



**HAL**  
open science

# Modélisation et chronologie approchée de l'auto-organisation d'agrégats atomiques déposés et analyse par la théorie des graphes de leurs arborescences fractales

Luca Hachani

► **To cite this version:**

Luca Hachani. Modélisation et chronologie approchée de l'auto-organisation d'agrégats atomiques déposés et analyse par la théorie des graphes de leurs arborescences fractales. Agrégats Moléculaires et Atomiques [physics.atm-clus]. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT : 2022UPASP076 . tel-04639081

**HAL Id: tel-04639081**

**<https://theses.hal.science/tel-04639081v1>**

Submitted on 8 Jul 2024

**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.

Modélisation et chronologie approchée de  
l'auto-organisation d'agrégats atomiques  
déposés et analyse par la théorie des  
graphes de leurs arborescences fractales

*Modelization and approximate chronology of the  
self-organization of deposited atomic aggregates and  
graph-theory analysis of their fractal trees*

**Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay**

École doctorale n°572 ondes et matière (EDOM)

Spécialité de doctorat : Physique

Graduate School : Physique, Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans l'unité de recherche **Laboratoire Aimé Cotton**  
(**Université Paris-Saclay, CNRS**), sous la direction de **Frédéric CARLIER**,  
chercheur CNRS

**Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 13 septembre 2022, par**

**Luca HACHANI**

**Composition du jury**

|   |                        |
|---|------------------------|
| <b>Jacques ROBERT</b><br>Professeur, Université Paris-Saclay                        | Président              |
| <b>Raphaël CHETRITE</b><br>Chercheur HDR CNRS, Université Nice Sophia-<br>Antipolis | Rapporteur & Examineur |
| <b>Pascal VIOT</b><br>Professeur, Université Sorbonne                               | Rapporteur & Examineur |
| <b>Laurence MASSON</b><br>Professeure, Université Aix-Marseille                     | Examinatrice           |
| <b>Frédéric CARLIER</b><br>Chercheur HDR CNRS, Université Paris-Saclay              | Directeur de thèse     |





**Titre :** Modélisation et chronologie approchée de l'auto-organisation d'agrégats atomiques déposés et analyse par la théorie des graphes de leurs arborescences fractales

**Mots clés :** Diffusion de Smoluchowski, Modèle DLA, Chronologie de processus irréversible, Théorie des graphes, Arborescences, Fractales Auto-Affines

**Résumé :** Cette thèse vise à caractériser les structures dendritiques obtenues expérimentalement par dépôts d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat. Au moyen de simulations numériques, l'auto-organisation et la morphologie de ces arborescences ont été modélisées et analysées.

La communauté des agrégats a d'ores et déjà bien établi les conditions expérimentales nécessaires à l'obtention de telles nano-structures, ainsi que les phénomènes physiques qui entrent en jeu lors de leurs élaborations. Dans la littérature, il a ainsi été démontré que l'énergie cinétique avec laquelle les agrégats atomiques percutent le substrat, détermine si oui ou non ces clusters peuvent diffuser à la surface de ce dernier. D'autre part cette communauté a bien identifié les processus, principalement responsables de la mobilité d'un corps à la surface d'un substrat. Bien que toujours liés à l'agitation thermique, les mécanismes expliquant le mouvement des agrégats atomiques et ceux à l'origine des déplacements d'adatoms possèdent entre eux des différences notables.

Le modèle DLA acronyme anglais pour "Diffusion Limited Aggregation" aura souvent été utilisé pour simuler la construction de ces structures obtenues à l'issue de dépôts d'agrégats atomiques. Or à l'origine les paramètres physiques, décrivant les conditions expérimentales de tels dépôts, n'intervenaient pas dans cet algorithme de type automate cellulaire. Ainsi un des enjeux de ce travail, a été d'intégrer ces paramètres au modèle DLA,

en construisant son équation maitresse à partir de l'équation de diffusion de Smoluchowski.

Actuellement aucun moyen expérimental ne permet de suivre l'évolution de l'auto-organisation d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat. Etant un phénomène irréversible, à partir d'une image capturée par microscopie d'un dépôt, il est impossible de reconstruire avec exactitude étape par étape les événements d'accrétion ayant abouti à l'élaboration des structures dendritiques observées. Néanmoins et cela suivant certaines conditions, nous avons réussi à approcher très fidèlement cette chronologie. Les agrégats atomiques ayant tendance à se fixer sur les défauts du substrat, cette approche pourrait notamment permettre de sonder le profil de ses plans cristallins.

La caractérisation morphologique de ces arborescences obtenues par dépôts d'agrégats atomiques ainsi que l'étude de leur auto-organisation occupent une place conséquente parmi les sujets de recherche dans ce domaine. Rarement employée par la communauté, la théorie des graphes propose des outils très performants lorsqu'il s'agit d'étudier en profondeur des réseaux comme ceux arborescents décrits par ces nano-structures. Ainsi au moyen d'outils à l'origine utilisés en hydrologie pour caractériser les réseaux fluviaux, nous avons réalisé une étude approfondie de la nature fractale et plus particulièrement du caractère auto-affine de ces arborescences.

**Title :** Modelization and approximate chronology of the self-organization of deposited atomic aggregates and graph-theory analysis of their fractal trees

**Keywords :** Smoluchowski diffusion, DLA model, Irreversible process chronology, Graph theory, Tree structure, Self-affinity fractals

**Abstract :** This thesis aims at characterizing the dendritic structures obtained experimentally by depositing atomic aggregates on the surface of a substrate. By means of numerical simulations, the self-organization and the morphology of these trees have been analyzed.

The community of aggregates has already well established the experimental conditions necessary to obtain such nano-structures, as well as the physical phenomena that come into play during their elaboration. In the literature, it has been demonstrated that the kinetic energy with which the atomic aggregates impact the substrate, determines whether or not these clusters can diffuse on the surface of the substrate. On the other hand, this community has well identified the processes, mainly responsible for the mobility of a body on the surface of a substrate. Although always linked to thermal agitation, the mechanisms explaining the movement of atomic aggregates and those at the origin of the displacement of adatoms have notable differences between them.

The DLA model, acronym for "Diffusion Limited Aggregation", has often been used to simulate the construction of these structures obtained from the deposition of atomic aggregates. But originally the physical parameters, describing the experimental conditions of such deposits, did not intervene in this algorithm of cellular automaton type. Thus

one of the challenges of this work was to integrate these parameters into the DLA model, by constructing its master equation from the Smoluchowski diffusion equation.

Currently, there is no experimental way to follow the evolution of the self-organization of atomic aggregates on the surface of a substrate. Being an irreversible phenomenon, from a microscopy image of a deposit, it is impossible to reconstruct with accuracy step by step the accretion events that led to the elaboration of the observed dendritic structures. Nevertheless, and this under certain conditions, we have succeeded in approximating this chronology very faithfully. As the atomic aggregates tend to be fixed on the defects of the substrate, this approach could allow to probe the profile of its crystal planes.

The morphological characterization of these trees obtained by deposition of atomic aggregates as well as the study of their self-organization occupy a significant place among the research topics in this field. Rarely used by the community, graph theory offers very powerful tools when it comes to study in depth networks such as those described by these nano-structures. Thus, by means of tools originally used in hydrology to characterize river networks, we have carried out an in-depth study of the fractal nature and more particularly the self-affine character of these trees.



"Quand le rêve brisé du vieux devient, le pire cauchemar du jeune rêveur" – Oxmo Puccino (Peur Noire)

"Not a battle of skills but a battle of wills" – Isiah Thomas (Detroit Pistons)



## Remerciements

Ils sont de ces souvenirs qui marquent et auxquels en repensant, on sourit. Ce sont ceux-ci que je vais rappeler pour dire ce que représentent pour moi ces « Merci ».

Merci à tous les étudiants à qui j'ai eu la chance d'enseigner la physique ou bien les mathématiques et cela que soit au sein de l'université Paris Saclay ou bien dans le cadre de cours particuliers. Dans les moments où je perdais espoir en mon projet de thèse, vous me donniez le sentiment d'être important pour vous et ainsi je me sentais beaucoup moins inutile et reprenais espoir en ma capacité à surmonter mes propres difficultés. J'ai adoré cette expérience et sans même le savoir vous tous m'avez grandement aidé à réussir ce travail.

Merci à Raphaël Hahn, Melvin Gerard, Clément Favey, pour leur amitié et la superbe conférence que nous avons organisé au sein de l'université Paris Saclay. Une expérience géniale dans laquelle j'ai pris plaisir à participer. Je te remercie tout particulièrement Clément d'avoir assuré la visio-conférence de ma soutenance de thèse et aussi de m'avoir embrigadé comme d'autres, dans ton projet pédagogique ayant pour but de vulgariser la physique pour les tous petits. J'en profite aussi pour remercier Amanda Trepagny de nous avoir facilité la vie administrativement et ainsi permis la réalisation de ce joli projet de vulgarisation.

Merci à l'université Paris Saclay, d'avoir financé mon projet de thèse et ainsi m'avoir permis en plus d'obtenir mon master, mon doctorat en physique.

Merci au département de physique de l'université Paris Saclay, en la personne de son président le Professeur Elias Khan, d'avoir pris en charge personnellement la gestion administrative du défraiement des membres de mon jury durant la période estivale.

Merci à la Professeure Odile Stefan, directrice de la graduate school de l'université Paris Saclay, de nous avoir aidé lors de la constitution de mon jury de thèse.

Merci au Professeur Emmanuel Trizac, vice-doyen Recherche de l'université Paris Saclay, de m'avoir consacré un peu de son temps notamment pour m'aider à augmenter la qualité de mon intervention lorsque je me préparais à soutenir ce projet de thèse.

Merci à la Professeure Véronique Benzaken, vice-présidente adjointe de l'université Paris Saclay, de m'avoir aidé à reprendre mon souffle lorsque j'avais la tête sous l'eau. Merci pour votre humanité et votre sens du devoir. Votre courage et communicatif. Je suis très chanceux de vous avoir rencontré.

Merci au Professeur Denis Boiron, directeur adjoint à l'école doctorale onde et matière, d'avoir pris le temps de m'écouter et de m'accompagner lors de mes deux dernières années de doctorat.

Merci au Professeur Jacques Robert, directeur adjoint du LPGP, d'avoir accepté de présider mon jury de thèse et s'être chargé de recevoir les membres de mon jury de thèse le jour de ma soutenance, mon directeur de thèse n'étant pas en mesure pour des raisons de santé évidente malheureusement de s'en charger lui-même.

Merci à la Professeure Laurence Masson, anciennement responsable au sein de l'université Aix-Marseille de ma Licence de physique, de m'avoir recommandé pour le magistère de physique fondamentale de l'université Paris Saclay et ainsi d'avoir participé à ce que durant ma soutenance, lors de la séance des questions du jury dont elle faisait partie, je finisse par lui poser une question à mon tour... désolé XD (cf remerciement pour ma mamie pour plus de détail du pourquoi du comment).

Merci au Professeur Pascal Viot, anciennement responsable au sein de l'université de la Sorbonne de mon Master 2 de physique, d'avoir pris le temps dans son bureau de m'expliquer des détails sur des simulations numériques qui m'échappent encore malheureusement et cela avec la conviction de vouloir mes camarades et moi nous amener tous à réussir nos examens à la fin du semestre. J'ai beaucoup de respect pour le scientifique que vous êtes évidemment, mais pas seulement, aussi pour l'homme. Et le fait que vous acceptiez de rapporter le contenu de ma thèse restera pour moi une grande fierté.

Merci au Docteur Raphaël Chetrite, d'avoir lui aussi accepté de rapporter mon travail de thèse et corriger un certaines erreurs restés présentes dans mon manuscrit avant sa supervision. Je vous connais un peu moins que le reste de mon jury, néanmoins j'ai été honoré de votre présence dans mon jury de thèse.

Merci à toi Frédéric Carlier d'avoir conservé en moi ta confiance et cela même sous la pression. Tu as fait tout ce que tu étais en mesure de pouvoir faire. Comme moi tu as une mère courage Evelyne Carlier que je remercie aussi pour son soutien indéfectible et qui me rappelle ma mère par beaucoup d'aspects. Comme elle, tu partages le sens de l'empathie et de ce qui est juste. Je voudrais que cette thèse résonne en toi comme une insulte au désespoir.

