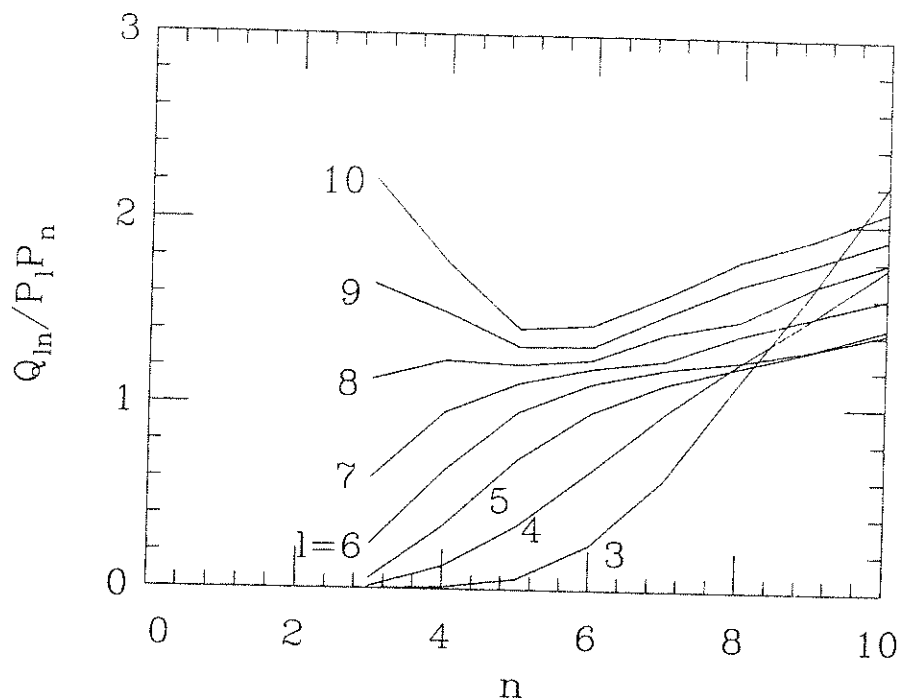


Figure 2.27 : La distribution des cellules voisines de topologies n et l respectivement, en fonction de n , pour différentes valeurs de l .

- entre un quadrilatère et une cellule de plus grande aire, et sa disparition par une transformation T_2 (figure (2.28a)),
- (2) la création d'un triangle par une transformation T_1 sur une arête qui se trouve entre un quadrilatère et une cellule de plus petite aire, et sa disparition par une transformation T_2 (figure (2.28b)),
 - (3) la création d'un triangle par une transformation T_2 sur un triangle voisin d'un quadrilatère, et sa disparition par une deuxième transformation T_2 (figure (2.28c)),
 - (4) la création d'un quadrilatère par une transformation T_1 sur une arête qui se trouve entre un pentagone voisin d'une cellule de plus grande aire, et sa disparition (figure (2.28d)).

Nous n'avons pas trouvé de transformations T_1 sur des arêtes qui se trouvent entre des pentagones et des cellules de plus grande aire.

Les durées de vie de ces suites de transformations ont été mesurées pendant une période dans le régime d'échelle, et les résultats sont résumés dans le tableau (2.1). Le temps est mesuré en pas d'itération de la dynamique.

La suite des transformations (1) est le mode supposé de disparition directe d'un quadrilatère : un petit quadrilatère se transforme en petit triangle qui, à son tour, disparaît rapidement. Les suites (2) et (3) par contre, vont produire des triangles relativement grands. La durée de vie moyenne d'une suite (1) est du même ordre de grandeur que celle des suites (2) et (3). La durée de vie des quadrilatères

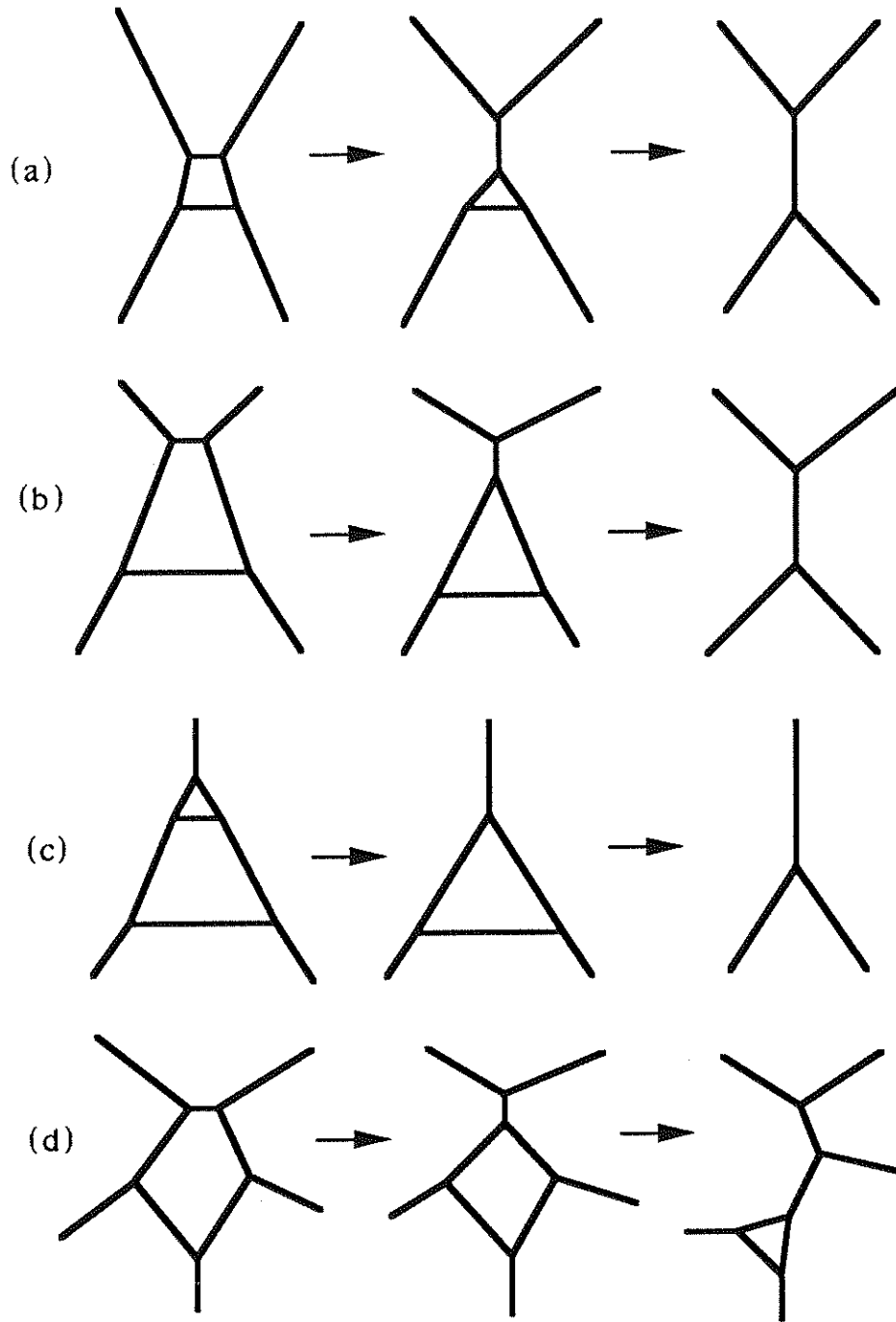


Figure 2.28 : Configurations menant à la disparition de cellules.

créés par des transformations T_1 sur des pentagones est aussi du même ordre de grandeur. La conclusion est que les quadrilatères et les pentagones ne disparaissent pas dans des suites rapides de transformations T_1 et T_2 , et on peut considérer ces transformations comme des événements distincts.

Nous avons étudié en détail les modifications topologiques du système pendant son évolution. Chaque fois qu'une transformation topologique était effectuée, nous

configuration	fréquence	durée de vie moyenne
(1)	1260	154
(2)	213	509
(3)	30	286
(4)	295	342

Tableau 2.1 : La durée de vie des configurations menant à la disparition de cellules

avons enregistré les topologies (nombres de côtés) des cellules qui y ont participé. Dans une transformation T_2 , on élimine un triangle entouré de trois autres cellules. Nous avons calculé :

- N_{T_2} , le nombre total de transformations T_2 ,
- $N_{T_2:n}$, le nombre de transformations T_2 avec une cellule de topologie n à côté du triangle, pour différentes valeurs de n .

Une transformation T_1 s'effectue sur une arête entre deux cellules. Nous avons distingué ces deux cellules par leurs aires : la cellule principale avec l'aire la plus petite des deux, de topologie n_1 , et la cellule secondaire de topologie n_2 . Les topologies des deux autres cellules qui participent à la transformation étaient notées par n_3 . Nous avons calculé :

- N_{T_1} , le nombre total de transformations T_1 ,
- $N_{T_1:n_1}$, le nombre de transformations T_1 avec une cellule principale de topologie n_1 , pour $n_1 = 4, 5$ et pour $n_1 \geq 6$.
- $N_{T_1:4,n_2}$, le nombre de transformations T_1 avec une cellule principale de topologie $n_1 = 4$ et une cellule secondaire de topologie n_2 , pour différentes valeurs de n_2 .
- $N_{T_1:5,n_2}$, le nombre de transformations T_1 avec une cellule principale de topologie $n_1 = 5$ et une cellule secondaire de topologie n_2 , pour différentes valeurs de n_2 .
- $N_{T_1:n_3}$, le nombre de transformations T_1 avec une cellule tertiaire de topologie n_3 , pour différentes valeurs de n_3 .

Tous ces nombres se comportent dans le régime d'échelle comme $A - Bt^{-2}$, et évidemment

$$N_{T_2} = N(t = 0) - N(t) . \quad (2.103)$$

Nous avons ensuite calculé la fréquence relative de chaque type de transformation

$$f_{(\dots)} = \frac{dN_{(\dots)}}{dt} \bigg/ \frac{dN(t)}{dt} . \quad (2.104)$$

Nous avons trouvé les résultats suivants :

$$\begin{aligned}
 f_{T_2} &\simeq 1 \text{ (par définition)} \\
 f_{T_1} &\simeq 1.09 \\
 f_{T_1:n_1=4} &\simeq 0.82 \\
 f_{T_1:n_1=5} &\simeq 0.25 \\
 f_{T_1:n_1 \geq 6} &\simeq 0.005
 \end{aligned}$$

Les transformations T_1 sont un peu plus fréquentes que les transformations T_2 . Les transformations T_1 avec une cellule principale de topologie 4 représentent à peu près les trois quarts de ces transformations. Les transformations T_1 avec une cellule principale de topologie supérieure à 5 sont très rares, voire négligeables. Cela veut dire que le rôle principal des transformations T_1 est de contribuer aussi à la disparition de cellules.

Dans la figure (2.29a) nous avons tracé $f_{T_1:n_1=4,n_2}$ en fonction de n_2 . La valeur moyenne de n_2 est 5.6, significativement inférieure à la topologie moyenne d'une cellule voisine à un quadrilatère, $m_4 = 7.5$. Cette valeur de 5.6 est plus proche de la topologie moyenne de toutes les cellules dans l'ensemble, $\langle n \rangle = 6$. La figure (2.29b) montre $f_{T_1:n_1=5,n_2}$ en fonction de n_2 . Là aussi, on trouve une valeur moyenne de n_2 de 5.3 inférieure à $m_5 = 6.9$. La courbe de $f_{T_1:n_3}$ est tracée dans la figure (2.29c) en fonction de n_3 . La valeur moyenne de n_3 est 7.7, très proche de m_4 . Dans la figure (2.29d), nous montrons $f_{T_2:n}$ en fonction de n . La valeur moyenne de n vaut 8.3, la même valeur que m_3 . Ce dernier résultat est dû au fait que, presque toujours, un triangle est éliminé par une transformation T_2 avant qu'il puisse être modifié par une transformation T_1 qui le transforme en un quadrilatère. Par conséquent, les corrélations topologiques des triangles qui subissent des transformations T_2 sont semblables aux corrélations de tous les triangles.

On peut maintenant comprendre le succès des théories de champ moyen (qu'on va étudier dans la suite) à décrire certains cas de croissance de domaines. Les propriétés métriques du système font que les corrélations entre les topologies des cellules voisines dans une transformation T_1 sont différentes des corrélations entre des cellules des mêmes topologies dans l'ensemble. Le découplage des probabilités jointes des topologies voisines dans ces théories s'avère un choix très astucieux, pas seulement utile.

Le modèle de sommets a l'avantage d'être d'une simplicité exceptionnelle. Il est très facile à simuler, avec des temps de calcul relativement courts. On peut faire des simulations sur des systèmes très grands, pour avoir une bonne statistique. Par contre le modèle de sommets n'évolue pas selon la loi de von Neumann-Mullins. Son comportement devient plus complexe, notamment dans le régime d'échelle.

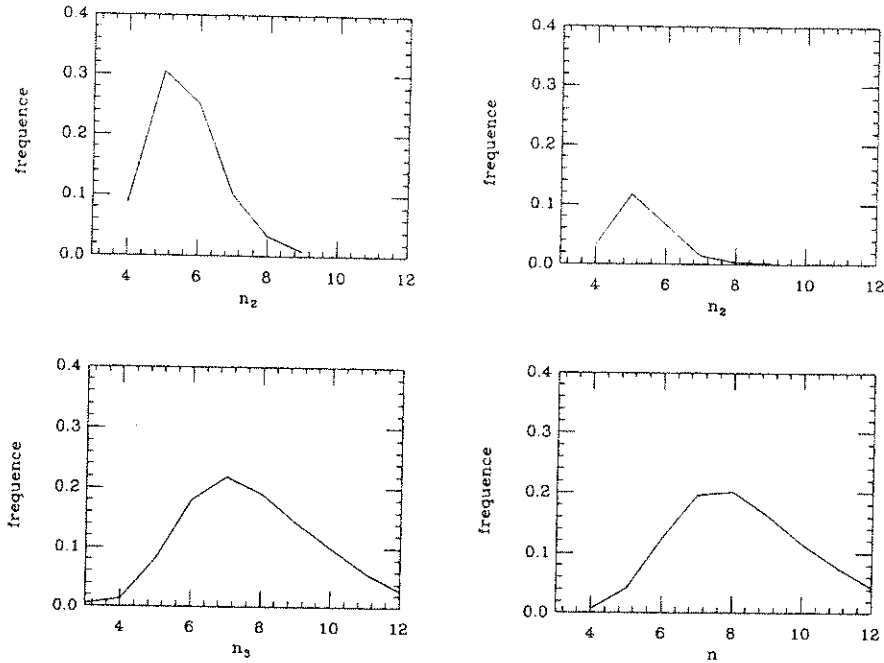


Figure 2.29 : La fréquence d'apparition des cellules de topologie n dans les configurations suivantes : (a) la cellule secondaire dans une transformation T_1 avec une cellule principale de topologie 4, (b) la cellule secondaire dans une transformation T_1 avec une cellule principale de topologie 5, (c) la cellule tertiaire dans une transformation T_1 , (d) la cellule à côté d'un triangle dans une transformation T_2 .

2.6 Modèles simplifiés de la croissance de domaines

2.6.1 Modèle topologique

Nous avons vu que la simulation des modèles précédents était relativement compliquée. Pourtant, l'évolution macroscopique d'un grain polycristallin est extrêmement simple, indépendante de la forme ou de la taille de la cellule. Fradkov et al. [101-102] et Beenakker [103] ont eu l'idée de négliger les formes des cellules. De la structure cellulaire, ils ont retenu seulement le réseau de Delauney correspondant et les aires des cellules.

Le modèle consiste en un réseau de Delauney avec une variable continue A_i placée sur chaque site du réseau. Les aires A_i évoluent selon la loi de Mullins-von Neumann

$$\frac{dA_i}{dt} = \lambda(n_i - 6) \quad (2.105)$$

où n_i est la valence du site i . Quand une aire A_i atteint la valeur 0 (sur un site de valence $n_i < 6$), le site est éliminé. La disparition d'un site est accompagnée de modifications de la connectivité des sites voisins, afin de conserver une valence moyenne égale à 6 (voir figure (2.30)).

Puisqu'on n'a pas d'information sur les formes des cellules, on suppose qu'une cellule de 4 (5) côtés disparaît immédiatement, sans subir d'abord une (deux)

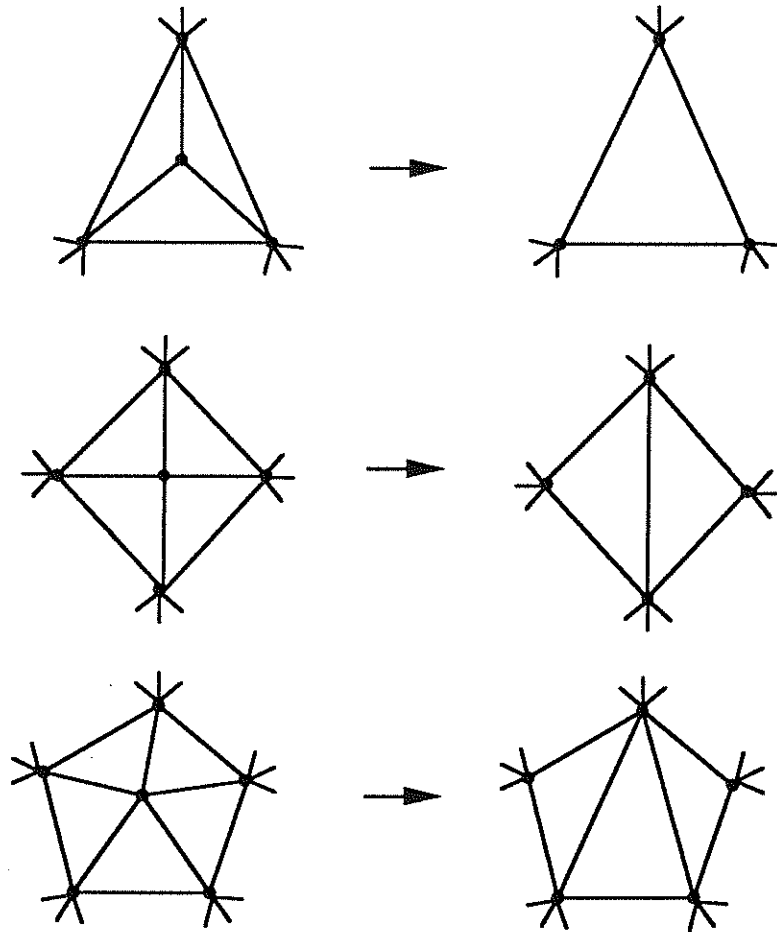


Figure 2.30 : Elimination de sites de valence $n = 3, 4, 5$.

transformation(s) T_1 et ensuite une transformation T_2 . Ainsi, l'élimination d'un site de valence 3 (qui représente une cellule triangulaire) entraîne la diminution de la valence de chacun de ses voisins de 1. Quand un site de valence 4 disparaît, la valence de deux de ses voisins diminue de 1. Quand c'est un site de valence 5 qui disparaît, la valence d'un de ses voisins augmente de 1, tandis que la valence de deux autres diminue de 1. Dans les deux derniers cas, il y a plusieurs façons de modifier la connectivité des voisins ; le choix entre les différentes possibilités est fait au hasard avec probabilités égales. Dans un modèle déterministe, c'est la forme de la cellule qui détermine la modification topologique de la structure. La perte de l'information sur les formes des cellules est compensée par un élément aléatoire dans la dynamique du modèle simplifié.

La dynamique du modèle l'amène vers un régime d'échelle où la distribution des aires est constante, à part le changement d'échelle, et où les propriétés statistiques du réseau sont stables.