Merci à toi Pierre Billaud d'avoir sans attendre quoique ce soit en retour choisi de m'encadrer ces 6 derniers mois et cela en dépit des difficultés. Merci pour tes corrections en « vacancier » de ce manuscrit, pour m'avoir aidé à constituer mon jury et construire ma soutenance de thèse, pour ton soutien moral, pour tes conseils, pour ton amitié. Tu es rare car malgré les difficultés que l'on t'a donné à vivre, tu continues à offrir aux autres ta confiance et à investir les cœurs. Il faut de la force pour persister dans cette voie, plus que ça du courage.

Merci à toi Sakina Benrezzak d'avoir compris ma peine et pris sur toi pour m'aider à tenir bon. Intelligente et sensible, tu ne manques pas de courage dans ta vie et tes choix. Toi et tes enfants méritaient le meilleur, ni plus ni moins.

Merci à mes amis de m'avoir soutenu dans cette épreuve. Je pense à toi Florian Dattiches qui du bout du monde aura utilisé de la bande passante pour m'envoyer des articles et vidéos bien cringés en réponse aux miennes, toutes ces fois où on s'est ouvert des petites « binche » pour célébrer mon retour annuel dans le sud accompagné de kebabs avariés une fois sur deux. Mais je pense aussi à notre enfance et toutes les dingeries que tu m'as fait croire toi l'extra-terrestre. Je pense à toi Bachir Meloult, notamment à ce hamster malheureux dont tu n'as cessé de me raconter l'histoire tant tu étais ému par son destin funeste, toi qui ressembles beaucoup à notre grand-oncle lui aussi ami des bêtes incompris. Je pense à toi Christophe Capeau qui va bientôt être papa de la petite Giulia ma filleule et notamment à ta mère Cathy pour qui tu sais, j'aurai toujours une pensée toute particulière.

Merci à mon grand-père Léo Gabbrielleschi, de m'avoir communiqué sa pugnacité et le goût des choses bien faites ainsi que son désir de toujours vouloir progresser. Merci à ma grand-mère Simone Gabbrielleschi, qui m'aura gâté et passée d'innombrables heures à écouter ce que petit-garçon j'avais à lui dire, la pauvre... Avec cette question rémanente du pourquoi qui ponctuait toutes mes réflexions et finalement encore aujourd'hui. Elle aura été mon premier cobaye... Merci à mon oncle Thierry Gabbrielleschi qui m'aura toujours encouragé et soutenu à pratiquer un sport et ainsi appréhender mes limites physiques et mentales lors des compétitions auxquels j'ai participé. Je remercie le FCCB ainsi que l'USPEG de Marseille de m'avoir donné le goût pour le dépassement et la solidarité ; mais surtout de m'avoir offert pour la première fois le sentiment d'être responsabilisé dans une entreprise collective.

Merci à mes parents, Nadine Bureau, Abdelrezak Hachani et Pierre Bureau, pour m'avoir éduqué et soutenu autant moralement que financièrement tout au long de ma vie. Je remercie tout particulièrement ma mère de m'avoir consacré son temps, afin de me donner les meilleures chances de réussite dans la vie. Un choix non sans sacrifice sur sa vie de femme, mais qui aura je l'espère produit un résultat qui te plaît maman. Je souhaite à tout enfant d'avoir une mère comme elle, mettant absolument tout en œuvre pour qu'il puisse exprimer son plein potentiel. Tu es mon modèle de parentalité, la barre est haute. Je voudrais remercier Pierre Bureau, le mari de ma mère, qui comme un second père aura tout fait pour m'aider à grandir. Tu es un être doux et fidèle que je chéris comme un père. À mon sens tu es autant légitime. Je remercie aussi mon père qui m'a toujours montré qu'il m'aimait et était fier de moi et qui je pense m'aura transmis son ingéniosité et ses problèmes de transit.

Merci à ma compagne Chloé Azria de m'avoir supporté, et cela dans tous les sens du terme. Durant ces 5 ans, même au plus fort de la tempête, tu es restée à mes côtés. Sans même apercevoir l'ombre d'une éclaircie dans nos vies, tu as persisté dans ta volonté de m'accompagner tout au long de ce combat. Je ne sais pas ce qui te meut, sûrement plus que de l'amour. Sans toi ce manuscrit n'existerait sûrement pas, sinon avec beaucoup de fautes d'orthographe.

Enfin, Merci à tous ceux qui m'ont honoré de leur présence le jour de ma soutenance de thèse de Doctorat et qui, avec les précédents, en ont fait un de ces souvenirs qui marquent et auxquels en repensant, on sourit.

# Table des matières

|  |             |
|--|-------------|
|  | <b>v</b>    |
| <b>Remerciements</b>   | <b>vii</b>  |
| <b>Introduction</b>  | <b>xiii</b> |
| <b>1 Géométrie et dimensions fractales</b>   | <b>1</b>    |
| 1.1 Mesure et dimension de Hausdorff   | 1           |
| 1.1.1 Quelques rappels sur la théorie des ensembles  | 1           |
| 1.1.2 Distribution de masse et Mesure  | 5           |
| 1.1.3 Mesure de Hausdorff  | 6           |
| 1.1.4 Distance entre sous-ensembles compacts et fermés d'un même ensemble  | 7           |
| 1.1.5 Dimension de Hausdorff   | 8           |
| 1.2 Fractales ou ensembles construits par une procédure itérative  | 9           |
| 1.2.1 Construction d'une fractale à partir d'un motif initial  | 9           |
| 1.2.2 Classes de fractales   | 12          |
| 1.3 Dimension de Bouligand-Minkowski   | 12          |
| 1.3.1 Box counting   | 13          |
| 1.3.2 Application sur des images expérimentales  | 16          |
| 1.4 Fractales auto-similaires  | 18          |
| 1.4.1 Méthode heuristique pour calculer la dimension de Hausdorff  | 18          |
| 1.4.2 La dimension de Hausdorff équivalente à la dimension de Bouligand Minkowski pour les fractales auto-similaires | 20          |
| 1.4.3 Exemple de fractales auto-similaires   | 22          |
| 1.5 Fractales auto-affines   | 25          |
| 1.5.1 Transformations affines  | 25          |
| 1.5.2 Exemples de fractales auto-affines   | 27          |
| 1.6 Courbes fractales  | 29          |
| 1.6.1 Exposant de Hurst  | 30          |
| 1.6.2 Décompositions en ondelettes   | 32          |
| 1.6.3 Exemples de courbes fractales auto-affines   | 37          |
| <b>2 Dépôts d'agrégats atomiques et diffusion de surface</b>   | <b>39</b>   |
| 2.1 Diffusion d'adatoms à la surface d'un substrat   | 39          |
| 2.1.1 Mécanisme de diffusion des adatoms à la surface de leur substrat   | 39          |
| 2.1.2 Équation régissant la diffusion des adatoms à la surface du substrat   | 45          |
| 2.1.3 Nature de la diffusion des adatoms à la surface du substrat  | 46          |
| 2.2 Diffusion d'îlots atomiques à la surface d'un substrat   | 49          |
| 2.2.1 Mécanismes de diffusions individuelles des adatoms constituant un îlot   | 51          |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| 2.2.2    | Mécanismes de diffusions collectives des adatoms constituant un îlot . . . . .   | 52         |
| 2.3      | Dépôts d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat . . . . .   | 54         |
| 2.3.1    | Dépôts d'agrégats atomiques à haute énergie cinétique . . . . .  | 54         |
| 2.3.2    | Dépôts d'agrégats atomiques à basse énergie cinétique . . . . .  | 55         |
| 2.4      | Diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat . . . . .  | 57         |
| 2.4.1    | Résultats expérimentaux . . . . .  | 58         |
| 2.4.2    | Résultat théorique . . . . .   | 59         |
| <b>3</b> | <b>Simulations de structures dendritiques d'agrégats atomiques auto-organisés</b>  | <b>65</b>  |
| 3.1      | Modélisation de l'auto-organisation d'agrégats atomiques à l'issue de leurs diffusions à la surface d'un substrat . . . . .          | 65         |
| 3.1.1    | Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions ou "Diffusion Limited Aggregation" . . . . .                                  | 65         |
| 3.1.2    | Détermination de la probabilité de saut d'une particule libre dont le mouvement est régi par une équation de Fokker-Planck . . . . . | 73         |
| 3.1.3    | Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions en présence d'un champ de force   | 81         |
| 3.2      | Chronologies de processus irréversibles . . . . .  | 85         |
| 3.2.1    | Fractales Laplaciennes . . . . .   | 85         |
| 3.2.2    | Chronologie des évènements ayant abouti à la construction d'une structure dendritique de type DLA . . . . .                          | 92         |
| <b>4</b> | <b>Outils de la théorie des graphes</b>  | <b>105</b> |
| 4.1      | Graphes . . . . .  | 105        |
| 4.1.1    | Généralités à propos des graphes . . . . .   | 105        |
| 4.1.2    | Outils et méthodes de base pour l'étude des graphes . . . . .  | 107        |
| 4.1.3    | Liste non exhaustive de classes de graphes . . . . .   | 111        |
| 4.2      | Arbres et forêts . . . . .   | 113        |
| 4.2.1    | Généralités sur les arbres et les forêts . . . . .   | 113        |
| 4.2.2    | Outils et méthodes de base pour l'étude des arbres et des forêts . . . . .   | 117        |
| 4.2.3    | Arbres aléatoires . . . . .  | 119        |
| 4.3      | Hypergraphes . . . . .   | 122        |
| 4.3.1    | Généralités sur les hypergraphes . . . . .   | 122        |
| 4.3.2    | Outils et méthodes de base pour l'étude des hypergraphes . . . . .   | 124        |
| <b>5</b> | <b>DLA : un processus de branchement fractale auto-affine</b>  | <b>127</b> |
| 5.1      | DLA : modèle à l'origine de la création d'arbres aléatoires particuliers . . . . .   | 127        |
| 5.1.1    | DLA un processus générant des arbres enracinés du point de vue de la théorie des graphes . . . . .                                   | 127        |
| 5.1.2    | DLA un processus sans vieillissement . . . . .   | 127        |
| 5.1.3    | L'arbre de type DLA n'est pas un arbre de Galton-Watson . . . . .  | 128        |
| 5.1.4    | DLA un processus de branchement particulier . . . . .  | 131        |
| 5.2      | Ordres des cours d'eau . . . . .   | 139        |
| 5.2.1    | Ordre des cours d'eau classique . . . . .  | 141        |

|       |   |            |
|-------|---|------------|
| 5.2.2 | Ordre de Strahler . . . . .   | 141        |
| 5.3   | L'arbre de type DLA : une arborescence fractale statistique hétérogène auto-affine . . . . .            | 144        |
| 5.3.1 | Hiérarchisations des chaînes d'une arborescence DLA suivant l'ordre de Strahler . . . . .               | 144        |
| 5.3.2 | Hiérarchisations des branches d'une arborescence par la mesure de leurs abscisses curvilignes . . . . . | 147        |
|       | <b>Conclusion générale</b>  | <b>163</b> |



## Introduction

L'étude des agrégats atomiques, composés de dizaines voire des milliers d'atomes métalliques ou faisant partie des métalloïdes, aura fait l'objet de nombreux travaux ces trente dernières années. Que cela soit en phase vapeur<sup>1</sup> ou en solution<sup>2</sup>, de nombreuses équipes auront proposé des méthodes expérimentales permettant l'élaboration de tels clusters. Ainsi au travers de ces différentes méthodes, des caractéristiques comme : la forme, la charge électrique ainsi que la distribution de tailles de ces agrégats atomiques, pourront être pilotées par l'expérimentateur. L'intérêt porté à ces objets physiques réside notamment dans le fait que ces derniers possèdent un très bon rapport "surface sur volume" et donc un potentiel chimique élevé. En les laissant s'auto-organiser à la surface d'un substrat, sous la forme de structures dendritiques nanoscopiques comme dans [3], leurs propriétés physico-chimiques seront décuplées. En effet, contrairement à l'état massif duquel ces clusters pourraient être issus, l'excellent rapport "surface sur volume" sera conservé par ces structures ramifiées à la géométrie fractale. Dans son travail de thèse [118], portant notamment sur les propriétés de mouillage observées pour différents films métalliques électrodéposés, Yanpeng Xue explique que ce bon rapport peut être exploité lors de l'élaboration de surfaces super-hydrophobes. D'un point de vue applicatif ces films rugueux à l'échelle nanométrique, permettraient notamment la conception de revêtements auto-nettoyants. Pour obtenir les arborescences décrites dans [3], ces clusters devront d'ores et déjà être déposés à la surface d'un substrat : soit par ICB<sup>3</sup> "ionized cluster beam", soit par ECI<sup>4</sup> "energetic cluster impact". D'après [32], l'énergie cinétique des agrégats atomiques définira alors un paramètre capital dans ces expériences de dépôts. Si l'on veut conserver la forme initiale des agrégats atomiques au moment de leurs impacts avec le substrat, les dépôts devront s'effectuer à basse énergie cinétique  $\simeq 0.1$  eV/atome. Dans ces conditions on parle alors de LECBD acronyme anglais pour "low energetic clusters beam deposition". A cela, d'après [50], il faut rajouter la tendance des petits clusters (composés seulement de cinq à dix atomes) à coalescer et dès lors perdre leurs formes initiales. Ainsi le contrôle sur la distribution de tailles des agrégats atomiques déposés conditionne aussi l'obtention de structures ramifiées à la surface d'un substrat.