2.6.2 Théories de champ moyen

Une structure cellulaire est un système hautement corrélé du point de vue topologique. Une modification de la topologie d'une cellule a des conséquences sur les topologies des cellules voisines. Une description globale de l'évolution d'une structure cellulaire doit tenir compte de ces corrélations. Par exemple, dans une structure cellulaire qui évolue par la croissance normale de grains, la probabilité $P_n(A; t)$ de trouver une cellule de topologie n et d'aire A à temps t va dépendre de la probabilité conjointe $Q_{3, n+1}(0, A; t)$ de trouver une cellule de topologie 3 et d'aire 0 à côté d'une cellule de topologie $n+1$ et d'aire A , puisque la disparition de la première va transformer la seconde en une cellule de topologie n et d'aire A . A son tour la probabilité $Q_{n, l}(A, A'; t)$ dépendra d'une probabilité jointe de trois cellules, etc. Pour donner une description complète de l'évolution de la structure, il faut écrire une hiérarchie d'équations pour l'évolution des probabilités conjointes de k cellules voisines.

Une façon de surmonter cette complication est de découpler les probabilités conjointes. De manière imagée, on découpe les cellules d'une structure cellulaire et on les met dans un sac. Les transformations topologiques élémentaires sont locales, agissant sur un nombre fini de cellules. Pour effectuer une transformation T_1 , on choisit au hasard, avec une probabilité qui reste à définir, quatre cellules. De ces quatre cellules, deux perdent un côté, et les deux autres en gagnent un, et elles sont toutes remises dans le sac. Pour effectuer une transformation T_2 , on choisit au hasard une cellule de 3 côtés et trois autres cellules. La première est éliminée, tandis que les trois autres perdent chacune un côté, et elles sont remises dans le sac.

Dans le premier modèle que nous allons décrire, chaque cellule est caractérisée par sa topologie et par son aire. L'aire de chaque cellule évolue selon la loi de von Neumann. Pour sortir une cellule du sac, on choisit au hasard un bord d'une cellule. Si $P_n(A)$ est la fraction de cellules de topologie n et d'aire A , alors la probabilité de choisir une telle cellule est $nP_n(A)/6$. Ce choix de probabilité est dû au fait que la somme sur l de la probabilité conjointe Q_{nl} est égale à $nP_n/6$ (voir équation (2.11)). La probabilité de choisir deux cellules avec, respectivement, n et l côtés, et des aires A et A' est

$$Q_{nl}(A, A'; t) = \frac{nl}{36} P_n(A; t) P_l(A'; t) . \quad (2.106)$$

Quand l'aire d'une cellule de n côtés devient nulle, on sort cette cellule du sac. On choisit n autres cellules au hasard, qu'on met autour de la cellule d'aire 0, et on élimine la cellule par une suite de transformations topologiques. Fradkov et al. [104-105] et Flyvbjerg et Jeppesen [106] ont effectué des simulations Monte-Carlo de ce modèle.

Ces derniers auteurs, aussi bien que Marder [107] et Beenakker [108], ont étudié des équations d'évolution de la probabilité $P_n(A; t)$ dans cette approximation. Quels facteurs entrent dans l'équation d'évolution de la

distribution $P_n(A;t)$? D'abord, il y a un terme dû à l'évolution des aires des cellules selon la loi de von Neumann

$$\frac{\partial P_n(A;t)}{\partial A} \frac{dA}{dt} = \lambda(n-6) \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial A}. \quad (2.107)$$

Ensuite, il faut rendre compte des cellules de topologie inférieure à 6 qui disparaissent. La fraction de cellules de topologie n qui disparaissent au temps t est

$$\lambda(n-6) \int_0^\infty dA \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial A} = \lambda(6-n)P_n(0;t), \quad (2.108)$$

non nulle pour $n < 6$. Ce terme garantit la normalisation de la distribution. Finalement, il y a des changements de topologie des cellules par des transformations topologiques. Une cellule peut perdre un côté si elle est voisine d'une cellule de topologie 3, 4 ou 5 qui disparaît; elle peut gagner un côté si elle est voisine d'une cellule de topologie 5 qui disparaît. L'équation d'évolution de la probabilité $P_n(A;t)$ est donnée par

$$\frac{\partial P_3(A;t)}{\partial t} - 3\lambda \frac{\partial P_3(A;t)}{\partial A} - c_0 P_3(A;t) = (c_1 + c_2)4P_4(A;t) - c_2 3P_3(A;t) \quad (2.109a)$$

pour $n = 3$, et pour $n \geq 4$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial t} + \lambda(n-6) \frac{\partial P_n(A;t)}{\partial A} - c_0 P_n(A;t) \\ &= (c_1 + c_2)(n+1)P_{n+1}(A;t) - (c_1 + 2c_2)nP_n(A;t) + c_2(n-1)P_{n-1}(A;t) \end{aligned} \quad (2.109b)$$

avec la définition des préfacteurs

$$c_0 = \lambda \sum_{k=3}^5 (6-k)P_k(0;t) \quad (2.110)$$

$$c_1 = \frac{1}{6} \lambda \sum_{k=3}^5 (6-k)^2 P_k(0;t) \quad (2.111)$$

$$c_2 = \frac{1}{6} \lambda P_5(0;t). \quad (2.112)$$

La forme différente pour $n = 3$ vient du fait qu'on interdit l'existence des cellules de 2 côtés. Le facteur c_0 est la fraction de cellules qui disparaissent, $c_1 + c_2$ est la probabilité que la topologie d'une cellule diminue de 1, et c_2 est la probabilité que la topologie d'une cellule augmente de 1.

En examinant l'équation, on s'aperçoit que c_1 est le préfacteur d'une dérivée en différences finies d'ordre 1 en n de la quantité $nP_n(A;t)$, tandis que c_2 est le préfacteur d'une dérivée d'ordre 2. Les transitions entre topologies –le membre de droite de l'équation– constituent un terme de diffusion et un terme de dérive

vers n petit. Nous n'avons pas considéré des cellules de topologie 2 car, quand une telle cellule disparaît, chacune des ces voisines perd 2 côtés ; cela aurait ajouté des dérivées d'ordre 3 à l'équation.

L'équation (2.109) est une équation différentielle partielle avec des conditions initiales $P_n(A; 0)$. La dépendance des termes c_0 , c_1 et c_2 en $P_n(0; t)$ fait qu'elle est non linéaire et non locale. Cette équation possède un point fixe

$$P_n(A) = P(A)\delta_{n6} \quad (2.113)$$

qui correspond à une structure cellulaire hexagonale (pas nécessairement régulière). C'est un point fixe instable par rapport à des perturbations topologiques : l'introduction d'un seul défaut topologique (un pentagone et un heptagone) fait que le système s'éloigne du point fixe.

L'équation (2.109) peut être, en principe, intégrée numériquement dans le temps. En pratique, c'est très difficile, à cause d'une instabilité numérique de l'équation. Le nombre moyen de côtés des cellules évolue selon l'équation

$$\frac{d}{dt}\bar{n} = \frac{d}{dt} \sum_n n \int dA P_n(A; t) = c_1(\bar{n} - 6). \quad (2.114)$$

Des fluctuations dues à des erreurs de troncature de l'ordinateur sont accentuées, et le calcul n'est plus correct.

Une solution analytique de l'équation n'existe pas, mais il est possible de calculer les points fixes de l'équation dans certains cas. Puisque l'on s'attend à ce que le système tende vers un régime d'échelle, on introduit une distribution $f_n(x)$ de la variable $x = A/\bar{A}$ définie par

$$P_n(A; t) = \frac{1}{\bar{A}(t)} f_n\left(\frac{A}{\bar{A}(t)}\right). \quad (2.115)$$

En insérant la forme (2.115) dans l'équation (2.109) on trouve une équation différentielle pour la distribution $f_n(x)$

$$\left[(n - 6 - \tilde{c}_0 x) \frac{d}{dx} - 2\tilde{c}_0 \right] f_n(x) = (\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2) 4f_4(x) - \tilde{c}_2 3f_3(x) \quad (2.116a)$$

pour $n = 3$, et pour $n \geq 4$

$$\begin{aligned} & \left[(n - 6 - \tilde{c}_0 x) \frac{d}{dx} - 2\tilde{c}_0 \right] f_n(x) \\ & = (\tilde{c}_1 + \tilde{c}_2)(n + 1)f_{n+1}(x) - (\tilde{c}_1 + 2\tilde{c}_2)n f_n(x) + \tilde{c}_2(n - 1)f_{n-1}(x). \end{aligned} \quad (2.116b)$$

où on a redéfini

$$\tilde{c}_0 = \sum_{k=3}^5 (6 - k) f_k(0) \quad (2.117)$$

$$\tilde{c}_1 = \frac{1}{6} \sum_{k=3}^5 (6 - k)^2 f_k(0) \quad (2.118)$$

$$\tilde{c}_2 = \frac{1}{6} f_5(0). \quad (2.119)$$

On continue en définissant la fonction génératrice

$$f(x, y) = \sum_{n=3}^{\infty} y^n f_n(x) . \quad (2.120)$$

Inversement, on retrouve les distributions $f_n(x)$ à partir de $f(x, y)$ par la relation

$$f_n(x) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} f(x, y) \Big|_{y=0} . \quad (2.121)$$

La fonction $f(x, y)$, définie pour $x \geq 0$ et $0 \leq y \leq 1$, obéit à l'équation différentielle

$$\begin{aligned} \left[2\tilde{c}_0 + (\tilde{c}_0 x + 6) \frac{\partial}{\partial x} + \{(\tilde{c}_1(1-y) + \tilde{c}_2)(1-y)^2\} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right] f(x, y) \\ = 3\tilde{c}_2 y^2 (1-y) f_3(x) . \end{aligned} \quad (2.122)$$

Bien que cette équation soit encore non linéaire et non locale, on peut essayer de la résoudre comme si les facteurs \tilde{c}_0 , \tilde{c}_1 et \tilde{c}_2 étaient des constantes et $f_3(x)$ une fonction connue, en demandant à la fin que la solution vérifie les relations (2.117-119) et que $f_3(x)$ soit donnée par (2.121) avec $n = 3$.

Il faut rappeler qu'en utilisant la forme (2.115), on a perdu les conditions initiales de l'équation, et pour que la solution soit unique, il faut fournir des conditions de bord. On peut, par exemple, donner les conditions de bord pour $y = 1$

$$f(x, 1) = \sum_{n=3}^{\infty} f_n(x) = f(x) \quad (2.123)$$

qui n'est rien d'autre que la distribution des aires de toutes les cellules. Le choix évident est de prendre $f(x) = \exp(-x)$, la distribution d'entropie maximale, qui décrit relativement bien la distribution d'aires des cellules dans la croissance normale [43, 47, 74-75]. Le deuxième condition de bord est $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x, y) = 0$. Pour plus de détails sur la solution de l'équation (2.122), voir la référence [106].

Si on prend la limite $y \rightarrow 1$ dans l'équation (2.122), on trouve une équation différentielle pour $f(x)$

$$\frac{d}{dx} [\bar{n}(x) f(x)] = 6f'(x) + \tilde{c}_0 [x f'(x) + 2f(x)] \quad (2.124)$$

où $\bar{n}(x)$ est la topologie moyenne des cellules d'aire $x = A/\bar{A}$, définie par

$$\bar{n}(x) = \sum_{n=3}^{\infty} n f_n(x) / f(x) . \quad (2.125)$$

Si on suppose que la distribution d'aires de cellules prend la forme d'entropie maximale $f(x) = \exp(-x)$, alors la solution de (2.126) donne $\bar{n}(x)$ linéaire en x

$$\bar{n}(x) = 6 + (x-1)\tilde{c}_0 . \quad (2.126)$$

Cette relation ressemble à la loi de Lewis, qui dit que l'aire moyenne des cellules de n côtés est linéaire en n . Mais il faut rappeler que la distribution $f(x) = \exp(-x)$ correspond à \bar{A}_n indépendante de n .

Si on intègre l'équation (2.109) sur A de zéro à l'infini, on trouve une équation pour l'évolution de la distribution $P_n(t) = \int dA P_n(A; t)$

$$\frac{dP_3(t)}{dt} + 3\lambda P_3(0; t) - c_0 P_3(t) = (c_1 + c_2)4P_4(t) - c_2 3P_3(t) \quad (2.127a)$$

pour $n = 3$, et pour $n \geq 4$

$$\begin{aligned} & \frac{dP_n(t)}{dt} - \lambda(n-6)P_n(0; t) - c_0 P_n(t) \\ &= (c_1 + c_2)(n+1)P_{n+1}(t) - (c_1 + 2c_2)nP_n(t) + c_2(n-1)P_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (2.127b)$$

avec c_0, c_1 et c_2 donnés par (2.110-112). Cette équation n'est pas complète puisque l'évolution de $P_n(t)$ dépend de $P_n(0; t)$. Pour surmonter ce problème, on peut supposer que $P_n(0; t)$ est proportionnelle à $P_n(t)$

$$\lambda(6-n)\bar{A}P_n(0; t) = \omega_n P_n(t) \quad (2.128)$$

avec ω_n positif pour $n = 3, 4, 5$ et nul pour $n \geq 6$, ce qui est d'ailleurs vrai dans le régime d'échelle. En faisant cela, on a introduit trois paramètres libres dans le problème : $\omega_3, \omega_4, \omega_5$. Ces paramètres expriment les taux de disparition des cellules, et peuvent être mesurés dans des expériences, ou des simulations numériques. Avec la simplification (2.128), on trouve une équation différentielle plus simple pour l'évolution de $P_n(t)$. Pour $n = 3$

$$\frac{dP_n(t)}{dt} + \omega_3 P_3(t) - \hat{c}_0 P_3(t) = (\hat{c}_1 + \hat{c}_2)4P_4(t) - \hat{c}_2 3P_3(t), \quad (2.129a)$$

pour $n \geq 4$

$$\begin{aligned} & \frac{dP_n(t)}{dt} + \omega_n P_n(t) - \hat{c}_0 P_n(t) \\ &= (\hat{c}_1 + \hat{c}_2)(n+1)P_{n+1}(t) - (\hat{c}_1 + 2\hat{c}_2)nP_n(t) + \hat{c}_2(n-1)P_{n-1}(t), \end{aligned} \quad (2.129b)$$

avec

$$\hat{c}_0 = \sum_{k=3}^5 \omega_k P_k(t) \quad (2.130)$$

$$\hat{c}_1 = \frac{1}{6} \sum_{k=3}^5 (6-k)\omega_k P_k(t). \quad (2.131)$$

$$\hat{c}_2 = \frac{1}{6} \omega_5 P_5(t) \quad (2.132)$$

Cette équation ressemble à l'équation étudiée par Stavans et al. [109], sauf que leur choix pour la forme découplée de la probabilité conjointe $Q_{nn'}$ était différent.

Dans l'approximation de champ moyen, nous avons perdu toute l'information concernant les corrélations entre topologies de cellules voisines. Néanmoins, le comportement dynamique de ces modèles simplifiés ressemble beaucoup au comportement de modèles plus élaborés et des systèmes réels. L'analyse de ces modèles, qu'il est possible de pousser beaucoup plus loin, peut nous expliquer différents aspects de la croissance de grains.

2.7 Modèles de transformations topologiques élémentaires

Dans cette section, nous allons étudier des modèles basés sur les deux transformations topologiques élémentaires, la transformation T_1 d'échange de voisinages, et la transformation T_2 d'élimination de triangles. Ces modèles, de nature purement topologique, n'ont pas de propriétés métriques.

2.7.1 Modèle de transformations T_1 et T_2

Ce modèle est une version plus simple du modèle décrit dans la sous-section (2.6.1). Le modèle, qui a été étudié récemment par Telley [93], Peshkin et al. [61], consiste en une structure cellulaire et en la règle dynamique suivante :

A chaque itération, on choisit une arête au hasard :

- Si cette arête appartient à un triangle, alors, avec probabilité ω_1 , on élimine le triangle par une transformation T_2 .
- Sinon, avec probabilité ω_2 , on effectue une transformation T_1 sur l'arête.

En plus, il faut préciser quelles sont les configurations de cellules permises. Nous avons exigé que dans les structures cellulaires engendrées :

- (1) Une cellule ne peut pas être voisine d'elle-même.
- (2) Deux cellules voisines ne peuvent avoir qu'une paroi en commun.

Ces deux exigences proviennent de la définition de la matrice de voisinage G_{ij} (voir la section (2.2)) : cette matrice est nulle sur la diagonale principale ; ailleurs elle ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1. En particulier, dans les structures cellulaires engendrées avec ces deux contraintes, il n'y a pas de cellules de moins de trois côtés.

Nous avons simulé ce modèle pour différentes valeurs des paramètres ω_1 et ω_2 . La condition initiale était une structure de 90 000 cellules hexagonales avec des conditions de bord cycliques, perturbée par 20 000 transformations T_1 sur des arêtes choisies au hasard. Pour chaque choix des paramètres, nous avons trouvé que le système évolue vers un régime stable où les propriétés statistiques sont constantes.

Dans les figures (2.31-34), nous montrons des résultats de simulations du modèle avec $\omega_2 = 1$ et $\omega_1 = 0.01, 0.05, 0.1, 1$. Pour chacun de ces quatre choix de ω_1 , nous montrons : (a) P_n , la distribution du nombre de côtés des cellules ; (b) $n m_n$, la topologie moyenne d'une cellule voisine d'une cellule de topologie n , multipliée par n ; (c) Q_{nl} , la distribution des cellules voisines de topologies n et l ,

divisée par $P_n P_l$, pour différentes valeurs de l . Chaque courbe est le résultat d'une moyenne sur 11 instants différents dans le régime stable.

Qualitativement, on voit que plus ω_2 est grand par rapport à ω_1 (donc plus il y a de transformations T_2) plus P_3 est petite dans la distribution limite. Le deuxième moment de cette distribution, μ_2 , vaut respectivement 3.15, 3.45, 3.6 et 6.5 pour les quatre choix de paramètres. La loi d'Aboav semble être vérifiée dans tous les cas. Dans les courbes avec $\omega_1 = 0.01, 0.05$ et 0.1 , les distributions Q_{nl} divisées par $P_n P_l$ ne sont pas linéaires. Ces courbes semblent avoir un point de focalisation à $n \simeq 11$, mais nous préférons d'écarter l'applicabilité de la conjecture de Peshkin et al. puisque m_n est toujours supérieur à 6. Les courbes de Q_{nl} divisées par $P_n P_l$, pour $\omega_1 = 1$, semblent être linéaires, mais on verra dans la section suivante, que cette linéarité n'est qu'approximative.

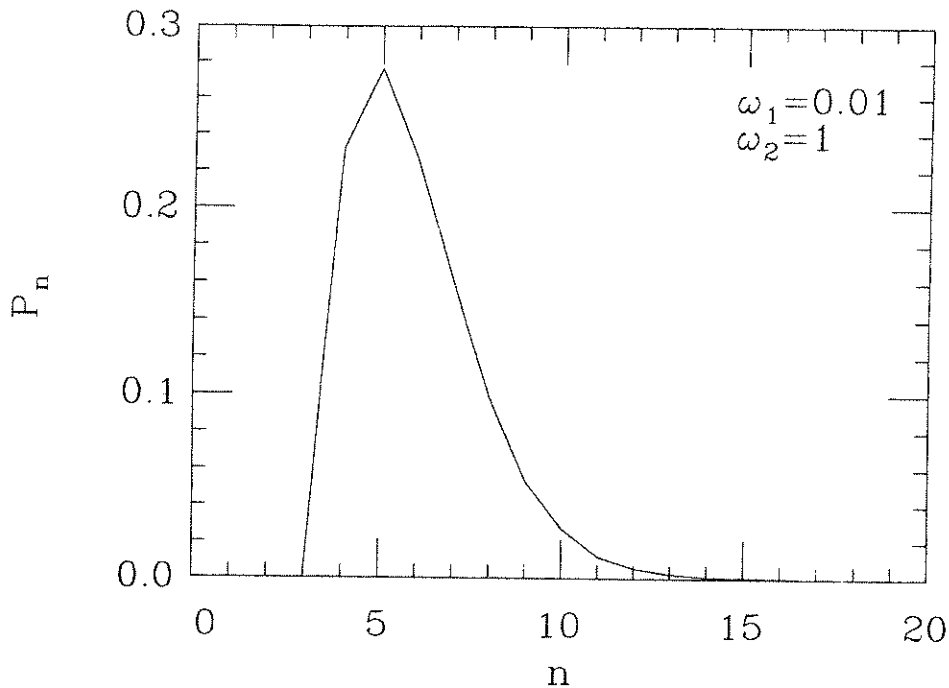


Figure 2.31(a) : La distribution du nombre des côtés P_n pour le modèle topologique avec $\omega_1 = 0.01$ et $\omega_2 = 1$.

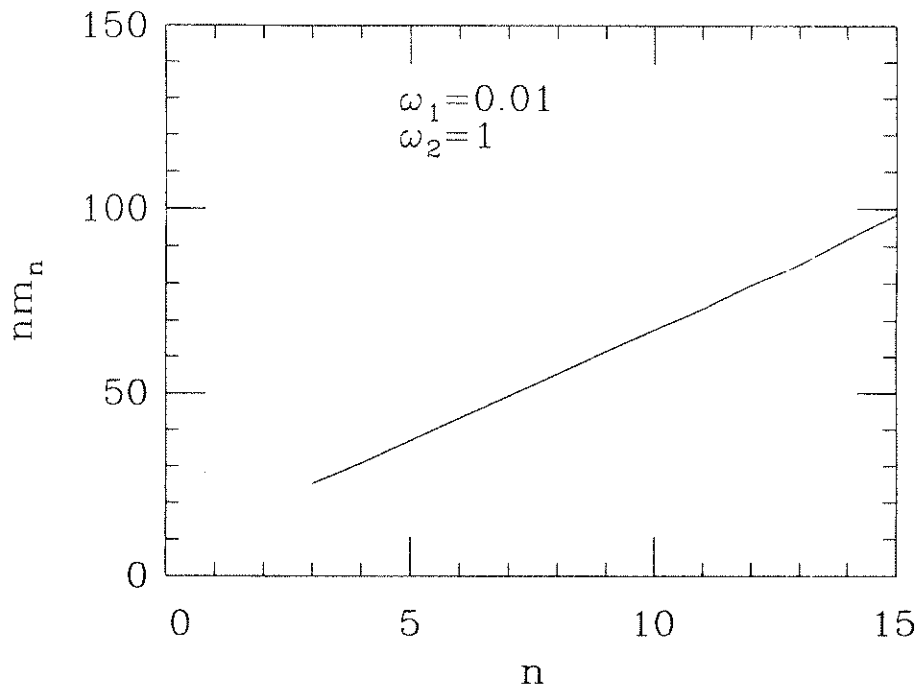


Figure 2.31(b) : La topologie moyenne des cellules voisines d'une cellule de topologie n , multipliée par n .

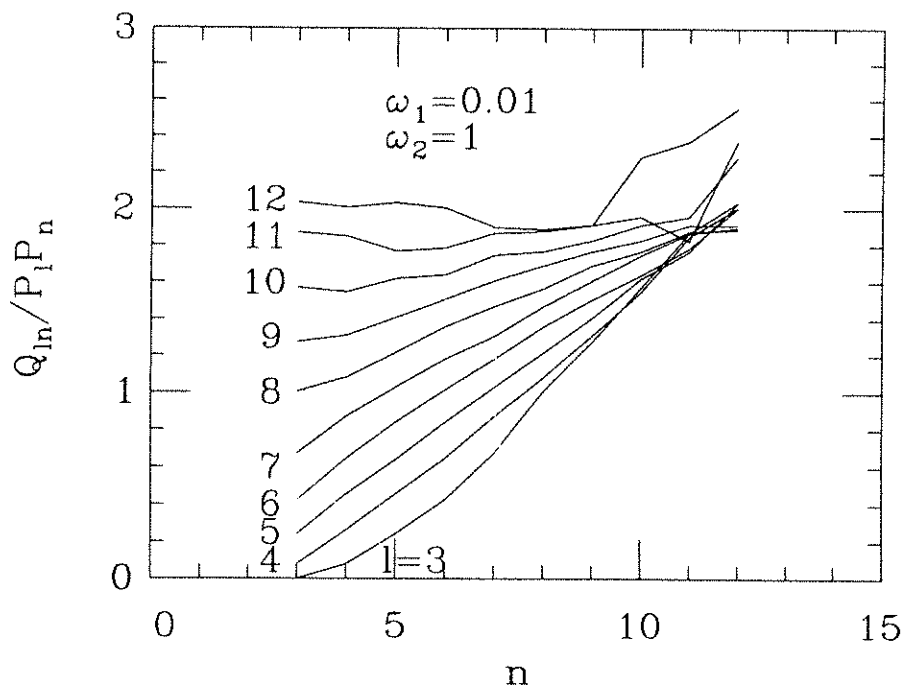


Figure 2.31(c) : La distribution conjointe Q_{ln} des paires de cellules voisines des topologies l et n , divisée par $P_n P_l$.

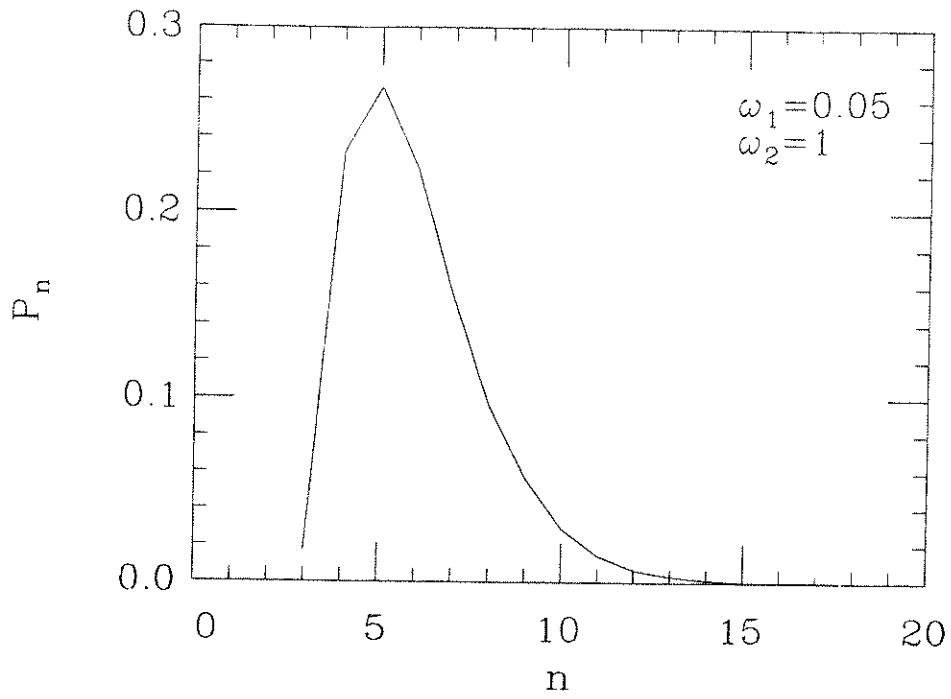


Figure 2.32(a) : La distribution du nombre des côtés P_n pour le modèle topologique avec $\omega_1 = 0.05$ et $\omega_2 = 1$.

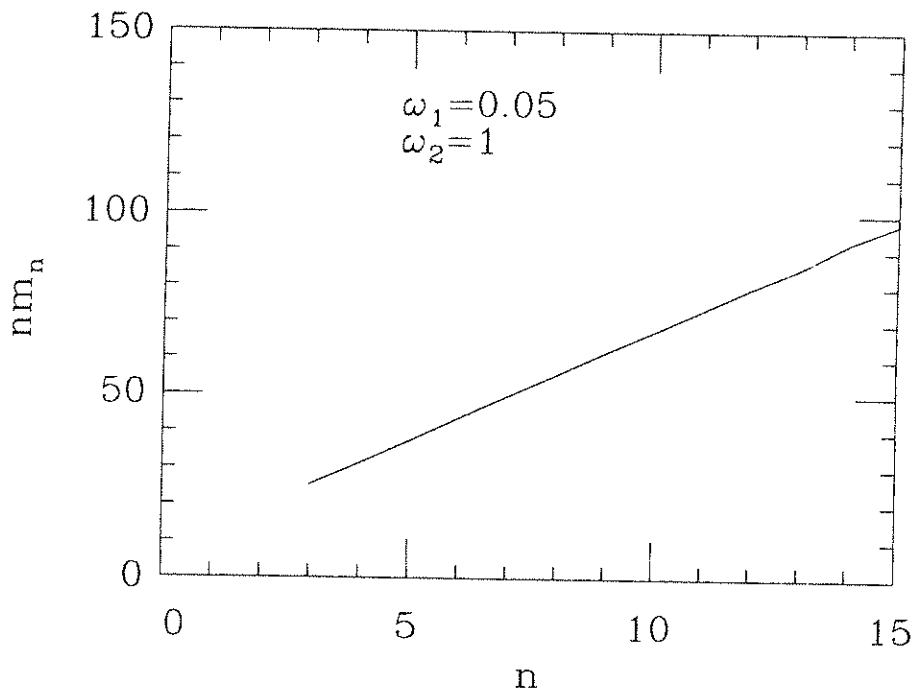


Figure 2.32(b) : La topologie moyenne des cellules voisines d'une cellule de topologie n , multipliée par n .

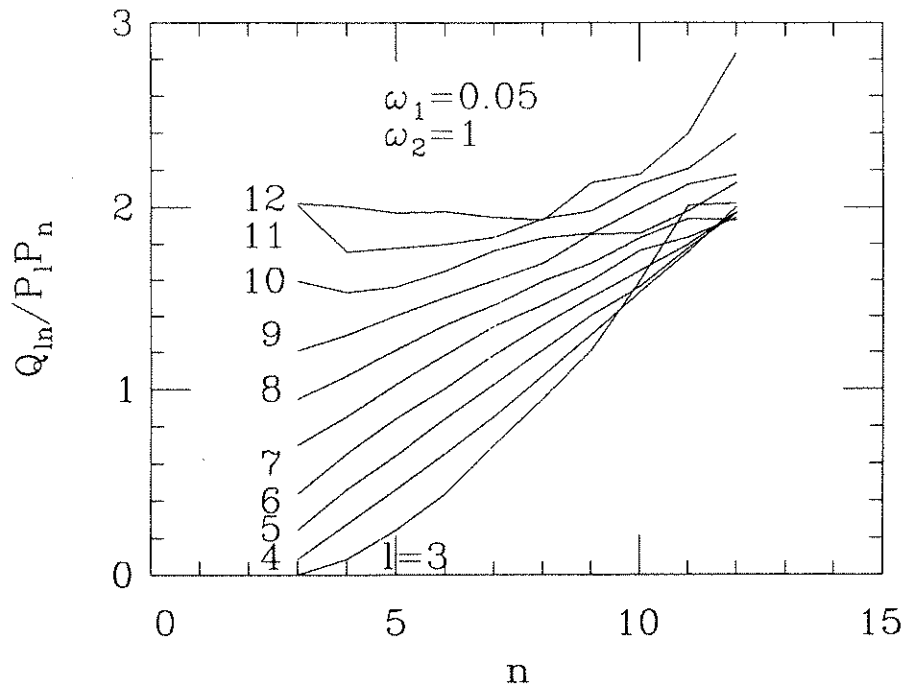


Figure 2.32(c) : La distribution conjointe Q_{ln} des paires de cellules voisines des topologies l et n , divisée par $P_n P_l$.

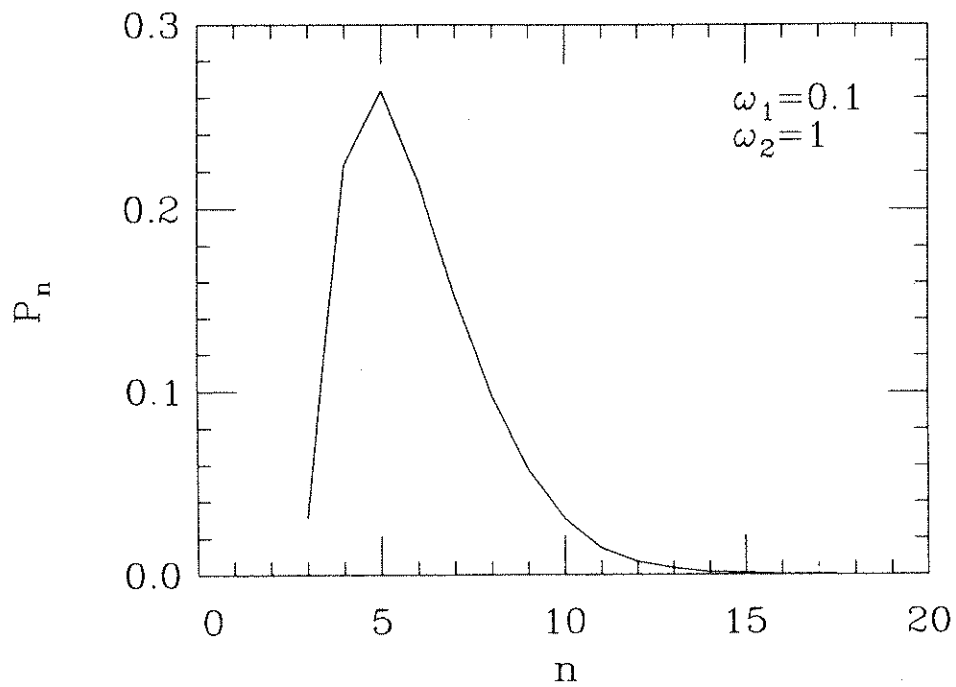


Figure 2.33(a) : La distribution du nombre des côtés P_n pour le modèle topologique avec $\omega_1 = 0.1$ et $\omega_2 = 1$.

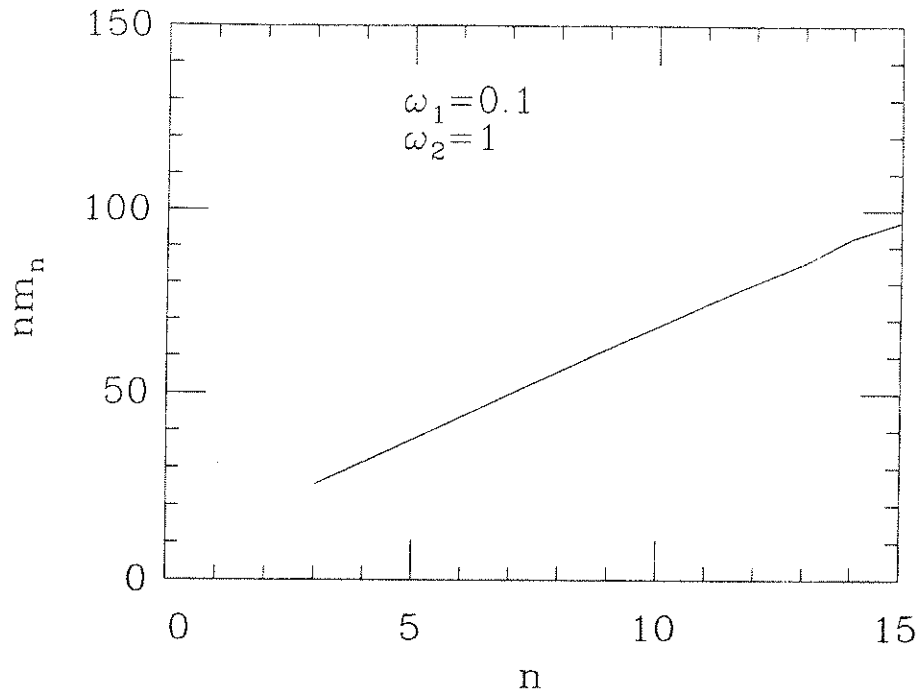


Figure 2.33(b) : La topologie moyenne des cellules voisines d'une cellule de topologie n , multipliée par n .

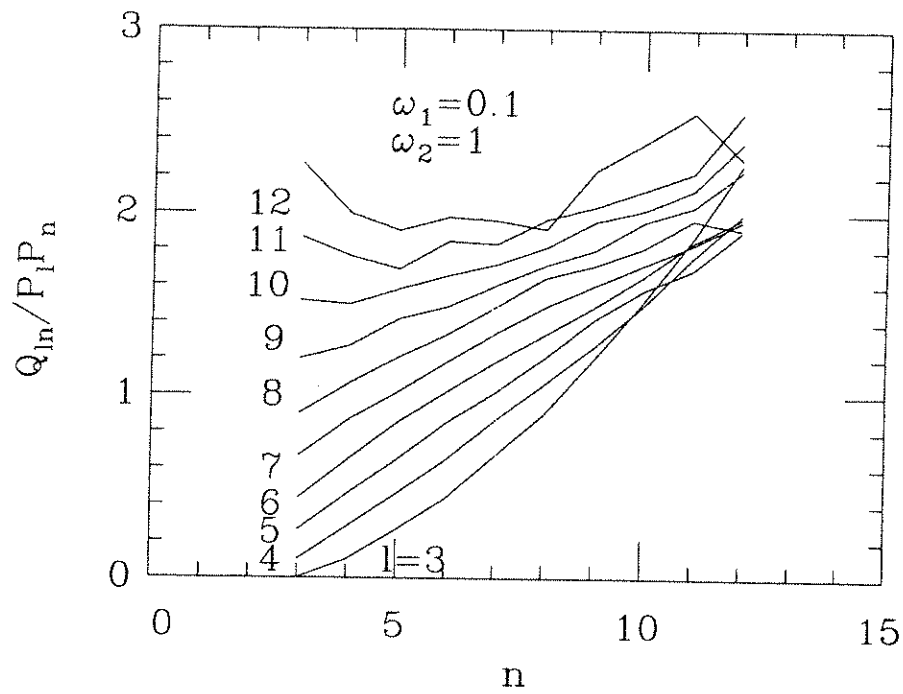


Figure 2.33(c) : La distribution conjointe Q_{ln} des paires de cellules voisines des topologies l et n , divisée par $P_n P_l$

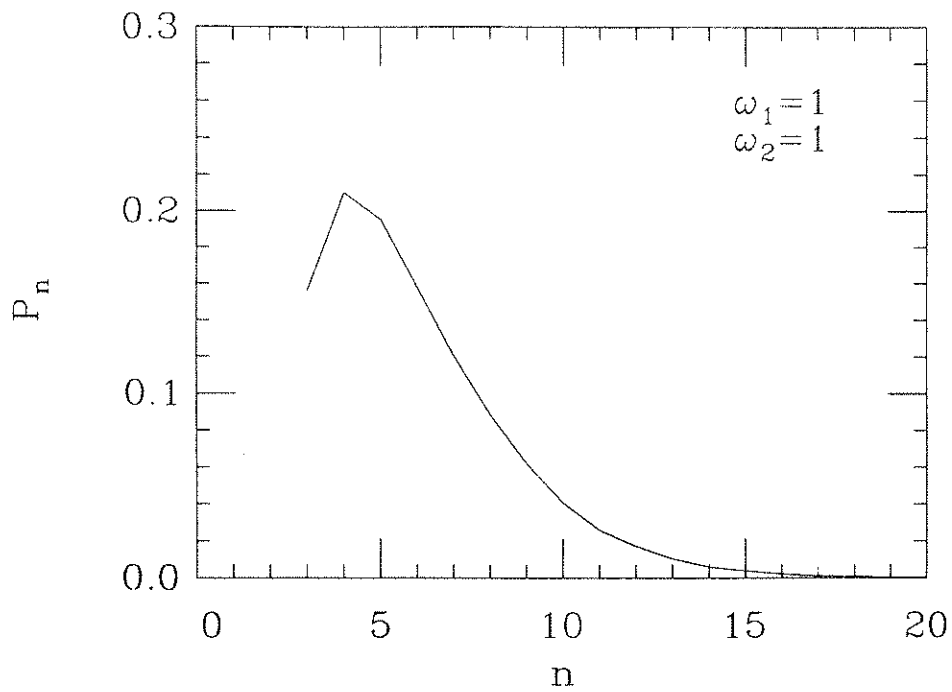


Figure 2.34(a) : La distribution du nombre des côtés P_n pour le modèle topologique avec $\omega_1 = 1$ et $\omega_2 = 1$.