La modélisation de ces structures dendritiques ainsi que la caractérisation de leurs morphologies/géométries définissent les principaux enjeux de ce mémoire de thèse. Celui-ci est compartimenté en différents chapitres. Certains comme les chapitres 1, 2 et 4 seront bibliogra-

---

1. [9] et [96] décrivent tous deux des modules expérimentaux à l'origine de la formation d'agrégats atomiques en phase vapeur.

2. [81] et [1] sont des protocoles expérimentaux de synthèses d'agrégats atomiques par voie chimique. En revanche [107] correspond au modèle théorique décrivant le plus fidèlement possible ce qu'il se passe au sein de ces solutions. Ce dernier est basé sur l'équation de coagulation de Smoluchowski et le potentiel de DLVO (Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek), approximation des interactions pouvant exister entre ces particules colloïdales.

3. Décrite dans [121], la méthode ICB possède cependant un défaut majeur, celui de produire des agrégats atomiques de très petites tailles, voire parfois aucun d'après [105].

4. La méthode ECI est présentée dans [33].

phiques, tandis que les chapitres 3 et 5 exposeront quant à eux les résultats que nous aurons obtenus durant ce travail de thèse.

Dans le chapitre 1 : "Géométrie et dimensions fractales", nous développerons différents concepts ayant trait à la géométrie fractale. Dans ce chapitre assez formel, nous aurons pris soin de définir très rigoureusement la dimension de Hausdorff ainsi que la dimension de Bouligand-Minkowski. Deux dimensions incontournables lorsqu'il s'agit d'évaluer celle non-entière d'un objet à la géométrie fractale. Nous exposerons aussi les différentes classes de fractales (uniformes vs non uniformes, déterministes vs statistiques) ainsi que leurs natures (fractales auto-similaires ou fractales auto-affines). A la fin de ce chapitre nous nous concentrerons sur les courbes fractales, des courbes particulières qui seront largement utilisées dans le chapitre 5, et notamment sur l'ensemble des outils à notre disposition pour les caractériser (exposant de Hurst et décompositions en ondelettes).

Ensuite au sein du chapitre 2 : "Dépôts d'agrégats atomiques et diffusion de surface", comme le titre de ce chapitre le laisse à penser, nous nous attacherons à faire la synthèse de l'ensemble des travaux ayant permis la production de structures dendritiques composées d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat. Afin de mieux appréhender la physique décrivant la diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat, nous commencerons tout d'abord par rappeler les mécanismes à l'origine des sauts d'atomes adsorbés, ainsi que ceux pouvant expliquer la diffusion d'îlots ou agrégats bidimensionnels à la surface de différents plans cristallins. Ainsi ces mécanismes individuels ou collectifs, décrits pour ces clusters "moins complexes", seront les mêmes que l'on retrouvera durant la diffusion d'agrégats atomiques tridimensionnels. Nous aurons aussi fait un point sur les conditions de dépôts nécessaires à l'obtention de ces arborescences nanométriques; les mêmes conditions qui ont été évoquées au début de cette introduction.

Le chapitre 3 : "Simulations de structures dendritiques d'agrégats atomiques auto-organisés" quant à lui exposera notre modélisation de l'auto-organisation d'agrégats atomiques à l'issue de leurs diffusions à la surface d'un substrat. Ainsi pour nos simulations, nous aurons choisi d'adopter le modèle de Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions "Diffusion limited aggregation" en anglais. La DLA est un modèle à l'origine conçu pour modéliser l'accrétion de particules colloïdales [74] et qui fonctionne aussi très bien pour simuler l'auto-organisation d'agrégats atomiques ayant été déposés à faible couverture à la surface d'un substrat. Dans le cadre de ce travail, nous aurons développé un algorithme de type DLA hors réseau, pour lequel les mouvements erratiques des particules libres à la surface du domaine de simulation seront régis par l'équation de diffusion de Smoluchowski. Cette équation, grâce à son terme de dérive, aura permis aux particules libres de percevoir les effets sur leurs mouvements de la présence d'un champs de force. Notre algorithme hors réseau, adapté de celui de K.R Kuijpers *et al.* dans [55], nous aura lui aussi affranchi de l'influence sur la morphologie des structures dendritiques qu'aura la nature d'un réseau sous-tendant le domaine de simulation<sup>5</sup>. On terminera ce cha-

---

5. La morphologie moyenne des structures dendritiques sont nettement influencées par la nature du réseau sur lequel a pris place leurs constructions. Dans [71] P. Meakin met en évidence cette influence et cela pour des arborescences dont les croissances auront été simulées à la surface de différents types de réseaux. De même A.Y. Menshutin et L.N. Shchur, dans [77], démontrent aussi que ces effets persistent pour le réseau hexagonal

pitre en proposant une méthode permettant d'approcher la chronologie des événements ayant abouti à la construction d'une arborescence obtenue par DLA. Or pour l'heure expérimentalement les clichés des structures dendritiques obtenues par dépôts d'agrégats atomiques sont réalisés soit par microscopies électroniques, soit par microscopies en champ proche et dans les deux cas ne peuvent être capturés qu'à l'issue du dépôt. Dès lors si la DLA modélise bien ce qui se passe lors de ces dépôts, alors la méthode que nous proposons, permettra aussi d'approcher la suite des événements ayant abouti à l'auto-organisations de ces agrégats en arborescences.

Par la suite le chapitre 4 : "Outils de la théorie des graphes", constituera une synthèse non-exhaustive des outils que nous offre la théorie des graphes lors de l'étude de réseaux complexes. Ce chapitre, en vue du suivant, permettra de définir au préalable de nombreux concepts qui nous seront utiles. Nous aurons commencé par définir un certain nombre de généralité à propos des graphes et les différentes notions qui leur sont attachées. Ensuite nous nous serons intéressés plus précisément à une sous-catégorie de graphes : les arbres. Nous exposerons alors les outils et méthodes de base pour l'étude des arbres et des forêts et définirons ce que sont les arbres aléatoires. Ces arbres revêtiront un intérêt tout particulier lorsque dans le chapitre 5, nous ferons le constat que la DLA est un modèle à l'origine de la création d'arbres aléatoires particuliers. A la fin de ce chapitre nous énoncerons quelques généralités sur les hypergraphes. Pouvant assortir plus qu'une paire de noeuds à leurs hyperliens, ces derniers pourront parfois faciliter la lecture de leurs graphes hôtes.

Enfin dans le chapitre 5 : "DLA : un processus de branchement fractale auto-affine", nous verrons tout d'abord que la DLA bien que sans vieillissement est un processus stochastique à l'origine de la création d'arbres aléatoires différents de ceux que l'on obtiendrait grâce au processus de branchement Galton-Watson. Par la suite nous analyserons de manière très approfondie la nature fractale des arborescences obtenues par DLA. Nous verrons que pour analyser leurs motifs, considérer ces structures dendritiques comme des arbres enracinés du point de vue de la théorie des graphes s'avèrera très utile. En effet nous pourrons ainsi hiérarchiser leurs branches grâce aux ordres des cours d'eau, des outils initialement imaginés pour ordonnancer les différents affluents interconnectant un réseau fluvial. En étudiant alors les distributions des abscisses curvilignes de branches d'un ordre de Hack donné et portées par une même chaîne rencontrant une terminaison ; on constatera que ces dernières sont analogues les unes aux autres par transformation affine. En convertissant ces embranchements en courbes fractales, puis en décomposant ces courbes en ondelettes, on sera en mesure de calculer leur exposant de Hurst et ainsi de déterminer avec une très grande précision les variations existantes entre une structure dendritique ayant subi un champ de force ou non durant sa construction.

La conclusion générale récapitulera et dressera la synthèse des différents résultats importants parant les chapitres de ce manuscrit. Par ailleurs, des perspectives à ce travail seront proposées, notamment en ce qui concerne chacun des derniers résultats exposés dans les chapitres 3 et 5.



# 1 - Géométrie et dimensions fractales

Afin de décrire l'ensemble des concepts exposés dans ce chapitre, nous nous sommes librement inspirés des ouvrages suivants : "Fractal Geometry de Kenneth" John Falconer [22] et "Physics and fractal structures" de Jean François Gouyet [30] dont la traduction en français existe et est disponible sur son site [jfgouyet.fr](http://jfgouyet.fr).

## 1.1 . Mesure et dimension de Hausdorff

### 1.1.1 . Quelques rappels sur la théorie des ensembles

"Par ensemble, nous entendons toute collection  $X$  d'objets  $x$  de notre intuition ou de notre pensée, définis et distincts, ces objets étant appelés les éléments de  $M$ " est une définition proposée par le mathématicien Georg Cantor à qui l'on doit notamment les ensembles de Cantor, des ensembles fractaux, nous y reviendrons plus tard dans la sous-section 1.4.3. Traduite de l'allemand, cette définition provient de son article [11] et vise donc à expliquer ce qu'est un ensemble en mathématiques. Généralement on note un ensemble entre crochet et il existe deux méthodes pour le définir : par extension ce qui revient à lister un à un tous les éléments qu'il contient ou bien par compréhension c'est à dire à l'aide d'une proposition mathématique. Ci-dessous, un ensemble défini par extension et par compréhension :

$$\{1, 2, 3\} \iff \{n \in \mathbb{N} \mid 1 \leq n \leq 3\}$$

### Le sous-ensemble

On dit que  $F$  est un sous-ensemble (une partie) de l'ensemble  $E$  ou alors que  $F$  est inclus dans  $E$  noté  $F \subset E$ , si l'on retrouve l'ensemble des éléments de  $F$  parmi ceux contenus par l'ensemble  $E$ .

### L'ensemble des parties d'un ensemble

On peut définir pour un ensemble  $E$ , les ensembles notés  $\mathcal{P}(E)$  construits à partir de sous-ensembles de l'ensemble  $E$ .  $\mathcal{P}(E)$  est donc lui-même un ensemble, cependant il est important de remarquer que  $\mathcal{P}(E) \not\subset E$ . En effet, il ne faut pas confondre l'union des parties d'un ensemble avec l'ensemble des parties d'un ensemble, par exemple : soient  $(F, G, H) \subset E^3$ ,  $F \cup G \cup H \neq \{F, G, H\}$ . Cette nuance prendra plus de sens dans la sous-section 4.1.1, lorsque l'on définira l'ensemble des liens d'un graphe.

### L'ensemble vide

On appelle ensemble vide noté  $\emptyset$ , l'unique ensemble ne contenant aucun élément. Ainsi par définition  $\emptyset$  est un sous-ensemble pour n'importe quel ensemble mathématique.

## L'ensemble dénombrable

On dit d'un ensemble qu'il est dénombrable ou infini dénombrable, lorsqu'il constitue une liste d'éléments différents les uns des autres que l'on peut indexer par une suite d'entiers sans qu'aucun élément ne soit omis.

## La collection

On appelle collection, une liste d'éléments pouvant se répéter mais que l'on peut tout de même indexer par une suite d'entiers sans qu'aucun élément ne soit omis.

## La paire et le singleton

On appelle paire, un ensemble  $\{a, b\}$  composé d'exactly deux éléments et un singleton, un ensemble  $a$  composé d'un unique élément.

## Le couple

On appelle couple, une paire d'éléments  $(a, b)$  dans un ordre déterminé. Ainsi  $(a, b)$  est un couple distinct du couple  $(b, a)$ .

## L'application

On définit comme application toute relation pouvant exister entre deux ensembles  $E$  et  $F$  et reliant chacun des éléments de l'ensemble de départ  $E$  avec un unique élément de l'ensemble d'arrivée  $F$ .