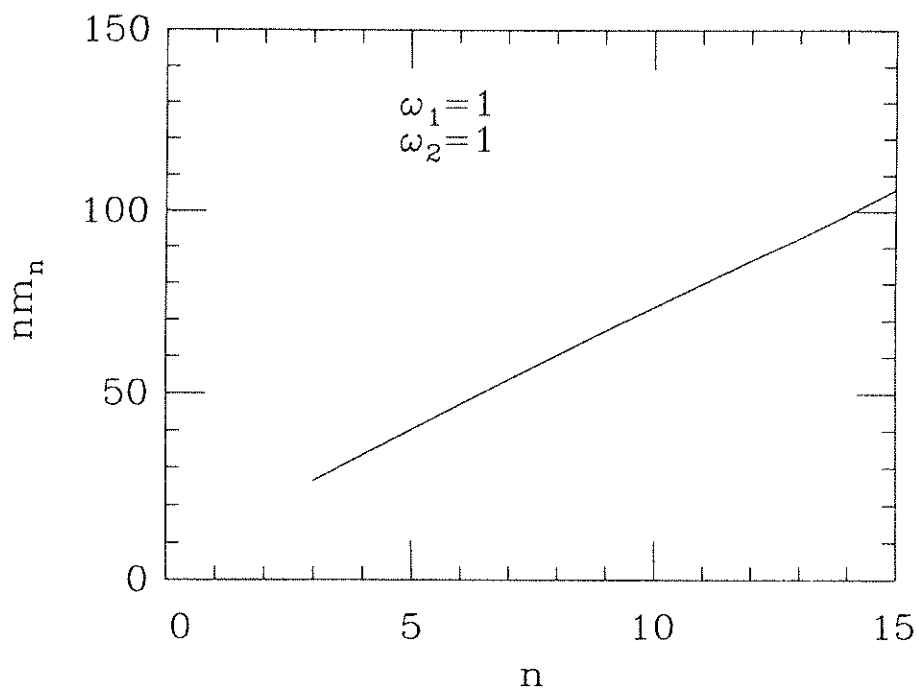


Figure 2.34(b) : La topologie moyenne des cellules voisines d'une cellule de topologie n , multipliée par n .

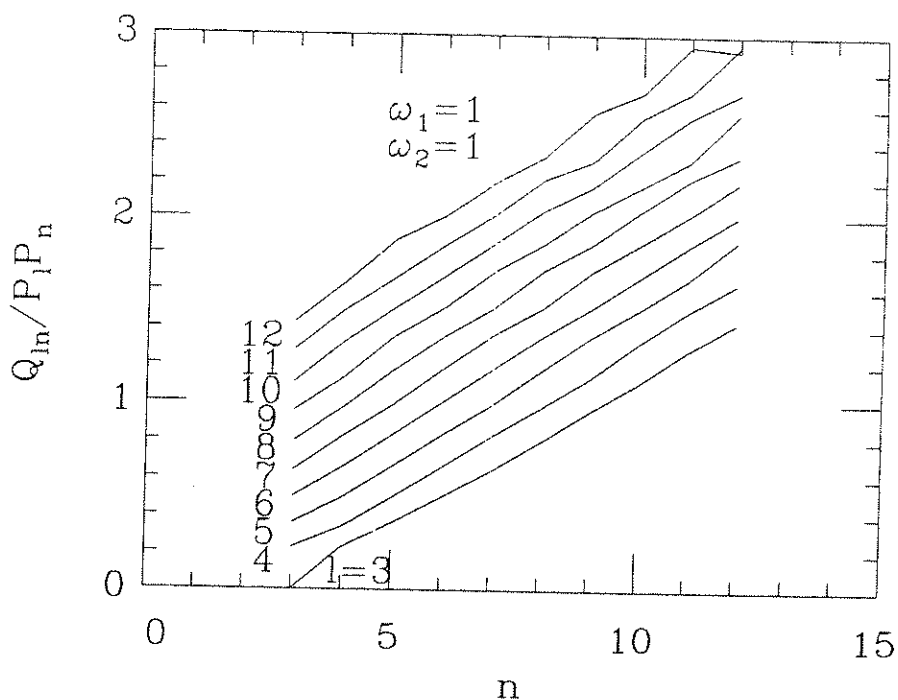


Figure 2.34(c) : La distribution conjointe Q_{ln} des paires de cellules voisines des topologies l et n , divisée par $P_n P_l$.

2.7.2 Théorie de champ moyen

Nous avons étudié le modèle de transformations T_1 et T_2 , à l'approximation du champ moyen. Nous voulons formuler une équation d'évolution de la probabilité $P_n(t)$. Nous supposons, par simplicité, que la probabilité conjointe Q_{nl} se découple en

$$Q_{nl}^{(CM)} = P_n P_l . \quad (2.133)$$

La probabilité qu'une arête soit au bord d'une cellule de 3 côtés est, en première approximation,

$$q_2 = 2 \frac{3P_3}{6} = P_3 . \quad (2.134)$$

Le facteur 2 vient du fait que l'arête se trouve entre deux cellules, et 6 est le nombre moyen de côtés d'une cellule. Avec la probabilité complémentaire

$$q_1 = 1 - P_3 \quad (2.135)$$

cette arête n'est pas au bord d'une cellule de 3 côtés. On choisit une arête au hasard. Si elle est au bord d'une cellule de 3 côtés, alors, avec probabilité ω_2 , on effectue une transformation T_2 . Chacune des trois cellules autour de cette cellule a au moins 4 côtés. Si elle n'est pas au bord d'une cellule de 3 côtés, alors, avec probabilité ω_1 , on effectue une transformation T_1 . Les deux cellules, qui perdent chacune un côté dans une transformation T_1 , ont au moins 4 côtés, tandis que les

deux autres cellules participant à la transformation, qui gagnent un côté chacune, peuvent avoir 3 côtés.

L'équation qui décrit l'évolution de ce modèle est

$$\frac{dP_3(t)}{dt} - \omega_2 P_3^2 = -\omega_2 P_3 + 3\omega_2 P_3 \frac{P_4}{1 - P_3} + 6\omega_1(1 - P_3) \left[\frac{P_4}{1 - P_3} - P_3 \right] \quad (2.136a)$$

pour $n = 3$, et pour $n \geq 4$

$$\begin{aligned} & \frac{dP_n(t)}{dt} - \omega_2 P_3 P_n \\ &= 3\omega_2 P_3 \frac{P_{n+1} - P_n}{1 - P_3} + 6\omega_1(1 - P_3) \left[\frac{P_{n+1} - P_n}{1 - P_3} + (P_{n-1} - P_n) \right] . \end{aligned} \quad (2.136b)$$

On voit dans ces équations que les transformations T_1 fournissent un terme de diffusion et un terme de dérive, tandis que les transformations T_2 donnent un terme de dérive et un puits à $n = 3$.

Nous avons intégré numériquement cette équation pour différentes valeurs de ω_1 et ω_2 . La condition initiale était chaque fois une distribution tronquée à $n = 10$, normalisée à 1, et avec $\bar{n} = 6$. A chaque fois, la distribution a convergé vers une distribution limite indépendante du temps. Dans les figures (2.35-38) nous avons tracé les distributions limites pour quatre choix différents des paramètres. La distribution limite avec $\omega_1 = 0.01$ et $\omega_2 = 1$ ressemble beaucoup aux distributions rencontrées dans la croissance normale de grains.

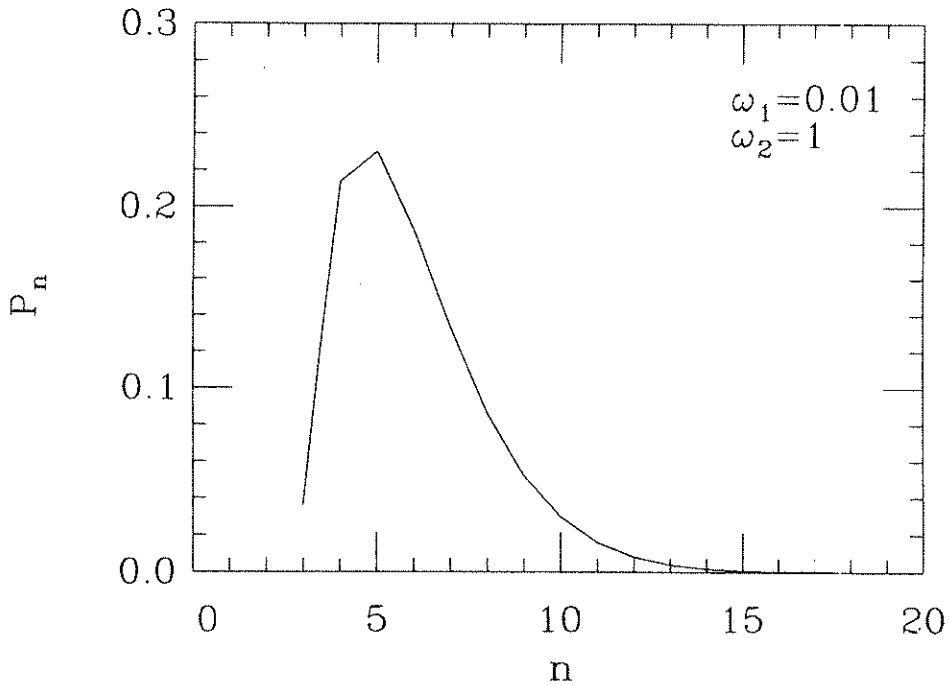


Figure 2.35 : Distribution limite du champ moyen avec $\omega_1 = 0.01$ et $\omega_2 = 1$.

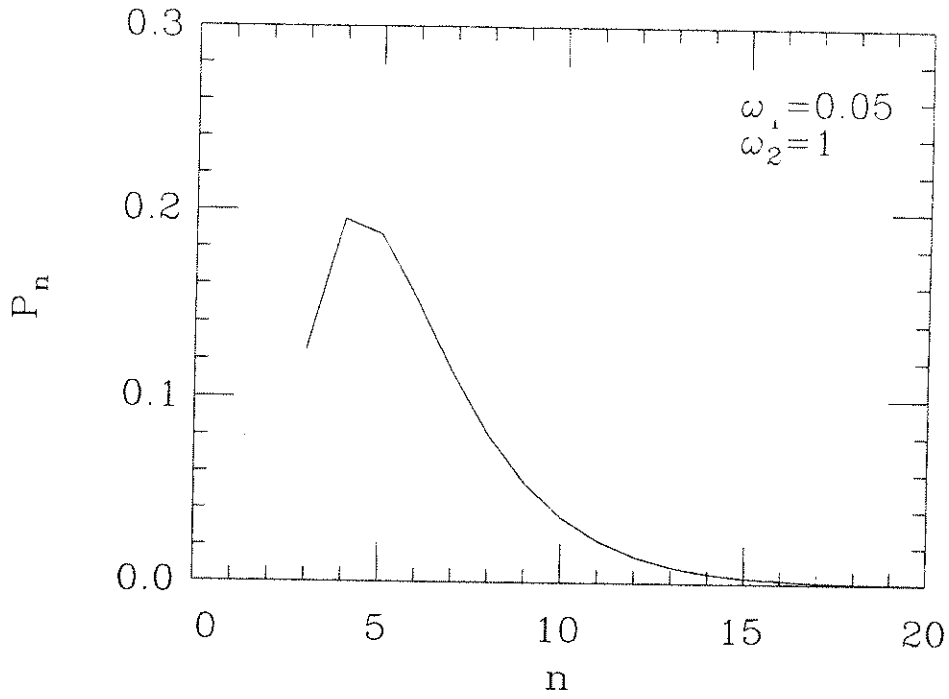


Figure 2.36 : Distribution limite du champ moyen avec $\omega_1 = 0.05$ et $\omega_2 = 1$.

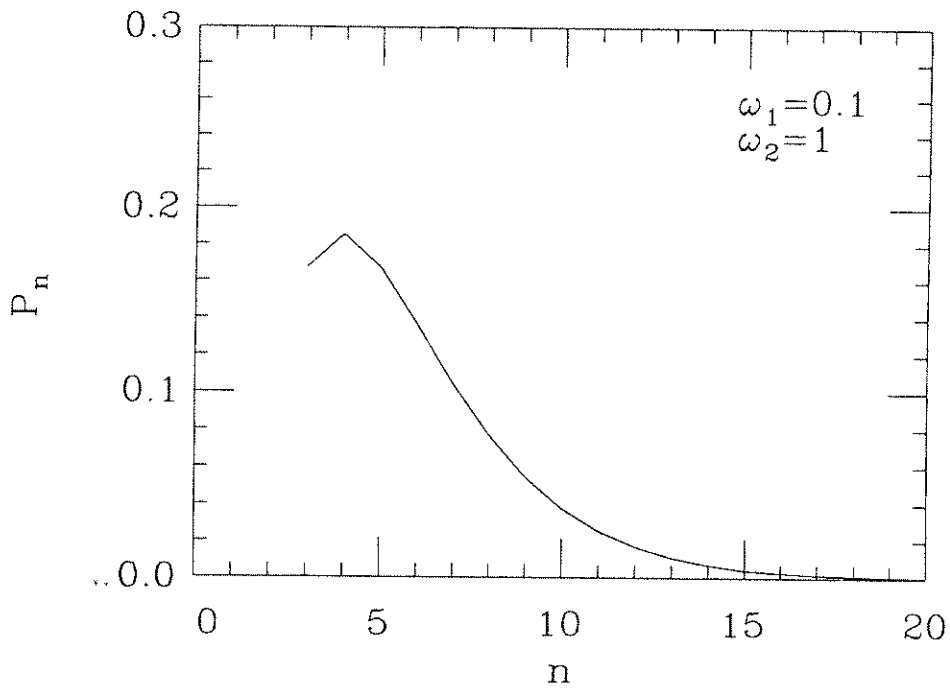


Figure 2.37 : Distribution limite du champ moyen avec $\omega_1 = 0.1$ et $\omega_2 = 1$.

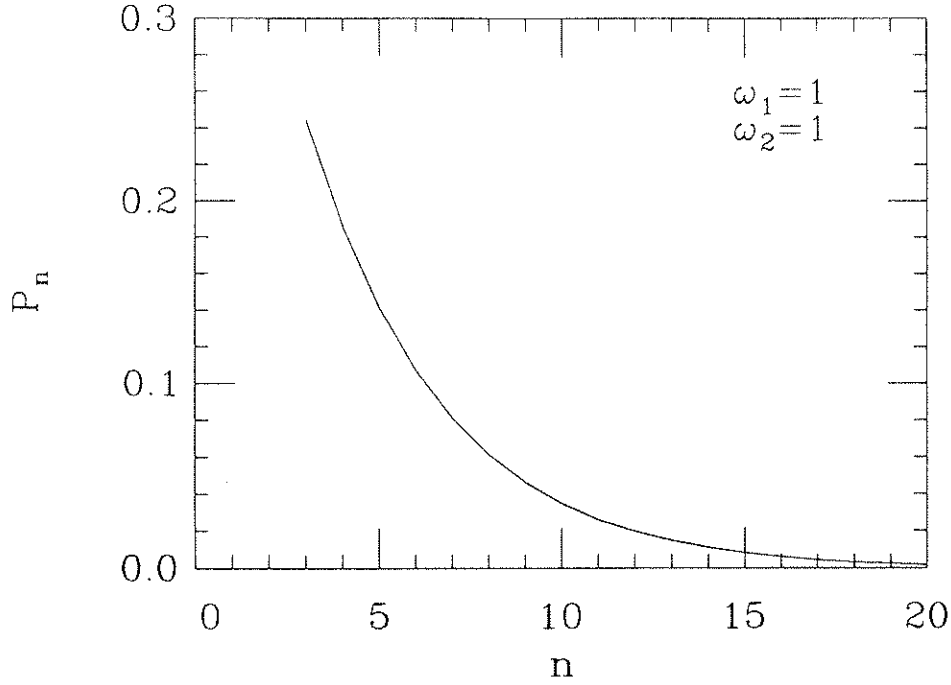


Figure 2.38 : Distribution limite du champ moyen avec $\omega_1 = 1$ et $\omega_2 = 1$.

Nous avons calculé les points fixes de l'équation (2.136). La distribution P_n^* est donnée par une relation de récurrence

$$P_4^* = cP_3^* \quad (2.137a)$$

$$P_{n+1}^* = aP_n^* - bP_{n-1}^* \quad (2.137b)$$

où les constantes a , b et c sont définies par

$$a = \frac{\omega_2 P_3^* (2 + P_3^*) + 6\omega_1 (1 - P_3^*) (2 - P_3^*)}{3\omega_2 P_3^* + 6\omega_1 (1 - P_3^*)} \quad (2.138)$$

$$b = \frac{6\omega_1 (1 - P_3^*)^2}{3\omega_2 P_3^* + 6\omega_1 (1 - P_3^*)} \quad (2.139)$$

$$c = \frac{(\omega_2 + 6\omega_1) (1 - P_3^*)^2}{3\omega_2 P_3^* + 6\omega_1 (1 - P_3^*)} \quad (2.140)$$

La solution de cette relation de récurrence est

$$P_n^* = \frac{(c - \lambda_-) \lambda_+^{n-3} + (\lambda_+ - c) \lambda_-^{n-3}}{\lambda_+ - \lambda_-} P_3^* \quad (2.141)$$

où λ_{\pm} sont les deux racines de l'équation caractéristique

$$\lambda^2 - a\lambda + b = 0 \quad (2.142)$$

On voit qu'il existe une ligne de points fixes, paramétrée par la valeur de P_3^* . Mais vers quel point fixe cette distribution converge-t-elle? Stavans et al. [109] ont suggéré, pour un modèle semblable, que c'est la queue de la distribution initiale qui détermine lequel des points fixes sera choisi. Dans les structures cellulaires, la distribution P_n décroît très rapidement avec une queue exponentielle. De tous les points fixes (2.141), la décroissance la plus rapide est celle où les deux racines de (2.142) sont égales (voir figure (2.39) pour un exemple). Dans ce cas, la distribution prend la forme

$$P_n^* = [(n-3)(c-\lambda) + \lambda]\lambda^{n-4}P_3^* . \quad (2.143)$$

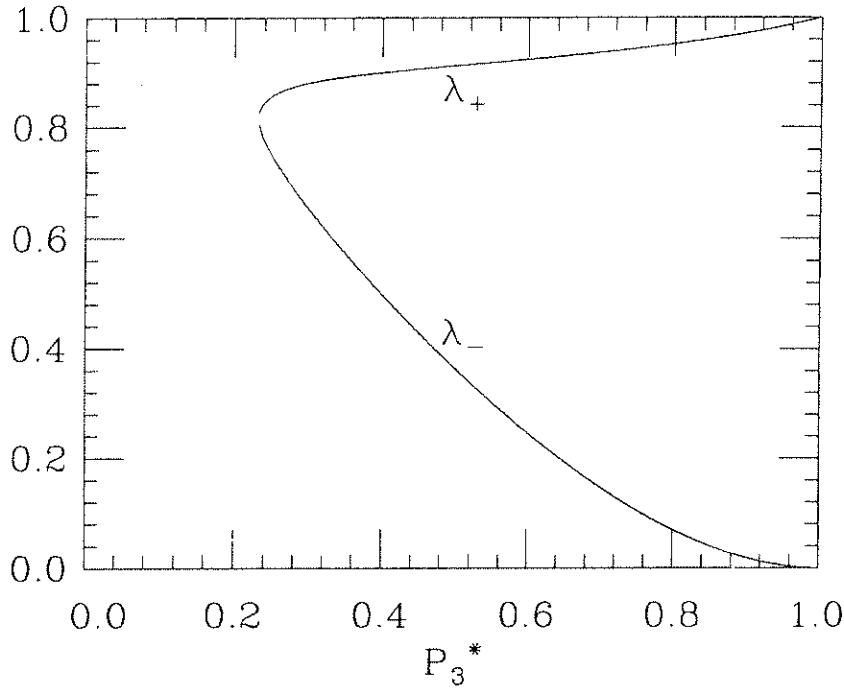


Figure 2.39 : Les deux exposants λ_+ et λ_- de la décroissance de la distribution limite P_n^* du champ moyen, en fonction de P_3^* , avec $\omega_1 = 1$ et $\omega_2 = 1$.

Nous avons essayé de déterminer de façon plus précise le choix du point fixe. Dans ce but, nous avons étudié l'effet séparé des transformations T_1 et T_2 . Dans la limite $\omega_2 = 0$, où on n'admet que des transformations T_1 , il existe un seul point fixe

$$P_n^* = \left(\frac{1}{4}\right) \left(\frac{3}{4}\right)^{n-3} \quad (2.144)$$

et la distribution va toujours converger vers ce point fixe. Nous rappelons que cette distribution est la distribution d'entropie maximale (2.32).

Dans le cas opposé, $\omega_1 = 0$, où on n'admet que des transformations T_2 , la situation est plus compliquée. On réécrit l'équation (2.136)

$$\frac{dP_3(t)}{dt} = \frac{3\omega_2 P_3}{1-P_3} \left[-\frac{(1-P_3)^2}{3} + P_4 \right] \quad (2.145a)$$

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = \frac{3\omega_2 P_3}{1 - P_3} \left[-\frac{2 + P_3}{3} P_n + P_{n+1} \right] . \quad (2.145b)$$

D'abord, cette équation possède le point fixe trivial

$$P_3^* = 0 \quad (2.146)$$

qui signifie qu'il ne reste plus de cellules de 3 côtés. Pour qu'une distribution évolue vers ce point fixe, il faut que la fraction de cellules de 4 côtés soit petite, pas suffisante pour compenser les cellules de 3 côtés qui disparaissent. Si $P_3(0) \ll 1$, les conditions pour que la fraction de cellules de 3 côtés ne diminue pas sont $P_4(0) \geq \frac{1}{3}(1 - P_3(0))^2$ et $P_{n+1}(0) \geq \frac{1}{3}(2 + P_3(0))P_n(0)$. Mais ces conditions sont incompatibles avec la normalisation de la distribution, et par conséquent P_3 tend vers 0. Ce point fixe n'est pas intéressant parce que, dans le cas général, avec l'inclusion de transformations T_1 , il y aura toujours un nombre non nul de triangles.

D'autre part, il existe une ligne de points fixes

$$P_3^* = \alpha \quad (2.147a)$$

$$P_n^* = \frac{(1 - \alpha)^2}{3} \frac{2 + \alpha^{n-4}}{3} \quad (2.147b)$$

avec $0 \leq \alpha \leq 1$. Une analyse de stabilité linéaire

$$P_n(t) = P_3^* + \epsilon e^{-\alpha t} q_n . \quad (2.148)$$

montre que tous ces points fixes sont stables, avec $\alpha > 0$.

Nous avons étudié l'évolution d'une classe spéciale de distributions appartenant à un sous-espace de toutes les distributions possibles, qui décroissent exponentiellement à partir de $n = 5$. La particularité de ces distributions est que la queue exponentielle ne change que son amplitude pendant l'évolution. Pour $n \geq 5$ les distributions ont la forme

$$P_n(t) = ab^{n-5} \exp\{r(t)\} , \quad (2.149)$$

avec la condition initiale $r(0) = 0$, et les constantes a et b données par

$$a = \frac{[1 - P_3(0) - P_4(0)]^2}{2 + P_3(0)} \quad (2.150)$$

$$b = \frac{1 + 2P_3(0) + P_4(0)}{2 + P_3(0)} . \quad (2.151)$$

L'évolution de $P_3(t)$ et de $P_4(t)$ reste compliquée, mais pour la queue on a l'équation

$$\dot{r}(t) = \frac{3\omega_2 P_3(t)}{1 - P_3(t)} \left[-\frac{2 + P_3(t)}{3} + b \right] . \quad (2.152)$$

Le seul point fixe de cette équation est

$$P_3^* = 3b - 2, \quad (2.153)$$

et la distribution a la forme (2.147).

Si $b < \frac{2}{3}$ alors $\dot{r}(t)$ est toujours négative, quelle que soit la valeur de P_3 . Par conséquent, l'amplitude de la queue tend vers 0, et la distribution tend vers le point fixe

$$P_n^* = \delta_{n3}. \quad (2.154)$$

On voit que c'est la queue de la distribution initiale qui a déterminé le point fixe vers lequel la distribution évolue. Les fractions P_3 , P_4 et l'amplitude de la queue $\exp\{r\}$ s'ajustent pour avoir les valeurs compatibles avec la décroissance exponentielle de la queue. Bien qu'on ne puisse pas faire la même analyse dans le cas général, avec $\omega_1 > 0$, on est tenté de croire que le comportement ne changera pas qualitativement.

Différents chercheurs ont proposé des théories de champ moyen pour décrire l'évolution de la distribution du nombre de côtés des cellules dans un processus de croissance normale de grains. Ces théories ont généralement une forme semblable aux équations (2.129) ou (2.136) avec plusieurs paramètres libres. On constate que, par un choix astucieux des paramètres, on peut toujours trouver une distribution limite qui ressemble aux distributions de croissance normale de grains. C'est peut-être le signe du caractère universel de tous ces problèmes de croissance.

Il est possible de formuler des théories de champ moyen plus élaborées, d'ordre d'approximation plus élevé, qui contiennent une information sur les corrélations entre topologies de cellules voisines. En deuxième approximation, on peut décrire l'évolution de la probabilité $Q_{n_1 n_2}$ de trouver une arête entre deux cellules de topologies n_1 et n_2 . Au troisième ordre d'approximation, on peut décrire l'évolution de la probabilité $R_{n_1 n_2 n_3}$ de trouver un sommet entre trois cellules de topologies n_1 , n_2 et n_3 .

2.8 Modèle de transformations T_1

2.8.1 Etat d'équilibre

Dans toute la gamme de valeurs des paramètres ω_1 et ω_2 , le modèle géométrique dirige le système vers un état stationnaire où les propriétés statistiques sont constantes. Le cas limite $\omega_2 = 0$, où il n'y a pas de transformations T_2 , est un cas spécial. Puisqu'une transformation T_1 est un processus réversible, la dynamique est ergodique, et le système va vers l'état d'équilibre statistique. Boulatov et al. [110] ont démontré qu'avec des transformations T_1 on peut engendrer tous les graphes planaires avec un nombre de sommets fixé; autrement dit, toutes les représentations des structures cellulaires possibles avec un nombre de cellules fixé. Par ailleurs, en appliquant au hasard des transformations T_2 d'élimination de triangles et des transformations inverses $(T_2)^{-1}$ de création de triangles, le système se dirige aussi vers l'équilibre. Si on applique le même nombre de transformations

T_2 et $(T_2)^{-1}$, on s'attend à ce que l'état d'équilibre soit le même atteint par des transformations T_1 .

L'étude des propriétés statistiques de cet état d'équilibre se ramène à un problème de dénombrement des graphes d'une théorie des champs ϕ^3 , dans la limite planaire. Ces mêmes auteurs ont réussi, en se servant de travaux antérieurs sur les graphes planaires [111], à calculer la distribution P_n du nombre des côtés des cellules.

Nous avons généralisé ce calcul pour trouver la distribution conjointe Q_{ln} des nombres des côtés des paires de cellules voisins. Dans l'ensemble de graphes considéré, nous avons interdit les termes de *self-energy* (voir la figure (2.40)) et les *tadpoles* (voir la figure (2.41)). Cet ensemble est le même que celui utilisé dans les simulations numériques que nous avons présentées au début de la section. Des détails sur ce dernier calcul sont donnés dans un article soumis à *Physical Review Letters*, présenté ici.



Figure 2.40 : Des exemples de *tadpoles*.

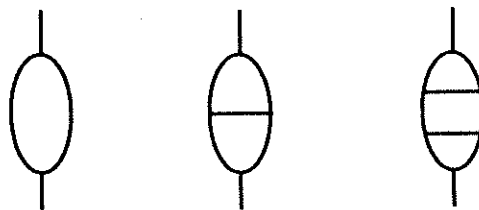


Figure 2.41 : Des exemples de termes de *self-energy*.

Topological correlations in cellular structures and planar graph theory

C. Godrèche¹, I. Kostov² and I. Yekutieli¹

¹Service de Physique de l'Etat Condensé, Centre d'Etudes de Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

²Service de Physique Théorique, Centre d'Etudes de Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

Abstract. We study the topological properties of the ensemble of cells with trivalent vertices in the plane. The problem is equivalent to counting planar Feynman diagrams with a cubic interaction. This ensemble is also the equilibrium state of a topological model of cellular structure, obtained by applying repetitively a topological flip transformation to any initial configuration of cells with trivalent vertices. We give analytical expressions for two-cell correlations; in particular we give the analytical form of the average number $m(n)$ of edges of cells adjacent to an n -sided cell. These results are confirmed by simulations.

Submitted to Phys. Rev. Lett.

30/07/1992

One finds many instances of random cellular structures in everyday life. Bones, wood, cork, foams, plants, food (bread, meringue, ...), soap froth, as a whole or partially, are cellular materials [1]. Since cellular structures exist on scales ranging from microscopic to geological, much work has been devoted to the search for universal geometrical characteristics. For instance, leaving aside their metric properties (e.g. sizes of cells), it is of importance to understand whether cellular structures obey some universal topological laws. It is therefore natural to study the probability distribution Π_n of the number n of edges of a given cell (the "topology" of the cell), or correlations between the topologies of adjacent cells. For example, Aboav noted a simple correlation between the topology n of a given cell and the average topology $m(n)$ of its n neighbours [2, 3]: in all known cellular structures it is indeed usually found that $nm(n)$ is, to a very good approximation, linear in n .

In this Letter we present an analytical study of these correlations in the case of a very simple, purely topological, model of cellular structure. We give the two-cell probability distribution P_{ln} of finding an l -cell adjacent to a n -cell; we find also the exact form for the average total number of edges of cells adjacent to an n -sided cell:

$$nm(n) = 7n + 3 + \frac{9}{n+1} \quad (1)$$

Hence Aboav's law, stating that this quantity should be linear in n , is slightly violated. These results are in complete agreement with our numerical simulations.

We consider the following model. Starting from any distribution of $N + 2$ cells with trivalent vertices (three edges meet at a vertex), one chooses randomly an edge between two cells and applies a topological transformation T_1 (cf Fig. 1). This dynamical process obeys detailed balance. It is iterated until an equilibrium state is obtained. The ensemble of configurations thus obtained is also the ensemble of planar Feynman diagrams of a ϕ^3 field theory with $2N$ vertices. We restrict the present study to a variant of this model where the class of diagrams considered does not contain tadpoles or self-energy parts; i.e., one cell cannot touch itself and two cells cannot touch more than once. In other words, T_1 is not applied to an edge such that cells c and d in Fig. 1 are already adjacent; in particular it is not applied to an edge belonging to a 3-sided cell.

Consider a configuration of $N + 2$ cells, labelled by $i = 1, \dots, N + 2$, on the surface of a sphere. It is entirely described by its adjacency matrix

$$G_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i, j \text{ are adjacent} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2)$$

normalised such that $\sum_{i,j} G_{ij} = \sum_i n_i = 6N$, where n_i is the number of edges of the i -th cell. By Euler relation one has

$$\#(\text{cells}) - \#(\text{edges}) + \#(\text{vertices}) = 2 \quad (3)$$

Since $2 \#(\text{edges}) = 3 \#(\text{vertices})$, one finds that $\#(\text{vertices}) = 2N$ and $\#(\text{edges}) = 3N$. The statistics of cells and edges is given by the following probability distributions, defined in the thermodynamical limit. The probability distribution of cells with n edges is

$$\Pi_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N+2} \sum_j \delta_{n,n_j} \quad (4)$$

normalized such that $\sum_n \Pi_n = 1$ and $\sum_n n \Pi_n = 6$. The probability of finding an edge common to two neighbouring cells with topology l and n is defined as

$$P_{ln} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{6N} \sum_{i,j} G_{ij} \delta_{l,n_i} \delta_{n,n_j} \quad (5)$$

normalized such that $\sum_l P_{ln} \equiv P_n = n \Pi_n / 6$ and $\sum_{l,n} P_{ln} = 1$. P_n is the probability of finding an edge belonging to a cell of topology n . The quantity $m(n)$ introduced above is the conditional expectation value

$$m(n) = \sum_l l \frac{P_{ln}}{P_n} = \frac{6}{n \Pi_n} \sum_l l P_{ln} \quad (6)$$

Note that if there were no correlations between cells, P_{ln} would factorize into $P_l P_n$, and $m(n)$ would equal $\sum_l l P_l = \sum_l l^2 \Pi_l / 6 = 6 + \mu_2 / 6$ where $\mu_2 = \sum_n \Pi_n (n-6)^2$.

The counting problem for planar diagrams has been well studied in the past [4]. Using these techniques, the authors of Ref. [5] have computed the probability distribution Π_n . The calculation of P_{ln} , sketched below, is in the same spirit, though more complicated. Consider the generating function $Z(g)$ for the number of connected planar graphs

$$Z(g) = \sum_{N=1}^{\infty} Z_N g^{2N} \quad (7)$$

where Z_N counts the number of (vacuum) graphs with $2N$ vertices, weighted by their symmetry factors. The derivative $\frac{3}{2} g \frac{dZ}{dg}$ describes the ensemble of graphs

with one marked line (the number of such graphs is $3NZ_N$). We can write this function as

$$\frac{3}{2}g \frac{dZ}{dg} = \sum_{l,n=2}^{\infty} Z_{ln}(g) \quad (8)$$

where l and n denote the number of edges of two adjacent cells having the marked line as common edge (Fig. 2a). One may decompose the rest of the graph into connected pieces, as illustrated by Fig. 2b. This permits to express $Z_{ln}(g)$ in terms of the Green functions $W_n(g) = \sum_{G_n} g^{2N(G_n)}$, where the sum goes over all connected planar diagrams with n external legs, without self-energy parts and tadpoles. Defining the generating functions

$$W(x) = 1 + x^2 + \sum_{n=3}^{\infty} W_n(g)x^n \quad \text{and} \quad Z(x, y) = \sum_{l,n=2}^{\infty} Z_{ln}(g)x^l y^n \quad (9)$$

$Z(x, y)$ can be expressed through $W(x)$ as

$$Z(x, y) = \frac{(x-y)(xyg)^2}{xW(yg) - yW(xg)} \quad (10)$$

Around $g^2 = g_c^2 = 3^3/4^4$, the function $W(x)$ behaves as

$$W(x) = W(x)|_{g=g_c} + (g - g_c)^{3/2}w(x) + \dots \quad (11)$$

Expanding $Z(x, y)$ in $(g - g_c)^{3/2}$

$$Z(x, y) = Z(x, y)|_{g=g_c} + (g - g_c)^{3/2}P(x, y) + \dots \quad (12)$$

yields the generating function for the probabilities P_{ln}

$$P(x, y) = \sum_{l,n=2}^{\infty} x^l y^n P_{ln} \quad (13)$$

It reads

$$P(x, y) = \frac{3^3}{4^4} x^2 y^2 (x - y) \frac{y f(x) - x f(y)}{(y F_0(x) - x F_0(y))^2} \quad (14)$$

where

$$f(x) = \frac{1}{2}x \left[1 + \frac{9x - 8}{(4 - 3x)^{3/2}} \right] \quad \text{and} \quad F_0(x) = \frac{1}{16} [9x + 8 + (4 - 3x)^{3/2}] \quad (15)$$

These functions are related to $W(x)$ by

$$F_0(x) = W(gx)|_{g=g_c}, \quad f(x) = w(gx) \quad (16)$$

Note the normalization conditions

$$P(1,1) = 1, \quad P(1,x) = P(x,1) = f(x) = \sum P_n x^n = \sum \frac{n}{6} \Pi_n x^n \quad (17)$$

where

$$\Pi_n = 16 \frac{(n-2)(2n-2)!}{n!(n-1)!} \left(\frac{3}{16}\right)^n \quad (18)$$

This equation was already given in Ref. [5]. Finally using the fact that

$$\sum_l l P_{ln} = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial y^n} \frac{\partial}{\partial x} P(x,y) \Big|_{x=1,y=0} = \frac{8}{3} (7n^2 + 10n + 12) \frac{(n-2)(2n-2)!}{(n-1)!(n+1)!} \left(\frac{3}{16}\right)^n \quad (19)$$

yields the result for $nm(n)$ given in eq.(1). Note that $\mu_2 = 6f'(1) - 36 = 10.5$.

The P_{ln} were obtained from eq. (14) with Mathematica. These probabilities are shown on Fig. (3a), as functions of n for various l . An interesting quantity is $P_{ln}/\Pi_l \Pi_n$. In a recent paper [6], it was claimed, on the basis of maximum entropy arguments, that this quantity should be linear in n for each l , implying the linearity of $nm(n)$. In Fig. (3b) we show $P_{ln}/\Pi_l \Pi_n$ as a function of n , for various l . Linearity is seen to be a good approximation for this quantity. For completeness, we show the plots of Π_n and $nm(n)$ in Figs. (4a-b).

Simulations. We took as initial condition an hexagonal network of 400×400 cells, with periodic boundary conditions. At each step, an edge is chosen at random. If this edge fulfils the constraints mentioned above –ensuring that no self-energy parts or tadpoles be generated– the topological transformation T_1 is applied to it. The points with error bars on Figs. (3-4) represent the average of P_{ln} , $P_{ln}/\Pi_l \Pi_n$, Π_n and $nm(n)$ at 100 different times, after equilibrium is reached. The error bars give the standard deviations of these quantities. All these numerical data agree perfectly with the analytical curves.

Discussion and Conclusion. The cellular structure used in the simulations is defined on a torus, whereas the planar approximation uses the topology of the sphere. This is not contradictory since, though the partition function $Z(g)$ depends on the genus of the surface on which the cellular structure is defined, this is not the case for P_{ln} or Π_n which are local properties.

A number of other variants of this problem may be studied. We will present some of them elsewhere; in particular we will give the analytical study of correlations for the ensemble of diagrams with self-energy parts.

Other topological models implementing both the T_1 transformation and the topological transformation T_2 (suppression of triangles), may also be studied (see e.g. Ref. [6]). In this case, the detailed balance property of the model is lost. Instead of an equilibrium state, a steady state is reached under the dynamics. The configurations thus obtained form a subset of all the possible configurations considered in this Letter. Analytical considerations on the correlations should be more difficult to elaborate.

To conclude, we believe that the exactly soluble model presented in this Letter may serve as a template for more complicated cellular structures. In particular the results given here may help to understand the theoretical status of maximum entropy arguments.

We wish to thank F. David, B. Derrida, J. M. Luck, D. Mukamel and N. Rivier for interesting discussions.