## Le groupe

On appelle groupe, un ensemble  $G$  muni d'une loi interne  $\star$  tel que :

- la loi  $\star$  est associative :  $\forall (a, b, c) \in G^3, a \star (b \star c) = (a \star b) \star c$ .
- il existe un élément neutre  $e$  :  $\forall x \in G, x \star e = e \star x = x$ .
- tout élément possède un symétrique :  $\forall x \in G, \exists ! \bar{x} \in G \mid x \star \bar{x} = \bar{x} \star x = e$ .

Lorsque, pour tout couple d'éléments de l'ensemble  $G$ , la loi  $\star$  est commutative ( $\forall (a, b) \in G^2, a \star b = b \star a$ ), et que les trois propriétés ci-dessus sont satisfaites, alors on dit que l'ensemble  $G$  muni de la loi interne  $\star$  est un groupe commutatif ou bien un groupe abélien.

## L'espace vectoriel

On appelle espace vectoriel sur  $\mathbb{K}$ , un ensemble  $E$  muni de deux lois, une interne  $+$  "additionner" et l'autre externe  $\cdot$  "multiplier" tel que :

- l'ensemble  $G$  muni de la loi interne  $+$  est un **groupe commutatif**.
- la loi externe  $\cdot$  application allant de  $\mathbb{K} \times E$  dans  $E$  vérifie les propriétés suivantes :

- (i) la loi externe  $\cdot$  est distributive :  $\forall(\alpha, \beta, x, y) \in \mathbb{K}^2 \times E^2, \alpha \cdot (x + y) = \alpha \cdot x + \alpha \cdot y$  &  $(\alpha + \beta) \cdot x = \alpha \cdot x + \beta \cdot x$
- (ii) la loi externe  $\cdot$  est associative :  $\forall(\alpha, \beta, x) \in \mathbb{K}^2 \times E, \alpha \cdot (\beta \cdot x) = (\alpha \cdot \beta) \cdot x$
- (iii) l'élément neutre de la loi externe  $\cdot$  est :  $1 \in \mathbb{K}$

## L'espace affine

On définit un espace affine  $\mathcal{E}$  comme l'ensemble  $\mathcal{E}$  pour lequel il existe un espace vectoriel  $E$  et une loi associative<sup>1</sup>  $+$ , allant de  $\mathcal{E} \times E$  dans  $\mathcal{E}$  tels que :

$$\forall(a, \mathbf{u}) \in \mathcal{E} \times E, \exists!b \in \mathcal{E} \mid b = a + \mathbf{u}$$

Dans la suite de notre travail, nous nous intéresserons en particulier à une certaine catégorie d'espaces affines, les espaces euclidiens à  $n$  dimensions  $\mathbb{R}^n$ . Ci-dessous, nous rappelons un certain nombre de définitions et propriétés qui nous seront utiles par la suite.

## La distance euclidienne

La distance euclidienne entre deux points  $(x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2$  est définie telle que :

$$|x - y| = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2} \in \mathbb{R}^+ \quad (1.1)$$

## Le diamètre d'un ensemble

Le diamètre d'un sous-ensemble non vide  $E \subset \mathbb{R}^n$  est défini par la plus grande distance possible entre deux points  $(x, y) \in E^2$

$$|E| = \sup(\{|x - y| \mid (x, y) \in E^2\}) \quad (1.2)$$

## Le $\delta$ recouvrement d'un ensemble

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  un sous-ensemble et  $\{U_i\}$  un ensemble dénombrable de sous-ensembles  $U_i \subset \mathbb{R}^n$  de diamètres  $0 < |U_i| \leq \delta, \forall i$ .

$$\{U_i\} \text{ est un } \delta \text{ recouvrement de } E \Leftrightarrow E \subset \bigcup_{i=1}^{+\infty} U_i \quad (1.3)$$

## Les boules ouvertes

Soit un point  $x \in \mathbb{R}^n$ , on appelle boule ouverte, un sous-ensemble  $B_r^\circ(x) \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$B_r^\circ(x) = \{y \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, |x - y| < r\} \text{ avec } r \in \mathbb{R}^+ \quad (1.4)$$

---

1. loi  $+$  associative :  $\forall(a, \mathbf{u}, \mathbf{v}) \in \mathcal{E} \times E^2, a + (\mathbf{u} + \mathbf{v}) = (a + \mathbf{u}) + \mathbf{v}$

### Les boules fermées

Soit un point  $x \in \mathbb{R}^n$ , on appelle boule fermée, un sous-ensemble  $B_r(x) \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$B_r(x) = \{y \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, |x - y| \leq r\} \text{ avec } r \in \mathbb{R}^+ \quad (1.5)$$

### Les cubes ouverts

Soit un point  $x \in \mathbb{R}^n$ , on appelle cube ouvert, un sous-ensemble  $C_r^\circ(x) \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$C_r^\circ(x) = \{y = (y_1, \dots, y_n) \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, \forall i \in [1, n], |x_i - y_i| < r\} \text{ avec } r \in \mathbb{R}^+ \quad (1.6)$$

### Les cubes fermés

Soit un point  $x \in \mathbb{R}^n$ , on appelle cube fermé, un sous-ensemble  $C_r(x) \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$C_r(x) = \{y = (y_1, \dots, y_n) \mid \exists x \in \mathbb{R}^n, \forall i \in [1, n], |x_i - y_i| \leq r\} \text{ avec } r \in \mathbb{R}^+ \quad (1.7)$$

### Les ensembles ouverts

On dit qu'un ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  est ouvert si et seulement si :

$$\forall x \in E, \exists r \mid B_r^\circ(x) \subset E \quad (1.8)$$

### Les ensembles fermés

On dit qu'un ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  est fermé si et seulement si :

$$\forall x \in E, \exists \{x_k\} \subset E \mid (x_k)_{k \in \mathbb{N}} \text{ est une suite qui converge vers } x \quad (1.9)$$

### La fermeture ou l'adhérence d'un ensemble

La fermeture ou l'adhérence d'un ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  correspond à l'intersection de tous les ensembles fermés contenant l'ensemble  $E$ , et on la note  $\bar{E}$ .

### L'intérieur d'un ensemble

L'intérieur d'un ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  correspond à l'union de tous les ensembles ouverts contenus dans l'ensemble  $E$ , et on le note  $\text{int}(E)$ .

### Les limites d'un ensemble

Soit  $E \subset \mathbb{R}^n$ , les limites de  $E$  se définissent telles que :

$$\partial E = \bar{E} \setminus \text{int}(E) \quad (1.10)$$

### 1.1.2 . Distribution de masse et Mesure

Le concept de mesure d'un ensemble nous sera nécessaire pour bien appréhender d'autres concepts et notamment l'un des plus cardinaux de ce travail celui de dimension d'Hausdorff. En ce qui nous concerne nous nous limiterons à étudier les mesures de sous-ensemble de l'ensemble  $\mathbb{R}^n$ .

On définit alors  $\mu$  comme étant une mesure sur l'ensemble  $\mathbb{R}^n$  si et seulement si elle répond à l'ensemble des propriétés suivantes :

$$\forall E \subset \mathbb{R}^n, \mu(E) \in \mathbb{R}^+ \quad (1.11)$$

$$\mu(\emptyset) = 0 \quad (1.12)$$

$$\mu(E) \leq \mu(F), \text{ si } E \subset F \subset \mathbb{R}^n \quad (1.13)$$

$$\{U_i\} \text{ un ensemble dénombrable tel que } \forall i \in \mathbb{N}^*, U_i \subset \mathbb{R}^n, \text{ alors } \mu\left(\bigcup_{i=1}^{+\infty} U_i\right) \leq \sum_{i=1}^{+\infty} \mu(U_i) \quad (1.14)$$

D'ailleurs, si  $\forall i \in \mathbb{N}^*, U_i \subset \mathbb{R}^n$  sont des sous ensembles disjoints composant l'ensemble dénombrable  $\{U_i\}$ , alors l'inégalité (1.14) devient :

$$\mu\left(\bigcup_{i=1}^{+\infty} U_i\right) = \sum_{i=1}^{+\infty} \mu(U_i) \quad (1.15)$$

On définit le support d'une mesure  $\mu$  comme le sous-ensemble fermé  $E \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$\mu(\mathbb{R}^n \setminus E) = 0 \quad (1.16)$$

Toute mesure sur un sous-ensemble borné  $E \subset \mathbb{R}^n$  telle que  $0 < \mu(E) < +\infty$ , se définira comme une masse  $\mu(E)$  de  $E$ . En voici quelques exemples :

### Distribution de Masse

Soient  $x \in \mathbb{R}^n$  et  $E \subset \mathbb{R}^n$ , on définit la mesure  $\mu(E) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in E \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$ . Ainsi  $\mu$  peut définir une distribution de masse concentrée en différents points de l'ensemble  $\mathbb{R}^n$ . On applique cette mesure notamment lorsque l'on désire approcher l'aire d'une surface bornée quelconque par une méthode de type Monte Carlo. Pour cela, on distribue uniformément des points  $x_i$ , portant chacun la même masse, sur un support 2D dont on connaît l'aire parfaitement. Le dit support contient la surface bornée dont on cherche à mesurer l'aire. Lorsque  $i \rightarrow +\infty$ , le rapport entre la masse concentrée aux points situés dans la surface bornée et la masse totale de tous les points distribués sur le support, définit la proportion entre l'aire inconnue de la surface bornée et celle connue du support.

### La mesure de Lebesgue

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$ ,  $U_i = \{x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid \forall j \in \llbracket 1, n \rrbracket, \exists (a_j, b_j) \in (\mathbb{R})^2, a_j \leq x_j \leq b_j\}$  des hyper-parallélépipèdes tels que  $E \subset \bigcup_{i=1}^{+\infty} U_i$  et  $A^n(U_i) = \prod_{j=1}^n (b_j - a_j)$  leurs

hyper-surfaces à  $n$  dimensions. On définit la mesure de Lebesgue telle que :

$$L^n(E) = \inf \left( \left\{ \sum_{i=1}^{+\infty} A^n(U_i) \mid E \subset \bigcup_{i=1}^{+\infty} U_i \right\} \right) \quad (1.17)$$

Les méthodes numériques, utilisées pour approcher la surface d'un disque ou toute autre surface bornée quelconque, sont des exemples concrets de l'utilisation de la mesure de Lebesgue dans l'espace euclidien à deux dimensions. Ainsi considérons une grille de maille carrée recouvrant l'intégralité de la surface à mesurer. En sommant uniquement les aires des carrés pleins recouvrant la surface, on obtiendra une mesure approchée de son aire. Cette mesure approchée sera d'autant plus précise que l'on resserrera les mailles de la grille.

### 1.1.3 . Mesure de Hausdorff

Soient  $s \in \mathbb{R}^+$ ,  $\delta \in \mathbb{R}^{+*}$  et un sous-ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  tels que :

$$H_\delta^s(E) = \inf \left( \left\{ \sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^s \mid \{U_i\} \text{ est un } \delta \text{ recouvrement de } E \right\} \right) \quad (1.18)$$

Ainsi on définit la mesure de Hausdorff de  $E$  de dimension  $s$  telle que :

$$H^s(E) = \lim_{\delta \rightarrow 0} H_\delta^s(E) \quad (1.19)$$

Sans trop de difficultés, on comprend que la mesure de Hausdorff, à l'instar de la mesure de Lebesgue, est une mesure car elle satisfait à l'ensemble des propriétés (1.11)-(1.14). A présent il nous faut définir quelques propriétés attachées à la mesure de Hausdorff.