References

- [1] Gibson L. J. and Ashby M. F., *Cellular Solids*, Pergamon Press (1988).
- [2] Aboav D. A., *Metallography*, **3** (1970) 383; *Metallography*, **13** (1980) 43.
- [3] Weaire D. and Rivier N., *Contemp. Phys.* **25** (1984) 59.
- [4] Brézin E., Itzykson C., Parisi G. and Zuber J. B., *Commun. math. Phys.* **59** (1978) 35, and references therein.
- [5] Boulatov D. V., Kazakov V. A., Kostov I. K. and Migdal A. A., *Nuclear Phys.* **B 275** (1986) 641.
- [6] Peshkin M. A., Strandburg K. J. and Rivier N., *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 1803.

Figure captions

Fig 1. The topological transformation T_1 .

Fig. 2.

a) Representation of the graphs with a marked line.

b) Decomposition of the hatched part of Fig. 2a into connected Green's functions.

Fig. 3.

a) The joint probabilities P_{ln} versus n , for $l = 3, \dots, 9$.

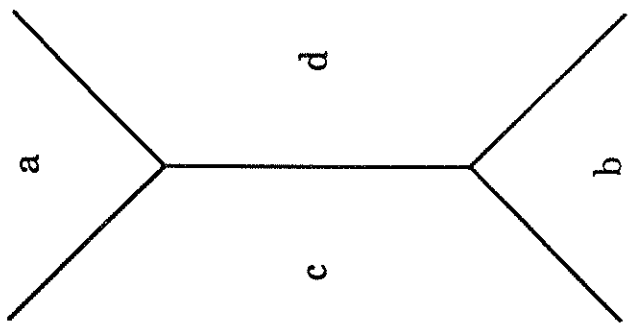
b) Plot of $P_{ln}/\Pi_l\Pi_n$ versus n , for $l = 3, \dots, 9$. The continuous curves are the theoretical predictions. Points with error bars are found by simulations for 100 different times.

Fig. 4.

a) Probability distribution Π_n of cells with n edges.

b) Plot of $nm(n)$.

Same representation as Fig. 3.



T_1 \longrightarrow

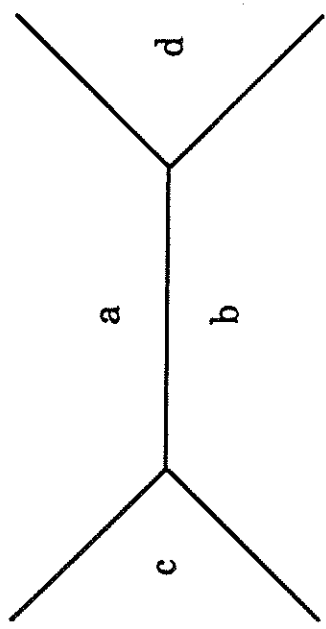


Figure 1

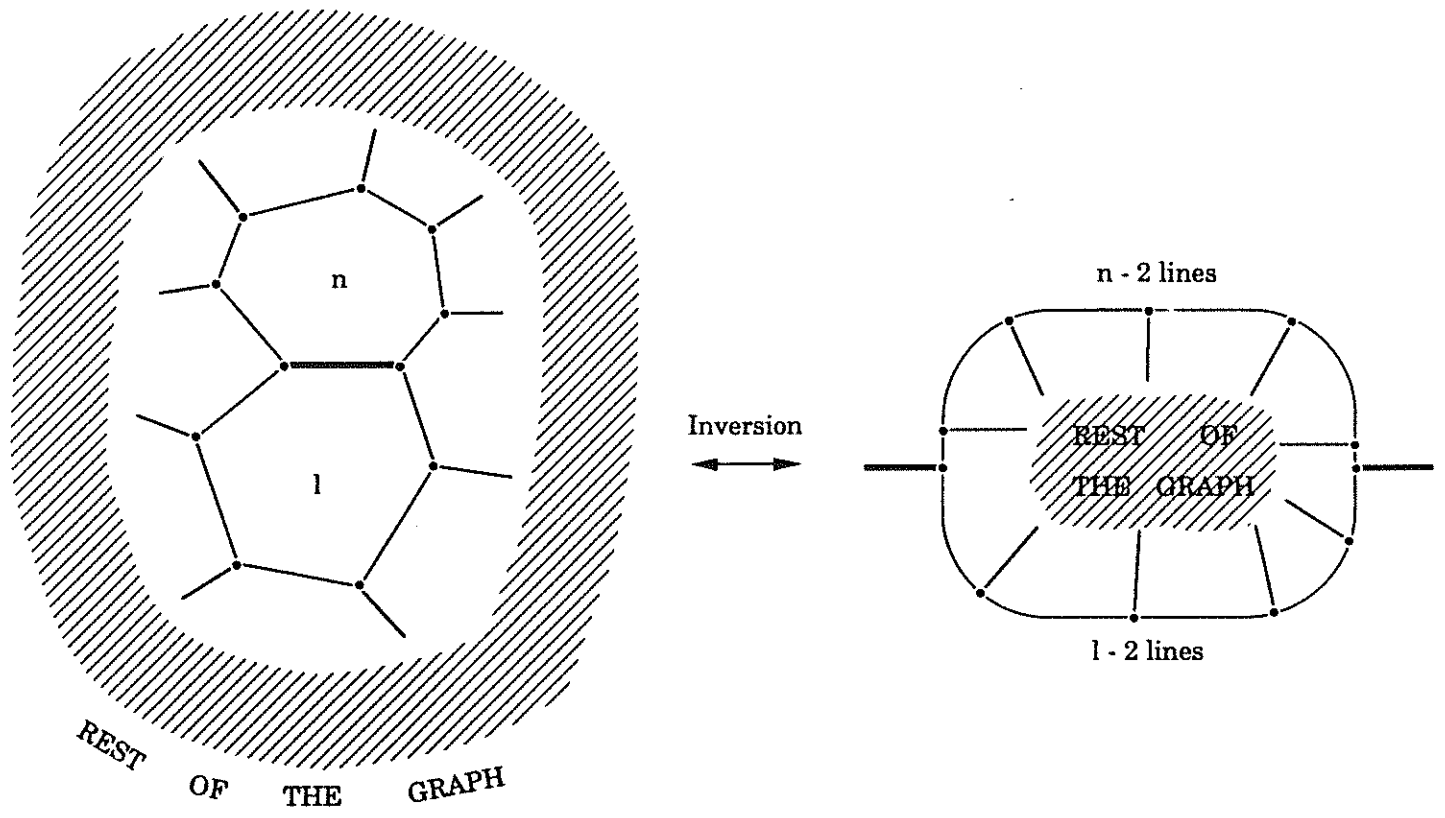


Figure 2a

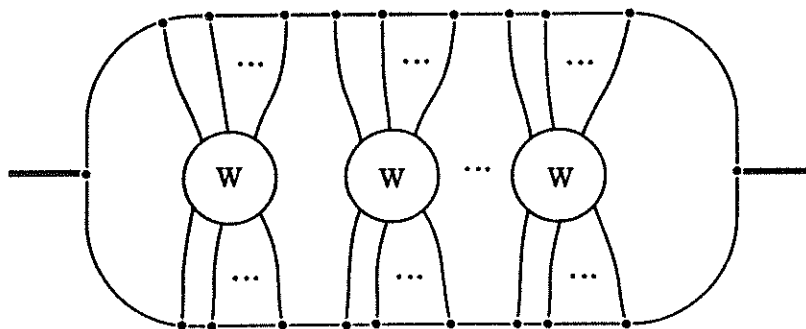


Figure 2b

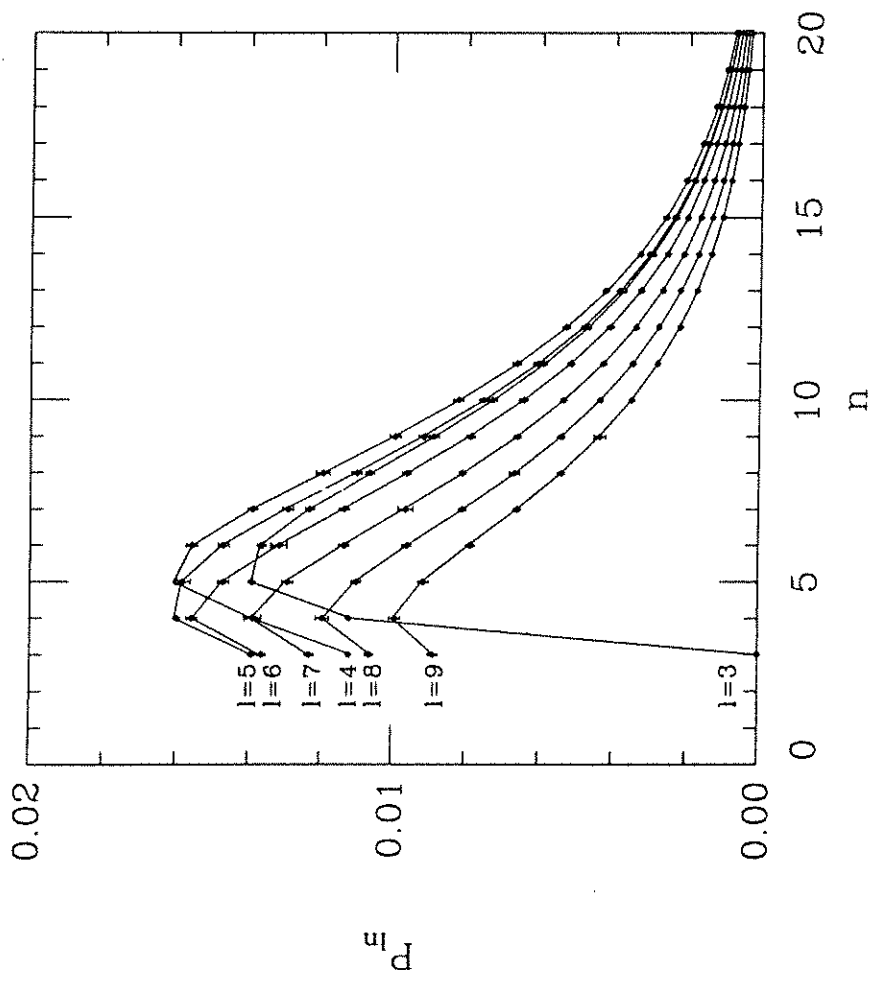


Figure 3a

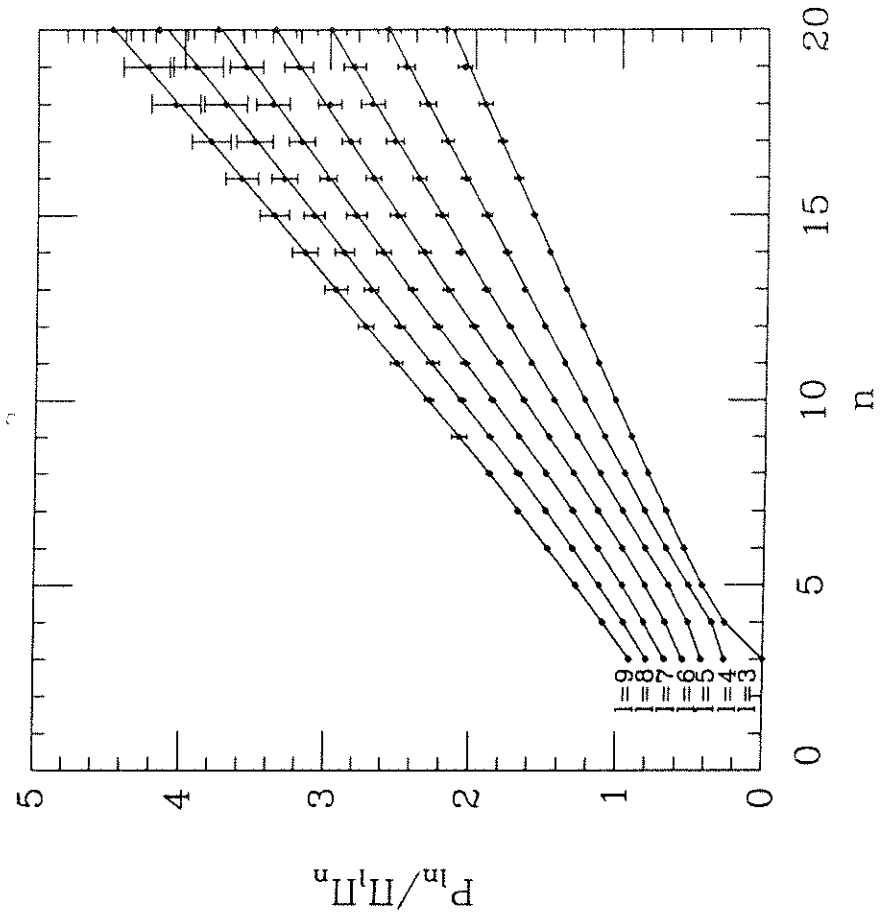


Figure 3b

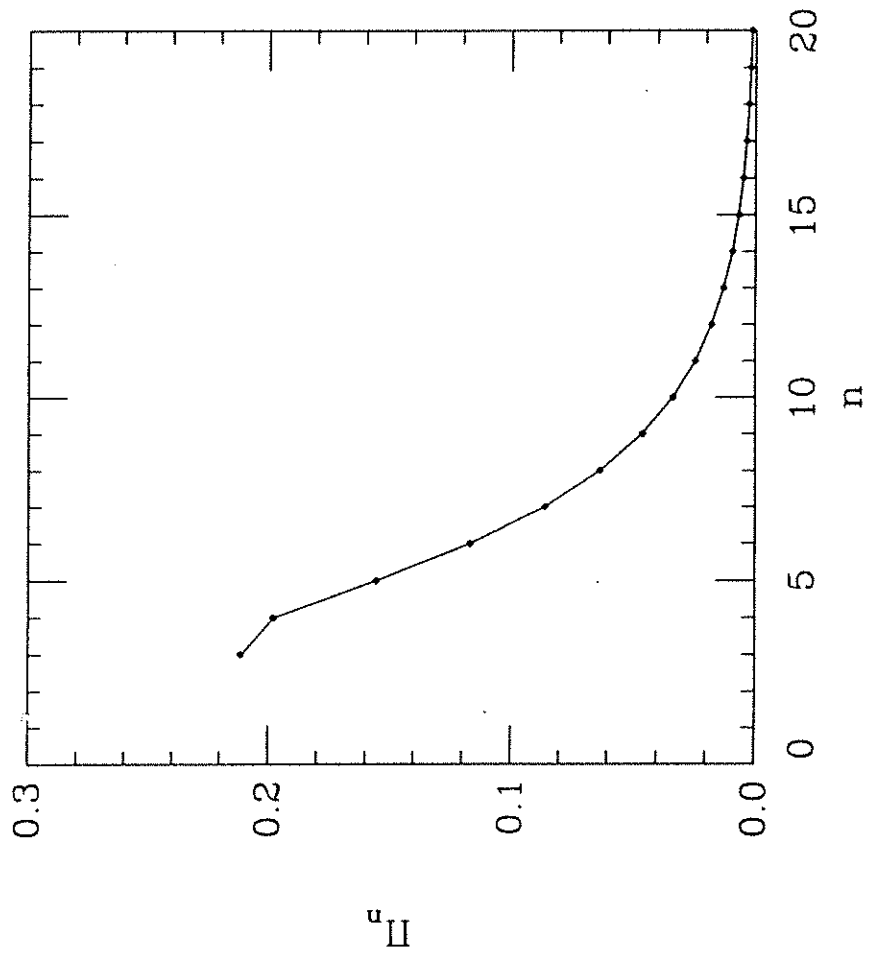


Figure 4a

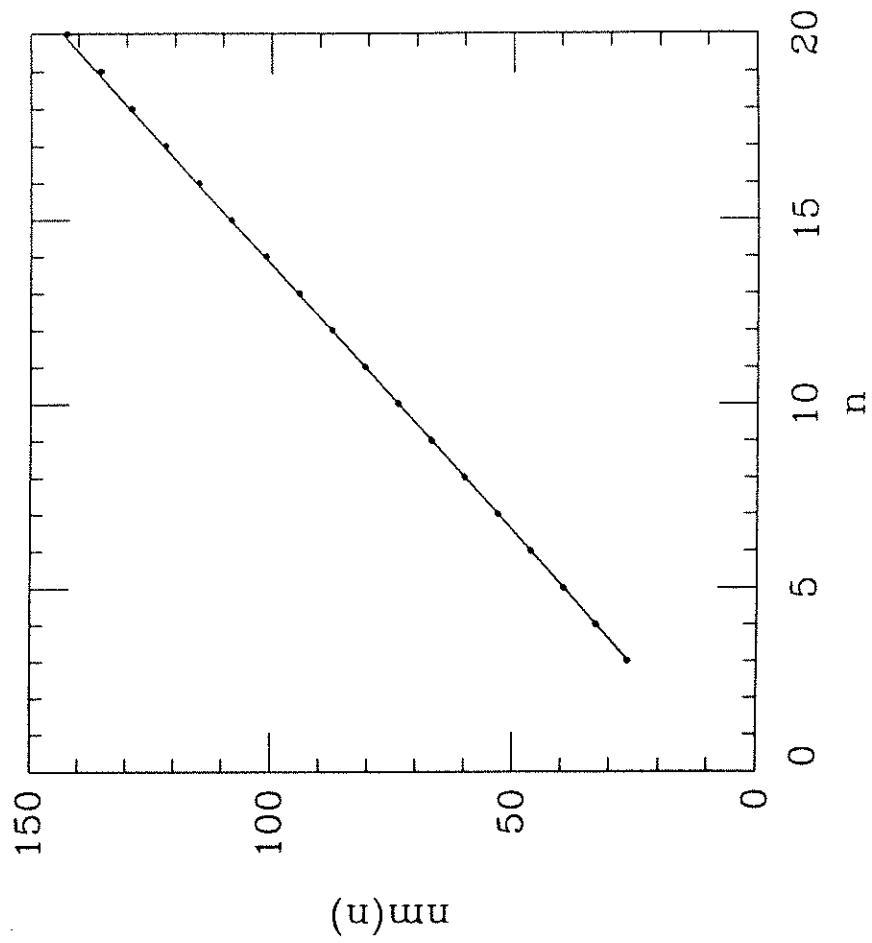


Figure 4b

2.8.3 Discussion

Le modèle de transformations topologiques T_1 amène le système dans un état d'équilibre statistique. Dans la dynamique du modèle, toutes les arêtes de la structure peuvent subir une transformation T_1 avec la même probabilité (sauf si une transformation est en contradiction avec les contraintes qui définissent l'ensemble). Par conséquent, toutes les configurations de l'ensemble ont la même probabilité d'être réalisées. Cet état d'équilibre est l'état le plus probable du système. Une des caractéristiques de cet état est la distribution du nombre des côtés des cellules. Il nous semble intéressant de comparer cette distribution avec la distribution d'entropie maximale, qui est elle-aussi la distribution la plus probable d'un ensemble défini par certaines contraintes.

La distribution P_n d'entropie maximale (voir la sous-section (2.2.3)), avec les contraintes de normalisation de la distribution, d'un nombre moyen de côtés des cellules égal à 6, et d'un nombre minimal de côtés égal à 3, est

$$P_n = \frac{16}{27} \left(\frac{3}{4}\right)^n. \quad (2.155)$$

Cette distribution, tracée dans la figure (2.42), est un résultat exact, mais il n'est pas clair si elle s'applique à un système réel ou à un modèle spécifique.