## Transformation d'un ensemble mesuré par la mesure de Hausdorff par une application de Hölder

Tout d'abord prenons le temps de définir ce qu'est une application de Hölder. On dit d'une application  $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$  qu'elle est de Hölder si :

$$\forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |f(x) - f(y)| \leq c|x - y|^\alpha, \text{ avec } (c, \alpha) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^{+*} \quad (1.20)$$

Pour  $\alpha = 1$  on parle d'application de Lipschitz :

$$\forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |f(x) - f(y)| \leq c|x - y|, \text{ avec } c \in \mathbb{R}^+ \quad (1.21)$$

et bi-Lipschitz si :

$$\forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, c_1|x - y| \leq |f(x) - f(y)| \leq c_2|x - y|, \text{ avec } (c_1, c_2) \in (\mathbb{R}^+)^2 \quad (1.22)$$

si  $c_1 = c_2 = \lambda$  on parle de similitude (parmi les similitudes on retrouve les homothéties par exemple) :

$$\forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |f(x) - f(y)| = \lambda|x - y| \quad (1.23)$$

et enfin si  $c_1 = c_2 = 1$  on parle d'isométrie (les rotations, les translation ainsi que les symétries sont toutes des isométries) :

$$\forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |f(x) - f(y)| = |x - y| \quad (1.24)$$

Soient un sous-ensemble  $E \subset \mathbb{R}^n$  et une application de Hölder  $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m$  alors :

$$\forall s \in \mathbb{R}^+, H^{s/\alpha}(f(E)) \leq c^{s/\alpha} H^s(E), \text{ avec } (c, \alpha) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^{+*} \quad (1.25)$$

**démonstration** : Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \longrightarrow \mathbb{R}^m$  une application de Hölder, d'après (1.20)  $\forall (x, y) \in E^2, |f(x) - f(y)| \leq c|x - y|^\alpha \leq c|E|^\alpha$ . Soit  $\{U_i\}$  un  $\delta$  recouvrement de  $E$ ,  $\forall i \in \mathbb{N}^*, f(E \cap U_i) \leq c|U_i|^\alpha$ , alors  $\{f(E \cap U_i)\}$  est un  $c\delta^\alpha$  recouvrement de  $f(E)$ , donc  $\sum_{i=1}^{+\infty} |f(E \cap U_i)|^s = \sum_{i=1}^{+\infty} c^s |U_i|^{s\alpha} \iff \sum_{i=1}^{+\infty} |f(E \cap U_i)|^{s/\alpha} = \sum_{i=1}^{+\infty} c^{s/\alpha} |U_i|^s$ , donc  $H_{c\delta^\alpha}^{s/\alpha}(f(E)) \leq c^{s/\alpha} H_{c\delta^\alpha}^s(E)$  et donc lorsque  $\delta \longrightarrow 0$  on obtient bien (1.25).

Dans le cas où  $f$  est une bi-Lipschitz application on a :

$$\forall s \in \mathbb{R}^+, c_1^s H^s(E) \leq H^s(f(E)) \leq c_2^s H^s(E), \text{ avec } (c_1, c_2) \in (\mathbb{R}^{+*})^2 \quad (1.26)$$

**démonstration** : même démonstration que ci-dessus en l'effectuant cette fois pour un encadrement.

Si  $f$  est une similitude :

$$H^s(f(E)) = H^s(\lambda E) = |\lambda|^s H^s(E) \quad (1.27)$$

**démonstration** : Soit  $\{U_i\}$  un  $\delta$  recouvrement de  $E$  tel que  $H_\delta^s(E) = \sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^s$ , alors  $\{f(U_i)\} = \{\lambda U_i\}$  est un  $\lambda\delta$  recouvrement de  $f(E) = \lambda E$  telle que  $H_{\lambda\delta}^s(\lambda E) = \sum_{i=1}^{+\infty} |\lambda U_i|^s = |\lambda|^s \sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^s = |\lambda|^s H_\delta^s(E)$ . Ainsi lorsque  $\delta \longrightarrow 0$ , on obtient bien  $H^s(\lambda E) = |\lambda|^s H^s(E)$

Et enfin si  $f$  est une isométrie :

$$\forall s \in \mathbb{R}^+, H^s(f(E)) = H^s(E) \quad (1.28)$$

**démonstration** : idem en prenant  $\lambda = 1$

#### 1.1.4 . Distance entre sous-ensembles compacts et fermés d'un même ensemble

Soient  $D \subset \mathbb{R}^n$  et  $\mathcal{A}$  l'ensemble des sous-ensembles compacts et fermés  $A \subset D$ .  $\forall A \in \mathcal{A}$ ,  $A_\delta = \{x \in D \mid \exists a \in A, |x - a| \leq \delta\}$  est l'ensemble vu comme l'épaississement de  $A$  suivant toutes les  $n$  directions de l'espace  $\mathbb{R}^n$  d'un rayon  $\delta \in \mathbb{R}^+$ . On définit alors la distance entre 2 sous-ensembles  $(A, B) \subset D^2$  telle que :

$$\forall (A, B) \subset D^2, d(A, B) = \inf(\{\delta \in \mathbb{R}^+ \mid A \subset B_\delta \text{ et } B \subset A_\delta\}) \quad (1.29)$$

Connu aussi sous le nom de distance de Hausdorff, la distance  $d(A, B)$  entre deux sous ensembles compacts et fermés  $(A, B) \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$  correspond ainsi au plus petit  $\delta$  pour lequel  $A \subset B_\delta$  et  $B \subset A_\delta$ . Sur la (Fig.1.1), pour deux sous-ensembles compacts fermés  $(A, B) \subset \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2$ , on aura déterminé la valeur  $\delta$  de leur distance de Hausdorff.

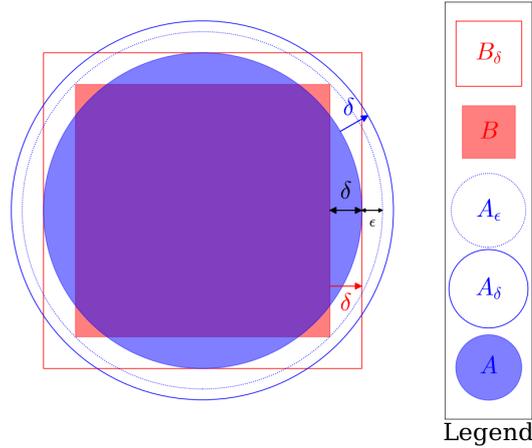


Figure 1.1 – Exemple à deux dimensions de la distance de Hausdorff mesurée entre les sous ensembles  $A$  et  $B$ . Cette distance correspond ainsi au plus petit  $\delta$  pour lequel  $A \subset B_\delta$  et  $B \subset A_\delta$ .

### 1.1.5 . Dimension de Hausdorff

Soient  $(s, t) \in (\mathbb{R}^+)^2$  et  $\{U_i\}$  un  $\delta$  recouvrement de  $E$  tel que  $\delta < 1$ . Dès lors pour  $s < t$  on peut écrire :

$$\forall i \in \mathbb{N}^*, |U_i|^{t-s} \leq \delta^{t-s} \iff |U_i|^t \leq \delta^{t-s} |U_i|^s \quad (1.30)$$

et donc que :

$$\sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^t \leq \delta^{t-s} \sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^s \quad (1.31)$$

et ainsi d'après (1.18) on a :

$$H_\delta^t(E) \leq \delta^{t-s} H_\delta^s(E) \quad (1.32)$$

De plus si  $s > t$ , il suffira de renverser les inégalités précédentes (1.30), (1.31) et donc (1.32) pour obtenir :

$$H_\delta^t(E) \geq \delta^{t-s} H_\delta^s(E) \quad (1.33)$$

Ainsi lorsque  $\delta \rightarrow 0$ , pour un ensemble  $E$  tel que  $0 < H^s(E) < +\infty$ , il existe une valeur critique  $s$  de  $t$  pour laquelle :

$$H^t(E) = 0, \text{ si } t > s$$

$$H^t(E) = +\infty, \text{ si } t < s$$

$$H^t(E) = H^s(E) \neq (0 \text{ ou } +\infty), \text{ si } t = s$$

On définit alors la dimension de Hausdorff de l'ensemble  $E$  comme étant cette valeur critique  $\dim_H(E) = s$ . Ci-après quelques propriétés qui découlent de la définition de la dimension de Hausdorff.

## Dimension de Hausdorff d'un ensemble transformé par une application de Hölder

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une application de Hölder (1.20) alors :

$$\dim_H(f(E)) \leq \frac{1}{\alpha} \dim_H(E) \quad (1.34)$$

**démonstration** : Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une application de Hölder, d'après (1.25) si  $s > \dim_H(E)$  alors  $H^{s/\alpha}(f(E)) \leq c^{s/\alpha} H^s(E) = 0$  et donc  $\dim_H(f(E)) \leq \frac{1}{\alpha} \dim_H(E)$

## Dimension de Hausdorff d'un ensemble transformé par une bi-Lipschitz application

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une bi-Lipschitz application (1.22) alors :

$$\dim_H(f(E)) = \dim_H(E) \quad (1.35)$$

**démonstration** : Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une bi-Lipschitz application, d'après (1.26) si  $s > \dim_H(E)$  alors  $0 = c_1^s H^s(E) \leq H^s(f(E)) \leq c_2^s H^s(E) = 0$  et donc  $\dim_H(f(E)) = \dim_H(E)$ .

## Dimension de Hausdorff d'un ensemble transformé par une similitude

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une similitude (1.24) alors :

$$\dim_H(f(E)) = \dim_H(E) \quad (1.36)$$

**démonstration** : analogue à celle des bi-Lipschitz applications.

## Dimension de Hausdorff d'un ensemble transformé par une isométrie

Soient  $E \subset \mathbb{R}^n$  et  $f : E \rightarrow \mathbb{R}^m$  une isométrie (1.24) alors :

$$\dim_H(f(E)) = \dim_H(E) \quad (1.37)$$

**démonstration** : analogue à celle des bi-Lipschitz applications.

## 1.2 . Fractales ou ensembles construits par une procédure itérative

### 1.2.1 . Construction d'une fractale à partir d'un motif initial

On peut définir un processus récursif afin de construire n'importe quelle fractale, en définissant une ou la somme de  $N$  contractions  $S_i$  qui génèreraient une ou  $N$  copies transformées à partir d'un motif initial donné  $E \subset \mathbb{R}^n$  (Fig.1.2). On définit ainsi  $S$  ces procédures qui répétées à l'infini construiront les fractales telles que :

$$S = \sum_{i=1}^N S_i \quad (1.38)$$

Ainsi pour chaque fractale que l'on voudra construire, il existe un unique support  $F \subset \mathbb{R}^n$  de cette fractale pour lequel si la procédure  $S$  est une involution :

$$\exists! F \subset \mathbb{R}^n, F = \bigcup_{i=1}^N S_i(F) \quad (1.39)$$

Ce support  $F$  pourra être approché à l'infini par n'importe quel sous ensemble compact (fermé) non vide  $E \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$d(F, S^k(E)) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0, \text{ avec } S^k = \underbrace{S \circ S \dots \circ S}_k \quad (1.40)$$

**démonstration** : On démontrera ici (1.39) et (1.40) dans le cas où la ou les  $N$  contractions  $S_i$  sont des applications de Lipschitz (1.21) avec  $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, \forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |S_i(x) - S_i(y)| \leq \lambda_i |x - y|$ , avec  $\lambda_i \in ]0, 1[$ . Faisons l'hypothèse que nous allons démontrer par la suite qu'il existe parmi l'ensemble  $\mathcal{A}$ , des sous-ensembles compacts et fermés  $E \subset D$  avec  $D \subset \mathbb{R}^n$ , un sous-ensemble compact fermé non vide  $F \subset \mathbb{R}^n$  tel que  $F = S(F)$ . On a alors :

$$\begin{aligned} d(F, S(E)) &= d(S(F), S(E)) = d\left(\bigcup_{i=1}^N S_i(F), \bigcup_{i=1}^N S_i(E)\right) \\ \iff d\left(\bigcup_{i=1}^N S_i(F), \bigcup_{i=1}^N S_i(E)\right) &\leq \max_i \{d(S_i(F), S_i(E))\} = \max_i \{\lambda_i\} d(F, E) \end{aligned}$$

alors  $\forall k \in \mathbb{N}^*$  on a :

$$\begin{aligned} 0 < d(F, S^k(E)) &= d(S^k(F), S^k(E)) \leq \max_i \{\lambda_i\}^k d(F, E) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0 \quad (1.41) \\ \iff d(F, S^k(E)) &\xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0 \end{aligned}$$

Étant donné que  $E$  est un sous-ensemble compact (fermé) non vide de  $\mathbb{R}^n$  alors  $\forall k \in \mathbb{N}$ ,  $S^k(E)$  seront eux aussi des sous-ensembles nécessairement non vides et compacts fermés de  $\mathbb{R}^n$  alors lorsque  $k \rightarrow +\infty$  les  $S^k(E)$  tendent vers un sous-ensemble compact (fermé) non vide limite  $F$  appelé support tel que  $\forall k \in \mathbb{N}, F = S(F)$ . Pour ce qui est de l'unicité de  $F$  on peut le démontrer par l'absurde. Soient  $(A, B) \subset \mathcal{A}^2$  tel que  $A = S(A)$  et  $B = S(B)$  :

$$\begin{aligned} d(A, B) &= d(S(A), S(B)) = d\left(\bigcup_{i=1}^N S_i(A), \bigcup_{i=1}^N S_i(B)\right) \\ \iff d\left(\bigcup_{i=1}^N S_i(A), \bigcup_{i=1}^N S_i(B)\right) &\leq \max_i \{d(S_i(A), S_i(B))\} = \max_i \{\lambda_i\} d(A, B) \end{aligned}$$

or  $\lambda_i \neq 0$  d'où  $d(A, B) = 0$  ce qui signifie que  $A = B$  et finit de démontrer l'unicité de  $F$ .

Avant de calculer la dimension fractale de quelques fractales bien connues, nous allons définir un certain nombre de classes dans lesquelles nous pourrons les ranger.

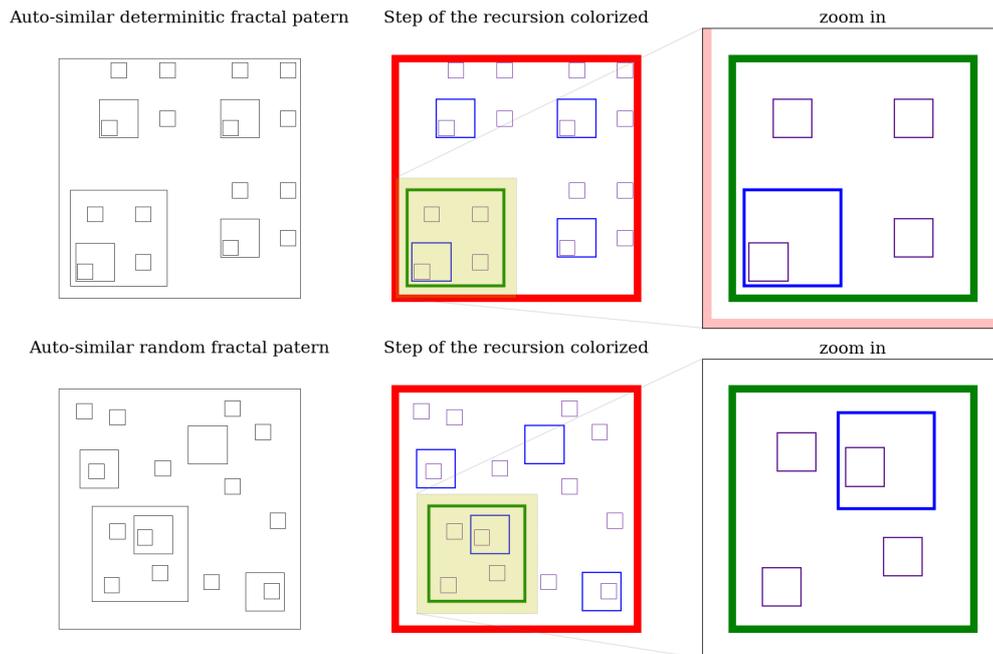


Figure 1.2 – Représentation de deux fractales dont une (haut) est déterministe tandis que l’autre (bas) est statistique et pour lesquelles leurs dimensions fractales valent toutes les deux  $\dim_H(F) = \frac{\log(24)}{\log(8)} = 1 + \frac{\log(3)}{3\log(2)}$ . La construction du support  $F$  pour chacune de ces fractales au moyen d’une transformation  $S$ , nécessite d’appliquer celle-ci une infinité de fois à un ensemble initial  $E$ . Ici nous représentons seulement les trois premières itérations du processus récursif censé se répéter à l’infini. Chaque couleur correspondant à une étape de ce processus itératif. Initialement on débute à partir des carrés rouges, desquels à l’issue de la première itération du processus seront obtenus les verts, eux-mêmes à l’origine de la création des bleus lors de la deuxième, carrés bleus qui après application de la transformation  $S$  lors de la troisième étape du processus itératif nous permettrons d’obtenir les carrés violets, etc.

## 1.2.2 . Classes de fractales

### Uniformes vs non uniformes

On appelle fractale uniforme toute structure fractale pour laquelle il existe un support  $F \in \mathbb{R}^n$  invariant par la transformation  $S = \sum_{i \in \llbracket 1, N \rrbracket} S_i$  tel que  $\forall (i, j) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2$ ,  $S_i = S_j$ . En d'autres termes il existe un processus récursif à **une seule échelle de contraction** qui prolongé à l'infini pourrait définir parfaitement le support  $F$ .

Dans le cas d'une fractale non uniforme, il existe un support  $F \in \mathbb{R}^n$  invariant par la transformation  $S = \sum_{i \in \llbracket 1, N \rrbracket} S_i$  tel que  $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ ,  $S_i$  soit une transformation choisie parmi  $M \leq N$  transformations différentes les unes des autres  $\{S_1, \dots, S_M / M \leq N \text{ et } \forall (k, l) \in \llbracket 1, M \rrbracket^2, S_k \neq S_l\}$ . En d'autres termes il existe un processus récursif à **M échelles de contraction** qui prolongé à l'infini pourrait définir parfaitement le support  $F$ .

### Déterministes vs statistiques

Une fractale statistique à la différence d'une fractale déterministe est une fractale pour laquelle il existe au moins 2 transformations différentes choisies selon une loi de probabilité. Sur la (Fig.1.2) sont représentées en haut et en bas, respectivement une fractale déterministe et une fractale statistique partageant la même dimension fractale  $dim_H(F) = \frac{\log(24)}{\log(8)} = 1 + \frac{\log(3)}{3\log(2)}$ .

Dans le cas d'une fractale statistique **homogène**, les  $N$  transformations  $S_i = f_i \circ s_i$  de la somme  $S = \sum_{i \in \llbracket 1, N \rrbracket} S_i$ , voient leurs isométries  $f_i$  les composant subir des modifications aléatoires. Or d'après (1.37) cela n'aura aucune conséquence sur le calcul de la dimension de Hausdorff. En d'autres termes, on observe ainsi une variation de la position ainsi que de l'orientation et du sens des motifs récurrents qui constituent le corps de la fractale.

En revanche dans le cas d'une fractale statistique **hétérogène**,  $S = \sum_{i \in X} S_i$  somme parmi un ensemble de  $N \in \mathbb{N}^*$  transformations  $S_i$ , une sélection  $\{S_i \mid i \in X \subset \llbracket 1, N \rrbracket\}$  dont les éléments pourront varier d'une itération à l'autre, car désignés par une loi de probabilité  $P$ . De plus à l'instar des fractales statistiques homogènes, les isométries  $f_i$  des transformations  $S_i$  pourront elles aussi subir des modifications aléatoires.

## 1.3 . Dimension de Bouligand-Minkowski

Bien qu'en théorie n'importe quel support  $F \subset \mathbb{R}^n$  possèdent une dimension de Hausdorff, en pratique il est souvent très difficile de la déterminer. Il existe d'autres façons pour définir la dimension d'un objet fractal. La dimension dite de Bouligand-Minkowski en est une. Bien que très proches, dans le cas général celle-ci donne des résultats qui ne sont pas toujours exactement égaux à ceux obtenus pour la dimension de Hausdorff. Pour la suite on définira un ensemble étalon  $A_\varepsilon \in \mathbb{R}^n$  tel que :

$$A_\varepsilon = \begin{cases} \text{un cube fermé (1.7) de diamètre } \sqrt{n}\varepsilon \in \mathbb{R}^+ \\ \text{ou} \\ \text{une boule fermée (1.5) de diamètre } \varepsilon \in \mathbb{R}^+ \end{cases} \quad (1.42)$$

### 1.3.1 . Box counting

Soient  $F$  le support d'une fractale tel que (1.39) et un ensemble étalon  $A_\varepsilon \in \mathbb{R}^n$  comme défini plus haut.

### Méthode des boites, méthode des boules

Soit  $M_\varepsilon(F)$  une mesure que l'on peut définir comme étant le nombre nécessaire pour couvrir le support  $F$  d'une fractale, de répliques de  $A_\varepsilon$  obtenues par différentes isométries. Si  $M_\varepsilon(F)$  suit une loi de puissance telle que :

$$M_\varepsilon(F) = C\varepsilon^{-s} \quad (1.43)$$

Alors pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  on a :

$$\dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log(M_\varepsilon(F)) - \log(C)}{-\log(\varepsilon)} = \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{-\log(\varepsilon)} \quad (1.44)$$

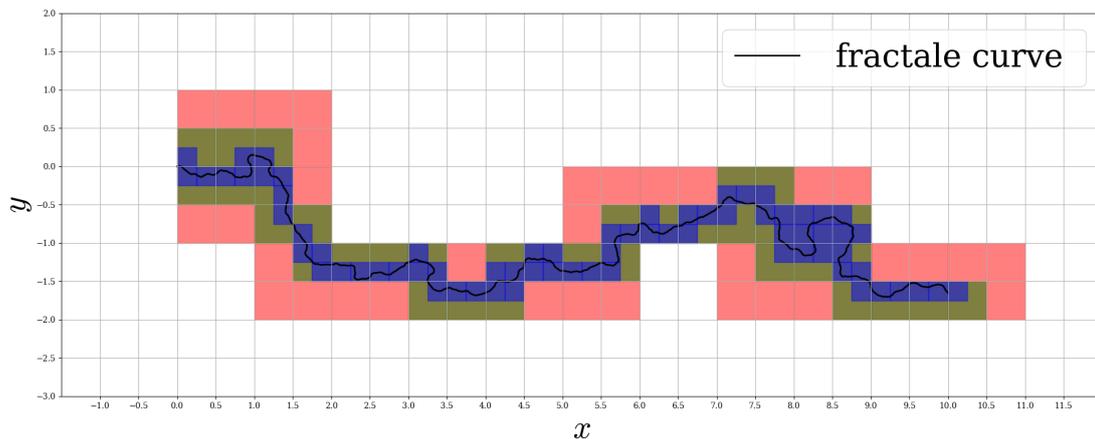


Figure 1.3 – Mesures de la dimension d'une courbe par la méthode des boîtes

Prenons le cas d'un cube à  $m \leq n$  dimensions de côté  $c$ , afin de vérifier que dans un cas simple cette méthode permet de mesurer la dimension d'un objet plongé dans un espace  $\mathbb{R}^n$ . Pour le recouvrir avec des répliques de  $A_\varepsilon$  que ce soit des boules fermées ou des cubes fermés, il nous en faudra  $(c/\varepsilon)^m$ . Ainsi d'après (1.43) et (1.44) on retrouve bien  $\dim_B(\text{cube}) = m$ .

### Méthode des compas

De manière alternative on peut aussi définir  $M_\varepsilon(F)$  comme étant la somme des diamètres des boules fermées disjointes de diamètre  $\varepsilon$  nécessaires pour couvrir le support  $F$  d'une fractale. Si  $M_\varepsilon(F)$  suit une loi de puissance telle que :

$$M_\varepsilon(F) = C\varepsilon^{1-s} \quad (1.45)$$

Alors pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  on a :

$$\dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 1 - \frac{\log(M_\varepsilon(F)) - \log(C)}{\log(\varepsilon)} = 1 - \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{\log(\varepsilon)} \quad (1.46)$$

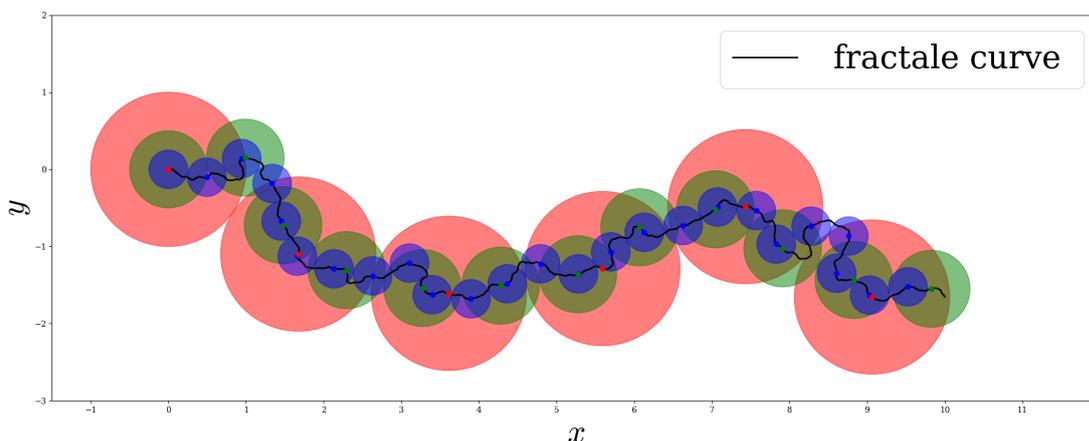


Figure 1.4 – Mesures de la dimension d’une courbe par la méthode des boules disjointes

Reprenons une nouvelle fois notre exemple d’un cube à  $m \leq n$  dimensions plongé dans un espace  $\mathbb{R}^n$ . Pour le recouvrir avec des boules fermées de diamètre  $\varepsilon$  disjointes, comme précédemment il nous en faudra  $(c/\varepsilon)^m$ , ce qui amène la somme des diamètres des boules fermées disjointes à valoir  $(c/\varepsilon)^m \cdot \varepsilon$ . Donc d’après (1.45) et (1.46) on retrouve bien  $\dim_B(\text{cube}) = m$ .