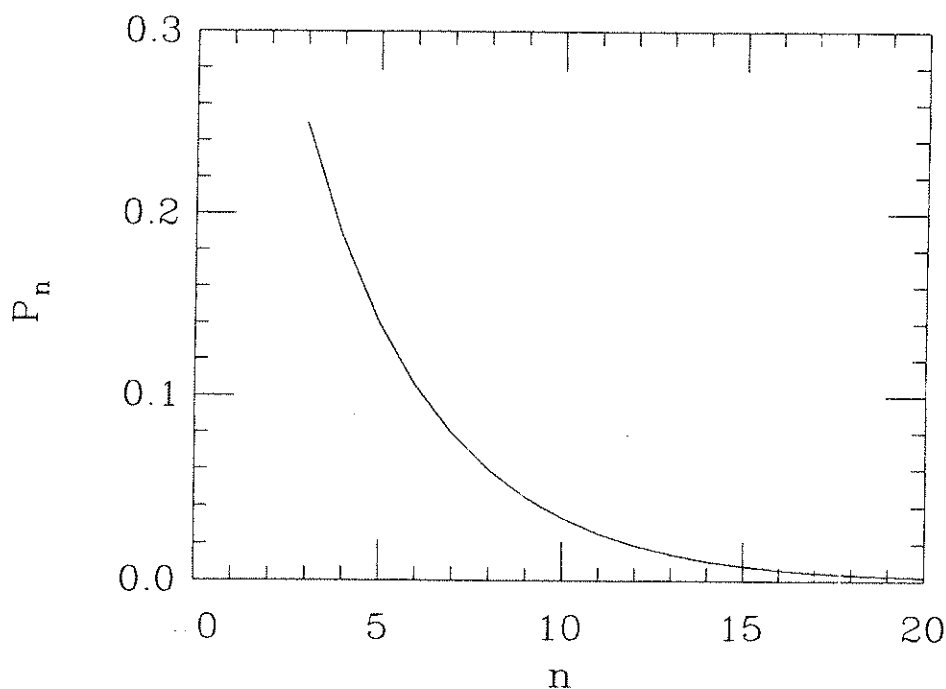


Figure 2.42 : Distribution d'entropie maximale du nombre de côtés des cellules P_n .

Nous l'avons comparée aux distributions du nombre de côtés des cellules de l'état d'équilibre du modèle de transformations T_1 pour trois ensembles différents

de configurations. Ces trois ensembles sont définis par un nombre minimal de côtés des cellules égal à 3, et par les types de diagrammes permises :

- (1) Des graphes sans termes de *self-energy* et sans *tadpoles*.
- (2) Des graphes avec des termes de *self-energy* mais sans *tadpoles*.
- (3) Des graphes avec des termes de *self-energy* et des *tadpoles*.

Le cas (1) correspond au calcul exact de la sous-section précédente. La distribution donnée par ce calcul est

$$P_n = 16 \left(\frac{3}{16} \right)^n \frac{(n-2)(2n-2)!}{n!(n-1)!}. \quad (2.156)$$

Elle est tracée dans la figure (2.43). Pour n grand elle se comporte comme

$$P_n \simeq \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{n}} \left(\frac{3}{4} \right)^n \quad (n \gg 1), \quad (2.157)$$

c'est-à-dire avec la même décroissance exponentielle que la distribution (2.155), au terme en $1/\sqrt{n}$ près.

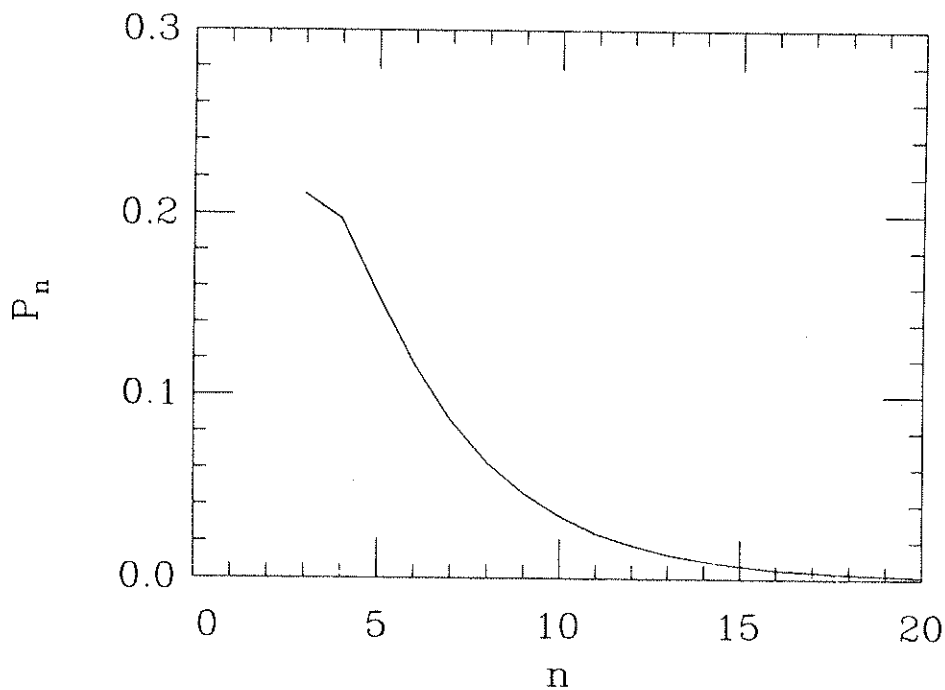


Figure 2.43 : Distribution du nombre de côtés des cellules P_n donnée par l'équation (2.156).

Les cas (2) et (3) ont été étudiés par des simulations du modèle de transformations T_1 . Dans les figures (2.44–45) nous avons tracé les distributions du nombre de côtés des cellules de l'état d'équilibre dans ces deux cas respectifs.

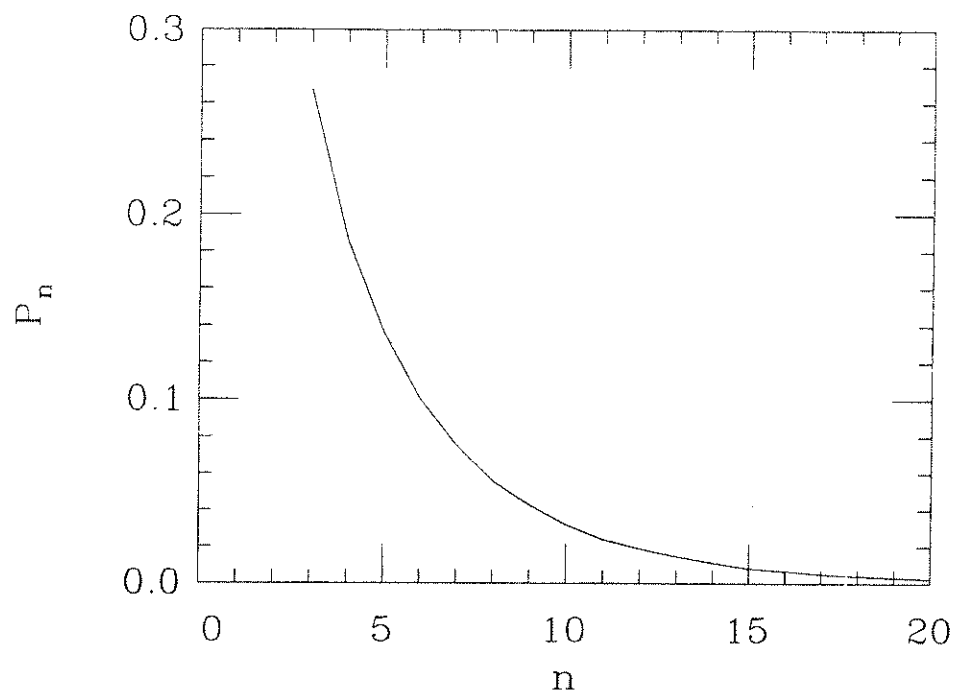


Figure 2.44 : Distribution du nombre de côtés des cellules P_n , résultant d'une simulation avec des termes de *self-energy* mais sans *tadpoles*.

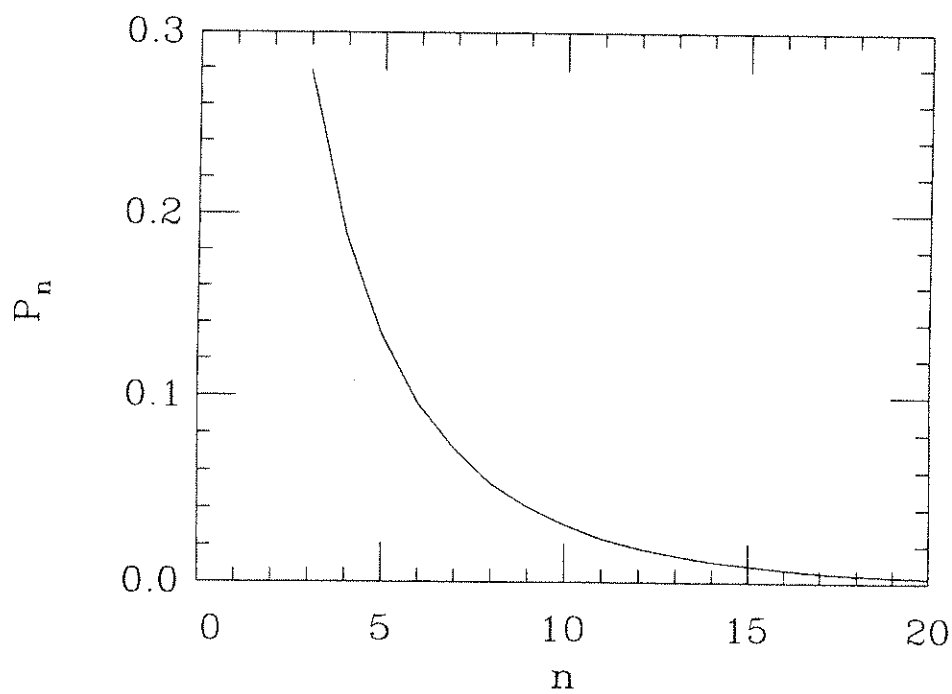


Figure 2.45 : Distribution du nombre de côtés des cellules P_n , résultant d'une simulation avec des termes de *self-energy* et des *tadpoles*.

Ces distributions sont plus proches de la distribution d'entropie maximale que ne l'est la distribution du cas (1). Les valeurs de μ_2 sont : 12 pour la distribution d'entropie maximale, 10.5 pour l'ensemble (1), 13.2 pour l'ensemble (2) et 14.3 pour l'ensemble (3).

Il faut reconnaître qu'une structure cellulaire est un système hautement corrélé, et qu'elle ne peut pas être caractérisée exclusivement par une distribution du nombre de côtés des cellules. La distribution d'entropie maximale, qui est déterminée seulement par ses deux premiers moments, ne peut servir qu'à titre d'approximation de premier ordre d'une structure cellulaire. Toutefois, il est remarquable que c'est une très bonne approximation des ensembles de structures cellulaires engendrés par les différentes variantes du modèle de transformations T_1 .

Nous voulons mentionner les travaux de Kikuchi [112] et Le Caër [113–114], qui ont étudié des modèles de structures cellulaires désordonnées. Ces structures sont obtenues par des perturbations effectuées sur des structures cellulaires régulières. Le Caër présente la solution exacte d'un de ses modèles. Avec les types de perturbations utilisés dans leurs modèles, les structures cellulaires obtenues restent toujours relativement ordonnées. Ces modèles ne peuvent produire qu'une fraction de l'ensemble des configurations possibles, que nous engendrons avec le modèle des transformations T_1 .

2.9 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude des structures cellulaires bidimensionnelles. Nous avons étudié plusieurs modèles. A travers ces différents exemples, nous avons cherché des propriétés communes, voire universelles, des structures cellulaires. Nous nous sommes intéressé particulièrement aux corrélations engendrées dans ces systèmes : des corrélations entre des propriétés métriques des cellules et leurs topologies, et surtout les corrélations entre les topologies des cellules voisines.

Nous avons étudié la dynamique des structures cellulaires évolutives par des méthodes variées. Nous avons effectué des simulations numériques de modèles déterministes et de modèles probabilistes. Bien que les équations d'évolution en champ moyen pour des distributions qui caractérisent les structures cellulaires ne soient que des approximations, elles servent à comprendre la manière dont ces systèmes tendent vers un état stationnaire ou vers l'équilibre. Nous avons calculé exactement, par des méthodes combinatoires de la théorie des champs, certaines propriétés topologiques de l'ensemble des diagrammes planaires de la théorie ϕ^3 . Cet ensemble est équivalent à l'ensemble des structures cellulaires aléatoires engendré, à l'équilibre, par le modèle de transformations topologiques T_1 .

Le calcul des propriétés topologiques de ce modèle est donc rendu possible par le fait que son évolution l'amène à un état d'équilibre. Par contre, la plupart des structures cellulaires évolutives, et notamment les différents exemples de croissance de domaines, sont des systèmes loin de l'équilibre. Une approche possible pour traiter ces systèmes peut être l'amélioration des théories de champ moyen par l'incorporation des corrélations. Dans les théories que nous avons abordées,

les objets en question étaient des cellules de topologie n donnée. De meilleures approximations peuvent être élaborées en considérant des paires de cellules voisines (avec une arête entre elles), ou encore des triplets de cellules voisines (avec un sommet entre les trois). Pourtant, il nous semble que cette voie n'est pas très prometteuse, puisque les théories du premier ordre sont déjà difficiles à résoudre.

A la lumière des études du chapitre présent, le modèle géométrique à une dimension, discuté dans la section (1.5), nous apparaît n'être qu'un modèle unidimensionnel de transformations topologiques T_2 : à une dimension, toutes les "cellules" ont deux côtés, et une coalescence de deux gouttes est équivalente à l'élimination d'une "cellule".

L'espace à une dimension est composé de simplexes –les paires de points voisins. Les simplexes à deux dimensions sont des triplets de points voisins, et la décomposition de l'espace est une triangulation. A trois dimensions, les simplexes sont des quadruplets de points voisins, et l'espace est décomposé en tétraèdres. Une généralisation possible du modèle géométrique unidimensionnel de la section (1.5), à toute dimension, est un modèle d'élimination de simplexes.

Un des grands défis de l'étude des structures cellulaires est d'aborder la théorie des structures tridimensionnelles. Ce sujet est extrêmement compliqué, tout d'abord par la difficulté de visualiser des structures cellulaires tridimensionnelles et de mesurer leurs propriétés. Par ailleurs, du point de vue topologique, une cellule à trois dimensions est caractérisée par deux variables : le nombre de ses faces et le nombre de ses côtés. Le théorème d'Euler à trois dimensions dit que le nombre de cellules N_C , le nombre de faces N_F , le nombre d'arêtes N_A et le nombre de sommets N_S sont liés par la relation

$$N_C - N_F + N_A - N_S = 0 . \quad (2.158)$$

A partir de cette équation, on peut calculer une relation entre le nombre moyen de faces par cellule $\langle f \rangle$, et le nombre moyen d'arêtes par cellule $\langle n \rangle$

$$\langle f \rangle = \frac{12}{6 - \langle n \rangle} . \quad (2.159)$$

Ces deux paramètres, $\langle f \rangle$ et $\langle n \rangle$, caractérisent une structure cellulaire. Ils sont liés par la relation (2.159) mais leurs valeurs ne sont pas les mêmes pour toutes les structures cellulaires tridimensionnelles.

Par analogie avec les transformations topologiques T_1 et T_2 à deux dimensions, des structures cellulaires tridimensionnelles peuvent aussi être modifiées par des transformations topologiques. Dans la figure (2.46), nous avons tracé deux exemples de transformations topologiques à trois dimensions : une transformation d'échange de voisinages, et une transformation d'élimination d'un tétraèdre. Ces transformations peuvent servir de base pour un modèle topologique à trois dimensions.

Des structures cellulaires tridimensionnelles peuvent être représentées par des diagrammes de Feynman d'une théorie des champs ϕ^4 , dessinés dans

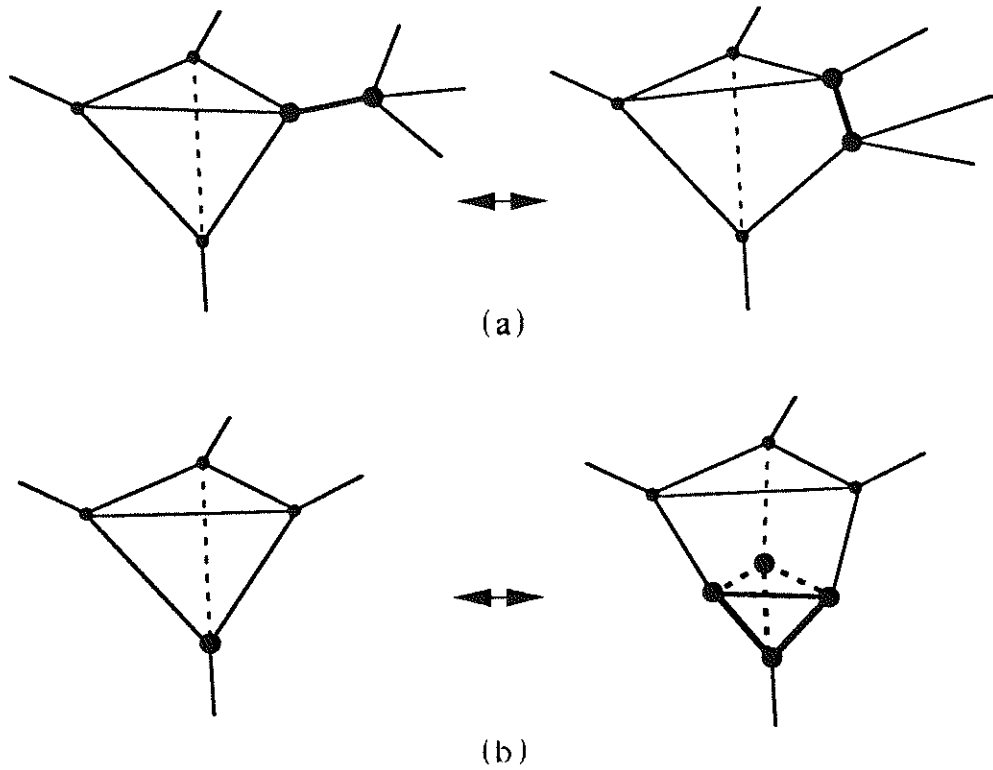


Figure 2.46 : Des transformations topologiques à trois dimensions : (a) d'échange de voisinage et (b) d'élimination d'un tétraèdre.

R^3 . Il serait très intéressant que l'étude des propriétés statistiques de tels diagrammes puisse apporter des résultats sur les propriétés des structures cellulaires tridimensionnelles.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] D.N. FRITTER, *Breath figures : The evolution of droplet patterns on surfaces through growth and coalescence*, PhD Thesis, UCLA, Los Angeles (1989).
- [2] A. STEYER, *Dynamique de la condensation et de l'évaporation des gouttes*, Thèse de Doctorat de l'Université Paris 6, Paris (1991).
- [3] D. BEYSENS ET C.M. KNOBLER, La formation de la buée, *La Recherche* **23**, 808 (1992).
- [4] J.L. VIOVY, D. BEYSENS AND C.M. KNOBLER, Scaling description for the growth of condensation patterns on surfaces, *Phys. Rev. A* **37**, 4965 (1988).
- [5] B.J. BRISCOE AND K.P. GALVIN, Growth with coalescence during condensation, *Phys. Rev. A* **43**, 1906 (1991).
- [6] A. STEYER, P. GUÉNOUN, D. BEYSENS, D. FRITTER AND C.M. KNOBLER, Growth on a one-dimensional surface : experiments and simulations, *Europhys. Lett.* **12**, 211 (1990).
- [7] D. BEYSENS, A. STEYER, P. GUÉNOUN, D. FRITTER AND C.M. KNOBLER, How does dew form ? *Phase Transitions* **31**, 219 (1991).
- [8] A. STEYER, P. GUÉNOUN, D. BEYSENS, D. FRITTER AND C.M. KNOBLER, Growth of droplets by diffusion and coalescence, *Phys. Rev. A* **44**, 8271 (1991).
- [9] P. MEAKIN AND F. FAMILY, Scaling in the kinetics of droplet growth and coalescence : heterogeneous nucleation, *J. Phys. A* **22**, L225 (1989).
- [10] P.G.J. VAN DONGEN AND M.H. ERNST, Scaling solutions of Smoluchowski's coagulation equation, *J. Stat. Phys.* **50**, 295 (1988).
- [11] D. FRITTER, C.M. KNOBLER, D. ROUX AND D. BEYSENS, Computer simulations of the growth of breath figures, *J. Stat. Phys.* **52**, 1447 (1988).
- [12] B. DERRIDA, C. GODRÈCHE AND I. YEKUTIELI, Stable distributions of growing and coalescing droplets, *Europhys. Lett.* **12**, 385 (1990).
- [13] B. DERRIDA, C. GODRÈCHE AND I. YEKUTIELI, Scale invariant regimes in one-dimensional models of growing and coalescing droplets, *Phys. Rev. A* **44**, 6241 (1991).
- [14] H. FLYVBJERG, communication privée.
- [15] P.J. GREEN AND R. SIBSON, Computing Dirichlet tessellations in the plane, *Comput. J.* **21**, 168 (1978).

- [16] A. RÉNYI, On a one-dimensional problem concerning random space filling, Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci. **3**, 109 (1958) [English translation in Selected Transl. Math. Prob. Stat. Prob. **4**, 203 (1963)].
- [17] B. WIDOM, Random sequential filling of intervals on a line, J. Chem. Phys. **44**, 3888 (1966).
- [18] B. WIDOM, Random sequential addition of hard spheres to a volume, J. Chem. Phys. **58**, 4043 (1973).
- [19] R.H. SWENDSEN, Dynamics of random sequential adsorption, Phys. Rev. A **24**, 504 (1981).
- [20] E. GARDNER, The contact density for a distribution of randomly packed spheres, J. de Phys. **10**, 1655 (1985).
- [21] H. REISS AND P. SCHAAF, Hard spheres : Thermodynamics and geometry, J. Chem. Phys. **91**, 2514 (1989).
- [22] G. TARJUS, P. SCHAAF AND J. TALBOT, Random sequential addition : A distribution function approach, J. Stat. Phys. **63**, 167 (1991).
- [23] J. LEMAITRE, J.P. TROADEC, A. GERVOIS AND D. BIDEAU, Experimental study of densification of disc assemblies, Europhys. Lett. **14**, 77 (1991).
- [24] P. MEAKIN AND R. JULLIEN, Two-dimensional defect-free random packing, Europhys. Lett. **14**, 667 (1991).
- [25] A.J. BRAY, Universal scaling function for domain growth in the Glauber-Ising chain, J. Phys. A **23**, L67 (1990).
- [26] D. BEN-AVRAHAM, M.A. BURSCHKA AND C.R. DOERING, Statics and dynamics of a diffusion-limited reaction : Anomalous kinetics, nonequilibrium self-ordering, and a dynamic transition, J. Stat. Phys. **60**, 695 (1990).
- [27] F.T. LEWIS, The correlation between cell division and the shapes and sizes of prismatic cells in the epidermis of *cucumis*, Anat. Record **38**, 341 (1928).
- [28] F.T. LEWIS, A comparison between the mosaic of polygons in a film of artificial emulsion and the pattern of simple epithelium in surface view (cucumber epidermis and human amnion), Anat. Record **50**, 235 (1931).
- [29] J.C.M. MOMBACH, M.A.Z. VASCONCELLOS AND R.M.C. DE ALMEIDA, Arrangement of cells in vegetable tissues, J. Phys. D **23**, 600 (1990).
- [30] M. TANEMURA AND M. HASEGAWA, Geometrical models of territory, J. Theor. Biol. **82**, 477 (1980).
- [31] R.A. FISCHER AND R.E. MILES, The role of spatial pattern in the competition between crop plants and weeds. A theoretical analysis, Mathematical Biosciences **18**, 335 (1973).
- [32] I.J. SMALLEY, Contraction crack networks in basalt flows, Geol. Mag. **103**, 110 (1966).

- [33] D. WEAIRE AND N. RIVIER, Soap, cells and statistics – Random patterns in two dimensions, *Contemp. Phys.* **25**, 59 (1984).
- [34] K.L. BABCOCK AND R.M. WESTERVELT, Elements of cellular domain patterns in magnetic garnet films, *Phys. Rev. A* **40**, 2022 (1989).
- [35] K.L. BABCOCK, R. SESHADRI AND R.M. WESTERVELT, Coarsening of cellular domain patterns in magnetic garnet films, *Phys. Rev. A* **41**, 1952 (1990).
- [36] K.L. BABCOCK AND R.M. WESTERVELT, Avalanches and self-organization in cellular magnetic-domain patterns, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2168 (1990).
- [37] C.H. DESCH, The solidification of metals from the liquid state, *J. Inst. Metals*, **22**, 241 (1919).
- [38] E.N. DA C. ANDRADE AND D.A. ABOAV, Grain growth in metals of close-packed hexagonal structure, *Proc. Roy. Soc.* **291A**, 18 (1966).
- [39] D.A. ABOAV AND T.G. LANGDON, The distribution of grain diameters in polycrystalline magnesium oxide, *Metallography* **1**, 333 (1969).
- [40] D.A. ABOAV AND T.G. LANGDON, The shape of grains in a polycrystal, *Metallography* **2**, 171 (1969).
- [41] S.K. KURTZ AND F.M.A. KARPAY, Microstructure and normal grain growth in metals and ceramics. Part I, *J. Appl. Phys.* **51**, 5725 (1980).
- [42] S.K. KURTZ AND F.M.A. KARPAY, Microstructure and normal grain growth in metals and ceramics. Part II, *J. Appl. Phys.* **51**, 5745 (1980).
- [43] V.E. FRADKOV, A.S.K. KRAVCHENKO AND L.S. SCHVINDLERMAN, Experimental investigation of normal grain growth in terms of area and topological class, *Scripta Metall.* **19**, 1291 (1985).
- [44] C.S. SMITH, Grain shapes and other metallurgical applications of topology, in *Metal Interfaces*, American Society for Metals, Cleveland, Ohio (1952).
- [45] C.S. SMITH, *Scientific American* **190**, 58 (1954).
- [46] J.A. GLAZIER, S. P. GROSS AND J. STAVANS, Dynamics of two-dimensional soap froths, *Phys. Rev. A* **36**, 306 (1987).
- [47] J.A. GLAZIER AND J. STAVANS, Soap froth revisited : dynamic scaling in the two-dimensional froth, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1318 (1989).
- [48] J.A. GLAZIER AND J. STAVANS, Nonideal effects in the two-dimensional soap froth, *Phys. Rev. A* **40**, 7398 (1989).
- [49] J. STAVANS, Temporal evolution of two-dimensional drained soap froths, to appear in *Phys. Rev. A*.
- [50] J.A. GLAZIER, M.P. ANDERSON AND G.S. GREST, Coarsening in the two-dimensional soap froth and the large-Q Potts model : a detailed comparison, *Phil. Mag. B* **62**, 615 (1990).

- [51] C.M. KNOBLER, Seeing phenomena in flatlands : studies of monolayers by fluorescence microscopy, *Science* **249**, 870 (1990).
- [52] J. LUCASSEN, S. AKAMATSU AND F. RONDELEZ, Formation, evolution and rheology of two-dimensional foams in spread monolayers at the air-water interface, *J. Colloid Interface Sci.* **144**, 434 (1991).
- [53] N. RIVIER, Statistical crystallography - Structure of random cellular networks, *Phil Mag. B* **52**, 795 (1985).
- [54] M.A. FORTES, Topological properties of cellular structures based on the staggered packing of prisms, *J. Physique* **50**, 725 (1989).
- [55] T. NAGAI, S. OHTA, K. KAWASAKI AND T. OKUZONO, Computer simulation of cellular pattern growth in two and three dimensions, *Phase Transitions* **28**, 177 (1990).
- [56] D.A. ABOAV, The arrangement of grains in a polycrystal, *Metallography* **3**, 383 (1970).
- [57] D.A. ABOAV, The arrangement of cells in a net, *Metallography* **13**, 43 (1980).
- [58] D.A. ABOAV, The arrangement of cells in a net, II, *Metallography* **16**, 265 (1983).
- [59] D.A. ABOAV, The arrangement of cells in a net, III, *Metallography* **17**, 383 (1984).
- [60] D.A. ABOAV, The arrangement of cells in a net, IV, *Metallography* **18**, 129 (1985).
- [61] M.A. PESHKIN, K.J. STRANDBURG AND N. RIVIER, Entropic predictions for cellular networks, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1803 (1991).
- [62] N. RIVIER AND A. LISSOWSKI, On the correlation between sizes and shapes of cells in epithelial mosaics, *J. Phys. A*, **15**, L143 (1982).
- [63] N. RIVIER, Topological correlations in random cellular structures, *J. Physique Coll.* **46**, C9-155 (1985).
- [64] N. RIVIER, Distributions of shapes and sizes by maximum entropy methods, *Ann. Isr. Phys. Soc.*, **8**, 560 (1986).
- [65] N. RIVIER, Structure of random cellular structures and their evolution, *Physica D* **23**, 129 (1986).
- [66] N. RIVIER, Statistical geometry of tissues, in I. Lamprecht and A. I. Zotin, eds., *Thermodynamics and Pattern Formation in Biology*, Walter de Gruyter & Co., Berlin/New York (1988).
- [67] N. RIVIER, Geometry and fluctuations of surfaces, *J. Physique Coll.* **51**, C7-309 (1990).
- [68] N. RIVIER, Geometry of random packings and froths, in D. Bideau and J. Dodds, eds., *Physics of Granular Media*, Nova Science, New York (1990).

- [69] N. RIVIER, Maximum entropy and equations of state for random cellular structures, in P. F. Fougère, ed., *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, Kluwer Academic, Boston/London (1990).
- [70] N. RIVIER, Structure and evolution of nano- and microcrystalline grain aggregates, to appear in P. Jena, S. N. K. Lenna and B. K. Rao, eds., Proc. Int. Conf. *From Clusters to Crystals*, Kluwer Academic, Boston/London (1992).
- [71] M. BLANC AND A. MOCELLIN, Grain coordination in plane sections of polycrystals, *Acta Metall.* **27**, 1231 (1979).
- [72] W.W. MULLINS, Two-dimensional motion of idealized grain boundaries, *J. Appl. Phys.* **27**, 900 (1956).
- [73] W.W. MULLINS, The statistical self-similarity hypothesis in grain growth and particle coarsening, *J. Appl. Phys.* **59**, 1341 (1986).
- [74] M.P. ANDERSON, D.J. SROLOVITZ, G.S. GRETT AND P.S. SAHNI, Computer simulation of grain growth – I. Kinetics, *Acta Metall.* **32**, 783 (1984).
- [75] D.J. SROLOVITZ, M.P. ANDERSON, P.S. SAHNI AND G.S. GRETT, Computer simulation of grain growth – II. Grain size distribution, topology and local dynamics, *Acta Metall.* **32**, 793 (1984).
- [76] C. JEPPESEN, H. FLYVBJERG AND O.G. MOURITSEN, Dynamics of ordering in highly degenerate models with anisotropic grain-boundary potential : Effects of temperature and vortex formation, *Phys. Rev. B* **40**, 9070 (1989).
- [77] C. JEPPESEN, O.G. MOURITSEN AND H. FLYVBJERG, Computer simulation of vortex formation during domain growth, *Physica Scripta* **T33**, 180 (1990).
- [78] J. VON NEUMANN, in *Metal Interfaces*, American Society for Metals, Cleveland, Ohio (1952).
- [79] D. WEAIRE AND J.P. KERMODE, Computer simulation of a two-dimensional soap froth, I. Method and motivation, *Phil. Mag. B* **48**, 245 (1983).
- [80] D. WEAIRE AND J.P. KERMODE, Computer simulation of a two-dimensional soap froth, II. Analysis of results, *Phil. Mag. B* **50**, 379 (1984).
- [81] J.P. KERMODE AND D. WEAIRE, 2D-FROTH : a program for the investigation of 2-dimensional froths, *Computer Physics Comm.* **60**, 75 (1990).
- [82] D. WEAIRE AND V. PAGERON, Frustrated froth : evolution of foam inhibited by an insoluble gaseous component, *Phil. Mag. Lett.* **62**, 417 (1990).
- [83] F. BOLTON AND D. WEAIRE, Rigidity loss transition in a disordered 2d froth, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3449 (1990).
- [84] D. WEAIRE AND H. LEI, A note on the statistics of the mature two-dimensional soap froth, *Phil. Mag. Lett.* **62**, 427 (1990).

- [85] C. ITZYKSON ET J.-M. DROUFFE, *Statistical Field Theory, vol. 2*, Cambridge University Press, Cambridge (1989).
- [86] D. WEAIRE, J.P. KERMODE AND J. WEJCHERT, On the distribution of cell areas in a Voronoi network, *Phil. Mag. B* **53**, L101 (1986).
- [87] H. HERMANN, H. WENDROCK AND D. STOYAN, Cell-area distributions of planar Voronoi mosaics, *Metallography* **23**, 189 (1989).
- [88] P.N. ANDRADE AND M.A. FORTES, Distribution of cell volumes in a Voronoi partition, *Phil. Mag. B* **58**, 671 (1988).
- [89] M. FATIMA VÁZ AND M.A. FORTES, Grain size distribution : the lognormal and the gamma distribution functions, *Scripta Metall.* **22**, 35 (1988).
- [90] B.N. BOOTS, The arrangement of cells in "random" networks, *Metallography* **15**, 53 (1982).
- [91] B.N. BOOTS, Further comment on "Aboav's Rule" for the arrangement of cells in a network, *Metallography* **18**, 301 (1985).
- [92] B.N. BOOTS, Edge length properties of random Voronoi polygons, *Metallography* **20**, 231 (1987).
- [93] H. TELLEY, *Modélisation et simulation bidimensionnelle de la croissance des polycristaux*, Thèse de Doctorat, EPFL, Lausanne (1989).
- [94] K. KAWASAKI, T. NAGAI AND K. NAKASHIMA, Vertex models for two-dimensional grain growth, *Phil. Mag. B* **60**, 399 (1989).
- [95] K. NAKASHIMA, T. NAGAI AND K. KAWASAKI, Scaling behavior in two-dimensional domain growth : computer simulation of vertex models, *J. Stat. Phys.* **57**, 759 (1989).
- [96] K. KAWASAKI, Aspects of late-stage dynamics of ordering processes, *Physica A* **163**, 59 (1990).
- [97] R.L. FULLMAN, Boundary migration during grain growth, in *Metal Interfaces*, American Society for Metals, Cleveland, Ohio (1952).
- [98] A. SOARES, A.C. FERRO AND M.A. FORTES, Computer simulation of grain growth in a bidimensional polycrystal, *Scripta Metall.* **19**, 1491 (1985).
- [99] M. FATIMA VÁZ, A. SOARES AND M.A. FORTES, Computer simulation of grain growth in a non-equiaxed polycrystal, *Scripta Metall. et Mater.* **24**, 2453 (1990).
- [100] H.V. ATKINSON, Theories of normal grain growth in pure single phase systems, *Acta Metall.* **36**, 469 (1988).
- [101] V.E. FRADKOV, L.S. SHVINDLERMAN AND D.G. UDLER, Computer simulation of grain growth in two-dimensions, *Scripta Metall.* **19**, 1285 (1985).

- [102] V.E. FRADKOV, L.S. SHVINDLERMAN AND D.G. UDLER, Short-range order in the arrangement of grains in two-dimensional polycrystals, *Phil. Mag. Lett.* **55**, 289 (1987).
- [103] C.W.J. BEENAKKER, Numerical simulation of a coarsening two-dimensional network, *Phys. Rev. A* **37**, 1697 (1988).
- [104] V.E. FRADKOV, A theoretical investigation of two-dimensional grain growth in the 'gas' approximation, *Phil. Mag. Lett.* **58**, 271 (1988).
- [105] V.E. FRADKOV, D.G. UDLER AND R.E. KRIS, Computer simulation of two-dimensional normal grain growth (the 'gas' approximation), *Phil. Mag. Lett.* **58**, 277 (1988).
- [106] H. FLYVBJERG AND C. JEPPESEN, A solvable model for coarsening soap froths and other domain boundary networks in two dimensions, *Physica Scripta* **T38**, 49 (1991).
- [107] M. MARDER, Soap-bubble growth, *Phys. Rev. A* **36**, 438 (1987).
- [108] C.W.J. BEENAKKER, Two-dimensional soap froths and polycrystalline networks : Why are large cells many sided ?, *Physica* **147A**, 256 (1987).
- [109] J. STAVANS, E. DOMANY AND D. MUKAMEL, Universality and pattern selection in two-dimensional cellular structures, *Europhys. Lett.* **15**, 479 (1991).
- [110] D.V. BOULATOV, V.A. KAZAKOV, I.K. KOSTOV AND A.A. MIGDAL, Analytical and numerical study of a model of dynamically triangulated random surfaces, *Nucl. Phys. B* **275**, 641 (1986).
- [111] E. BRÉZIN, C. ITZYKSON, G. PARISI AND J.-B. ZUBER, Planar Diagrams, *Commun. Math. Phys.* **59**, 35 (1978).
- [112] R. KIKUCHI, Shape distribution of two-dimensional soap froths, *J. Chem. Phys.* **24**, 861 (1956).
- [113] G. LE CAËR, Topological models of cellular structures, *J. Phys. A* **24**, 1307 (1991).
- [114] G. LE CAËR, Topological models of cellular structures : II. $z \geq 5$, *J. Phys. A* **24**, 4655 (1991).

FIGURES DE SOUFFLE ET STRUCTURES CELLULAIRES : ASPECTS GEOMETRIQUES DE LA CROISSANCE

Un certain nombre de systèmes, composés d'ensembles d'objets en croissance, possèdent, lors de leur évolution dans le temps, des caractéristiques communes et universelles. Pour tous ces systèmes, la taille des objets croît, mais leur nombre diminue. Aux grands temps, le système se dirige vers un régime d'échelle, dont la longueur caractéristique a une dépendance en temps en loi de puissance. Les propriétés géométriques de ces systèmes sont fortement liées à la contrainte de remplissage de l'espace par les ensembles d'objets.

La première partie du travail présenté dans cette thèse est consacrée à l'étude des figures de souffle. Celles-ci désignent des ensembles de gouttes formés par la condensation de la vapeur d'eau sur une surface partiellement mouillante. La croissance des gouttes est due à un apport continu de vapeur d'eau. Certains aspects de l'évolution des figures de souffle peuvent être décrits par des modèles d'agrégation d'amas. Ici nous nous sommes intéressés à la répartition spatiale des gouttes sur le substrat. Nous avons proposé des modèles purement géométriques – dans lesquels les gouttes sont représentées par des points – qui donnent une description simplifiée de l'évolution des figures de souffle. Nous avons résolu analytiquement ces modèles, dans le cas unidimensionnel. Nous avons étudié numériquement leur version bidimensionnelle.

La deuxième partie de la thèse porte sur l'étude de l'évolution de structures cellulaires bidimensionnelles. Nous avons étudié l'évolution temporelle et la statistique du "modèle de sommets", un modèle de croissance de domaines à parois rectilignes. Nous avons aussi étudié des modèles purement topologiques où seule la notion de voisinage entre cellules est retenue. Les règles de l'évolution temporelle de ces modèles sont données par des transformations topologiques élémentaires. Nous avons donné une version champ moyen de ces modèles. Nous terminons cette thèse par l'exposé d'un modèle topologique pour lequel la transformation topologique élémentaire qui gouverne la dynamique respecte le bilan détaillé. Le système atteint l'équilibre. Nous avons calculé analytiquement certaines propriétés statistiques de cet état d'équilibre.