### Méthode de la saucisse de Minkowski

Cette fois ci  $M_\varepsilon(F)$  se définit comme étant le volume occupé par l’union des boules fermées de diamètre  $\varepsilon$  centrées en chaque point  $x$  du support  $F$  d’une fractale. On peut écrire aussi  $M_\varepsilon(F) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \exists y \in F, |x - y| \leq \varepsilon\}$  vu comme l’épaississement du support de la fractale suivant toutes les  $n$  directions de l’espace  $\mathbb{R}^n$  d’un rayon  $\varepsilon$ . Si  $M_\varepsilon(F)$  suit une loi de puissance telle que :

$$M_\varepsilon(F) = C\varepsilon^{n-s} \quad (1.47)$$

Alors pour  $\varepsilon \rightarrow 0$  on a :

$$\dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} n - \frac{\log(M_\varepsilon(F)) - \log(C)}{\log(\varepsilon)} = n - \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{\log(\varepsilon)} \quad (1.48)$$

On remarque que (1.47)(resp. (1.48)) sont identiques à (1.45)(resp. (1.46)) dans le cas où les supports  $F \in \mathbb{R}$ . En effet la manière de définir  $M_\varepsilon(F)$  dans les 2 méthodes convergeront.

Reprenons une dernière fois notre exemple d’un cube mais pour simplifier les calculs pour  $m = 2$  dimensions soit un carré plein plongé dans un espace  $\mathbb{R}^3$ . Si on épaissit suivant toutes

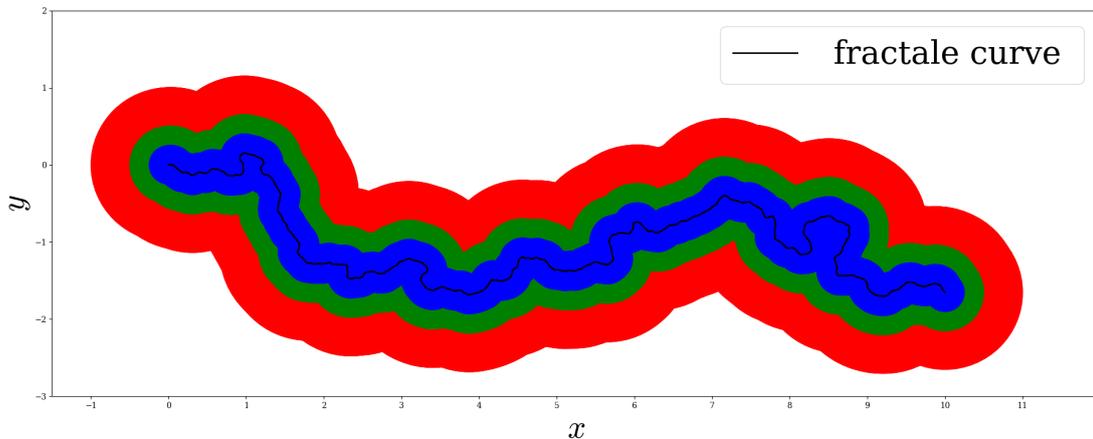


Figure 1.5 – Saucisse de Minkowski ou épaissement d'une courbe E

les directions de l'espace  $\mathbb{R}^3$  d'un rayon  $\varepsilon$ , on obtiendra le volume  $\varepsilon c^2 + (4\pi/3)\varepsilon^3$ . Donc d'après (1.47) et (1.48) en constatant que  $(4\pi/3)\varepsilon^3 \ll \varepsilon c^2$  lorsque  $\varepsilon \rightarrow 0$  on retrouve bien  $\dim_B(\text{carré}) = 2$ .

On remarque que l'ensemble des dimensions calculées par les méthodes présentées ci-dessus convergent toutes vers le même résultat quelle que soit la manière que l'on aura de choisir  $M_\varepsilon(F)$  elles donneront toutes la même dimension de de Bouligand-Minkowski.

Quelle que soit la méthode utilisée (Fig.1.3), (Fig.1.4) ou (Fig.1.5), on comprend qu'elles trouvent un grand succès lorsqu'il s'agit de traiter des images expérimentales. En effet lorsque l'on étudie un objet issu de la réalité et qu'on le soupçonne d'être porteur d'une géométrie fractale. Il est souvent très difficile de définir correctement le motif qui se répète à l'infini (nous rencontrerons cette difficulté dans le chapitre 5). D'autre part quel que soit l'objet issu de la réalité que l'on choisira, dire de lui qu'il est "fractal" est nécessairement un abus de langage. En effet il pourra au mieux être pré-fractal, c'est à dire que dans l'équation (1.40)  $k \gg 1$  mais  $k \neq +\infty$ . Dans la réalité, **une géométrie fractale ne pourra se vérifier que sur une certaine plage d'ordres de grandeurs**, on comprend aisément qu'en dessous d'une certaine échelle, notamment l'échelle atomique par exemple, la répétition du motif finira par s'arrêter. Ainsi dans le cas de pré fractale on définira  $\dim_B(F)$  en mesurant la pente sur un graphe en échelle log-log de  $M_\varepsilon(F)$  en fonction de  $\varepsilon$ .

### Relation entre la dimension de Bouligand-Minkowski et celle de Hausdorff

La relation d'ordre entre la dimension de Bouligand-Minkowski et celle de Hausdorff est :

$$\dim_H(F) \leq \dim_B(F) \quad (1.49)$$

**démonstration :** On choisit  $M_\varepsilon(F)$  défini suivant la méthode des boites et on rappelle que  $\forall F$  le support d'une fractale,  $\exists f$  une similitude telle que selon (1.27)  $H^s(f(F)) = |\lambda|^s H^s(F) \geq 1$  et que selon (1.36)  $\dim_H(f(F)) = \dim_H(F)$ , ainsi on peut choisir que  $H^s(F) \geq 1$ . D'après la

définition de la dimension de Hausdorff (1.18), si le support  $F$  de la fractale est complètement couvert par des répliques de  $A_\varepsilon$  alors :

$$H_\varepsilon^s(F) = \inf \left( \left\{ \sum_{i=1}^{+\infty} |U_i|^s \text{ tel que } \{U_i\} \text{ est un } \varepsilon \text{ recouvrement de } F \right\} \right) \leq M_\varepsilon(F) \cdot \varepsilon^s$$

$$\iff H^s(F) \leq M_\varepsilon(F) \cdot \varepsilon^s, \text{ pour } \varepsilon \rightarrow 0$$

or  $H^s(F) \geq 1$  d'où :

$$M_\varepsilon(F) \cdot \varepsilon^s \geq 1$$

$$s \leq \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{-\log(\varepsilon)} = \dim_B(F)$$

cela est vrai  $\forall s$  alors pour  $s = \dim_H(F)$  donc  $\dim_H(F) \leq \dim_B(F)$ .

Ainsi en général on ne peut pas dire que  $\dim_H(F) = \dim_B(F)$ , bien que pour beaucoup de fractales notamment beaucoup de fractales auto-similaires (que nous étudierons dans la section 1.4) cette assertion est vraie. Il n'en demeure pas moins qu'il existe un certain nombre de cas où l'égalité n'est pas vérifiée.

Cependant lorsque l'on compare la définition 1.18 de  $H_\varepsilon^s(F)$  à une mesure analogue à celle-ci que l'on pourrait appeler "la mesure de Bouligand Minkowski" :

$$M_\varepsilon(F) \cdot \varepsilon^s = \inf \left( \left\{ \sum_{i=1}^{+\infty} |B_\varepsilon(r)| \text{ tel que les } B_\varepsilon(r) \text{ soient un recouvrement de } F \right\} \right) \quad (1.50)$$

avec  $B_\varepsilon(r)$  des boules fermées centrées sur  $F$

On comprend que la différence entre ces deux mesures réside dans le fait que dans (1.50) le diamètre est fixé à  $|U_i| = \varepsilon$  pour les sous-ensembles  $U_i$  choisis pour réaliser le  $\varepsilon$  recouvrement de  $F$ ; tandis que pour la mesure de Hausdorff la contrainte sur les diamètres est moindre et est définie par  $|U_i| \leq \varepsilon$ . On pourrait être tenté de définir (1.50) comme une mesure cependant ce n'est pas le cas. Ici notre but était de comprendre qualitativement la proximité qui pouvait exister entre la dimension de Bouligand Minkowski et celle de Hausdorff et que pour  $\varepsilon$  bien que possiblement différentes leurs valeurs resteront proches l'une de l'autre.

### 1.3.2 . Application sur des images expérimentales

A partir d'images expérimentales de structures dendritiques formées expérimentalement par auto-organisation d'agrégats atomiques diffusant à la surface d'un substrat de graphite (processus expérimental qui sera largement décrit dans le chapitre 2); nous allons exposer une méthode permettant d'évaluer les dimensions de Bouligand-Minkowski de telles arborescences.

Ces images expérimentales présentent une grande dispersion des niveaux de gris et de bruits comme nous pouvons le constater sur la (Fig.1.6). Afin de faciliter l'analyse que nous ferons de celles-ci, nous devons convertir ces images en noir et blanc. Ainsi les pixels noirs signaleront sur l'image l'absence d'agrégats atomiques, tandis qu'à l'inverse les pixels blancs formeront le dessin des arborescences constituées par ces clusters.

La première étape consistera à filtrer notre image et pour cela nous lui appliquerons un filtre médian. Appliquer un filtre médian à notre image de départ revient, pour chaque pixel

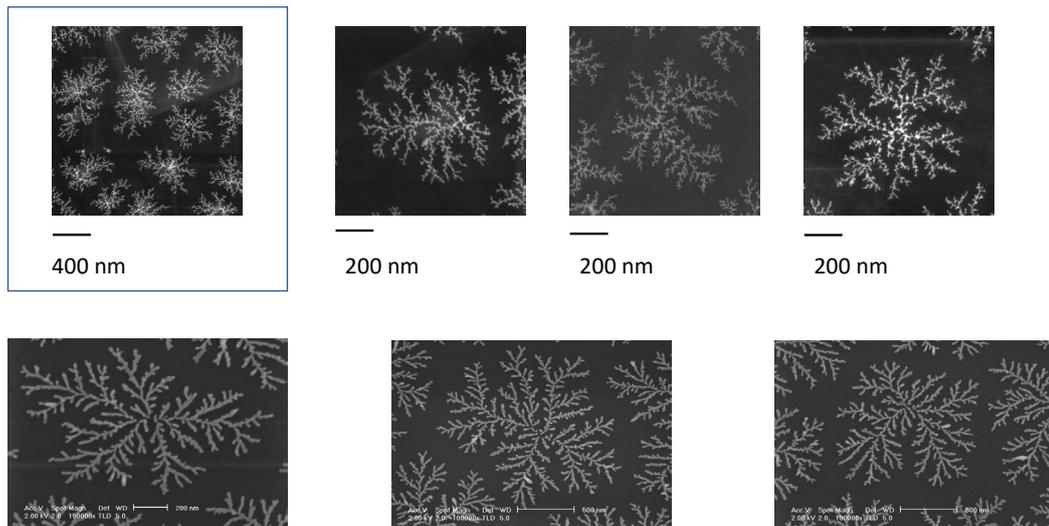


Figure 1.6 – Exemple d’images expérimentales : (haut) des structures dendritiques formées par l’accrétion les uns avec les autres d’agrégats atomiques d’antimoine; (bas) les mêmes arborescences constituées cette fois-ci par des agrégats atomiques d’argent.

$Img(i, j)$  de cette dernière, à choisir la valeur médiane en niveau de gris de l’ensemble des pixels constituant son voisinage. On effectuera alors dans un deuxième temps un seuillage de cette image filtrée. Au préalable il nous faudra définir une valeur seuil. Or rappelons qu’une image constitue informatiquement un tableau, duquel peut être extrait l’histogramme de ces valeurs et à l’instar de celui représenté en bleu sur le bas de la (Fig.1.7), définir pour cette image un signal. On déterminera la valeur seuil de la façon suivante : les pixels sombres du fond seront ajustés par une gaussienne centrée en  $\mu_0$ , de largeur  $\sigma_0$  et d’amplitude  $A_0$ ; tandis que les pixels plus clairs que l’on associe aux contours des structures dendritiques, seront eux ajustés par une autre gaussienne cette fois-ci centrée en  $\mu_1$ , de largeur  $\sigma_1$  et d’amplitude  $A_1$ . La valeur seuil est alors donnée par l’abscisse du point formant l’intersection de ces deux gaussiennes. Cette méthode sans paramètre est d’une part statistiquement acceptable et d’autre part donne un bon accord visuel. Dès lors les pixels qui auront des valeurs inférieures à ce seuil seront définis noirs alors que les pixels qui auront des valeurs supérieures ou égales, eux se verront attribuer la couleur blanche. Désormais à partir de cette image en noir et blanc, on peut facilement calculer les dimensions de Bouligand-Minkowski des arborescences qu’elles représentent et cela par exemple au moyen de la méthode de saucissonnage de Minkowski, décrite plus tôt dans la sous-section 1.3.1.

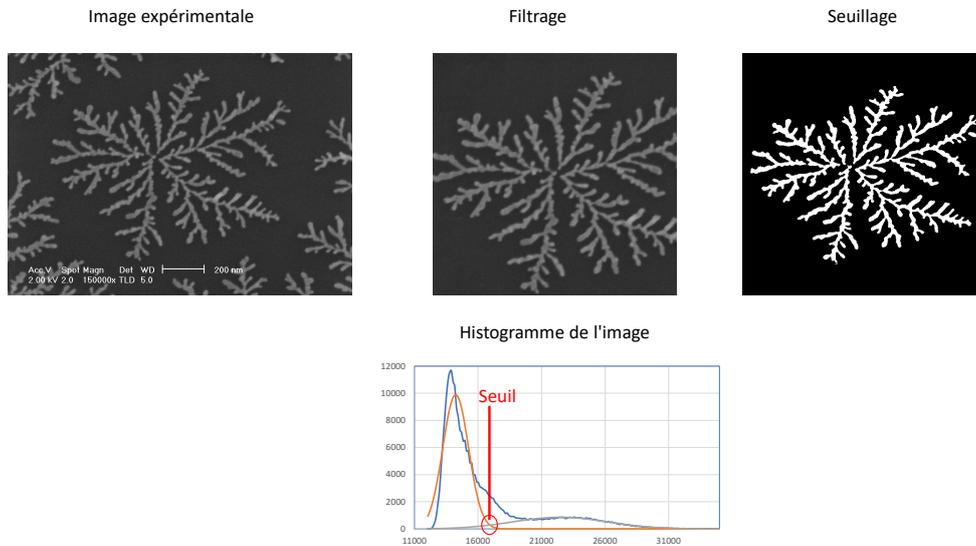


Figure 1.7 – Procédures préliminaires au traitement d’images expérimentales. (milieu haut) L’image expérimentale est tout d’abord filtrée par un filtre médian. (bas) Puis on ajuste l’histogramme de cette image par une somme de deux gaussiennes. (droite haut) Enfin on effectue le seuillage de l’image, en choisissant comme valeur seuil l’abscisse du point d’intersection entre les tracés des deux gaussiennes.

## 1.4 . Fractales auto-similaires

On dit d’une fractale qu’elle est auto-similaire lorsque la ou les  $N$  transformations  $S_i$  à l’origine du processus récursif capable de construire son support  $F$  sont des similitudes (1.23).

### 1.4.1 . Méthode heuristique pour calculer la dimension de Hausdorff

Dans ce paragraphe nous allons présenter une méthode pour évaluer la dimension de Hausdorff de fractales auto-similaires toutes classes confondues 1.2.2.

Soit  $F \in \mathbb{R}^n$ , et  $F_{i,j,k,\dots}$  des sous-ensembles de  $F$  et  $N \in \mathbb{N}^*$  tels que :

$$\forall i \in [1, N], F_i \subset F \quad (1.51)$$

$$\forall (i, j) \in [1, N]^2, F_{i,j} \subset F_i$$

$$\forall \underbrace{(i, j, \dots, k, l)}_m \in [1, N]^m, F_{\underbrace{i, j, \dots, k, l}_m} \subset F_{\underbrace{i, j, \dots, k}_{m-1}} \quad (1.52)$$

et

$$F = \bigcup_{i=1}^N F_i \mid \{F_i\} \text{ est un ensemble de sous-ensembles disjoints} \quad (1.53)$$

$$\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1} = \bigcup_{l=1}^N \underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m \mid \{\underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m\} \text{ est un ensemble de sous-ensembles disjoints} \quad (1.54)$$

d'après (1.15)

$$H^s(F) = \sum_{i=1}^N H^s(F_i) \quad (1.55)$$

$$H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1}) = \sum_{l=1}^N H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m) \quad (1.56)$$

à présent si

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, F_i = \lambda_i f_i(F) \text{ tel que} \quad (1.57)$$

$f_i$  est une isométrie ou une composition d'isométries et  $\lambda_i \in ]0, 1[$

$$\forall \underbrace{(i,j,\dots,k,l)}_m \in \llbracket 1, N \rrbracket^m, \underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m = \lambda_l \underbrace{f_{i,j,\dots,k,l}}_m(\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1}) \text{ tel que} \quad (1.58)$$

$\underbrace{f_{i,j,\dots,k,l}}_m$  est une isométrie ou une composition d'isométries et  $\lambda_l \in \mathbb{R}^*$

on a alors d'après (1.27) et (1.28)

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, H^s(F_i) = |\lambda_i|^s H^s(F) \quad (1.59)$$

$$\forall \underbrace{(i,j,\dots,k,l)}_m \in \llbracket 1, N \rrbracket^m, H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m) = |\lambda_l|^s H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1}) \quad (1.60)$$

et donc

$$H^s(F) = \sum_{i=1}^N H^s(F_i) = \sum_{i=1}^N |\lambda_i|^s H^s(F) \quad (1.61)$$

$$H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1}) = \sum_{l=1}^N H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k,l}}_m) = \sum_{l=1}^N |\lambda_l|^s H^s(\underbrace{F_{i,j,\dots,k}}_{m-1}) \quad (1.62)$$

Ainsi on constate qu'à partir de (1.61) ou de (1.62), on pourra simplifier ces equations en :

$$\sum_{i=1}^N |\lambda_i|^s = 1 \quad (1.63)$$

Cette équation (1.63) nous permettra de calculer la dimension de Hausdorff mais seulement dans le cas où celle-ci sera auto-similaire, nous reviendrons sur ce point dans la section 1.5. On pourra ensuite vérifier ce résultat, en montrant que lorsque  $\delta \rightarrow 0$ , pour  $t > s$   $H^t(F) = 0$  et pour  $t < s$   $H^t(F) = +\infty$  et donc que  $s = \dim_H(F)$  est la dimension de Hausdorff de l'ensemble  $F$ .

### 1.4.2 . La dimension de Hausdorff équivalente à la dimension de Bouligand Minkowski pour les fractales auto-similaires

Commençons d'abord par définir la condition de l'ensemble ouvert. Cette condition permet de s'assurer que les images  $S_i(F)$  obtenues par  $S = \sum_{i=1}^N S_i$  appliquée au support  $F$  de la fractale ne se chevauchent pas totalement. Ainsi soit  $S = \sum_{i=1}^N S_i$  la somme des similitudes  $S_i$  et un sous-ensemble non vide  $V \subset \mathbb{R}^n$  tel que :

$$\bigsqcup_{i=1}^N S_i(V) \subset V, \text{ avec } \bigsqcup \text{ la somme des unions disjointes} \quad (1.64)$$

Pour mieux illustrer cette condition prenons l'exemple de l'ensemble de Cantor  $F$ . tel que :

$$H^s(F) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N+1}\right)^s H^s(F) \iff N \left(\frac{1}{N+1}\right)^s = 1 \quad (1.65)$$

Or d'après (1.40)  $\forall E, d(F, S^k(E)) \xrightarrow{k \rightarrow +\infty} 0$ , avec  $S(E) = \sum_{i=1}^N E/(N+1)$  et  $F \subset E$ . Si on se réfère à la (Fig.1.8), on constate que  $N = 2$  et que l'on peut choisir  $E = [0, 1]$ . Prenons  $V = ]0, 1[$  l'image  $S_1(V) \sqcup S_2(V) = ]0, 1/3[ \sqcup ]2/3, 1[ = ]0, 1/3[ \cup ]2/3, 1[ \subset ]0, 1[ = V$ . Ainsi la condition de l'ensemble ouvert est satisfaite pour l'ensemble de Cantor.

Soit  $F$  le support tel que (1.39) d'une fractale auto-similaire et  $V \supset F$  un ensemble ouvert respectant la condition des ensembles ouverts alors :

$$\dim_H(F) = \dim_B(F) \quad (1.66)$$

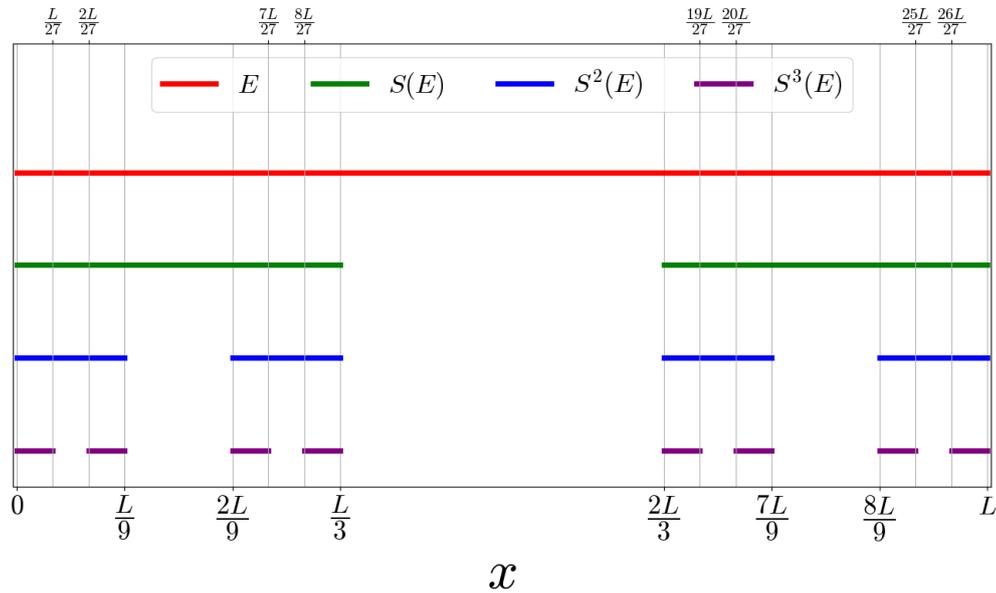


Figure 1.8 – De bas en haut suivant l’axe des ordonnées les quatre premières étapes du processus récursif à l’origine de la création d’un ensemble de Cantor pour  $N = 2$ . La ligne continue rouge correspond au support initial à partir duquel ont été construites les pré-fractales verte, bleue et violette après respectivement une, deux et trois applications de la transformation  $S$  qui répétées à l’infini permettraient de construire cette fractale.

Reprenons l’exemple de l’ensemble de Cantor  $F$ , sa dimension fractale vaut  $dim_H(F) = \frac{\log(N)}{\log(N+1)}$  d’après (1.63). Les ensembles de Cantor définissent les supports de fractales déterministes et uniformes, plongés dans un espace euclidien  $\mathbb{R}$ . On peut aussi calculer leur dimension de Bouligand Minkowski en choisissant par exemple la méthode des boîtes. Ainsi il faudrait  $N^k$  cubes fermés de diamètre  $\sqrt{1}\varepsilon = (N + 1)^{-k}$  pour recouvrir le support  $F$  de l’ensemble de Cantor et donc d’après (1.44), on obtient  $dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{-\log(\varepsilon)} = \frac{k \cdot \log(N)}{k \cdot \log(N + 1)} = \frac{\log(N)}{\log(N + 1)} = dim_H(F)$

L’assertion (1.66) pourrait être généralisée à toutes les fractales auto-similaires. De même que pour toutes les fractales auto-similaires, on pourrait démontrer que leur  $S$  respectent les conditions de l’ensemble ouvert. Cependant dans ce travail nous nous limiterons à le démontrer uniquement pour l’ensemble de Cantor afin d’illustrer cette propriété.

### 1.4.3 . Exemple de fractales auto-similaires

#### Poussières de Cantor

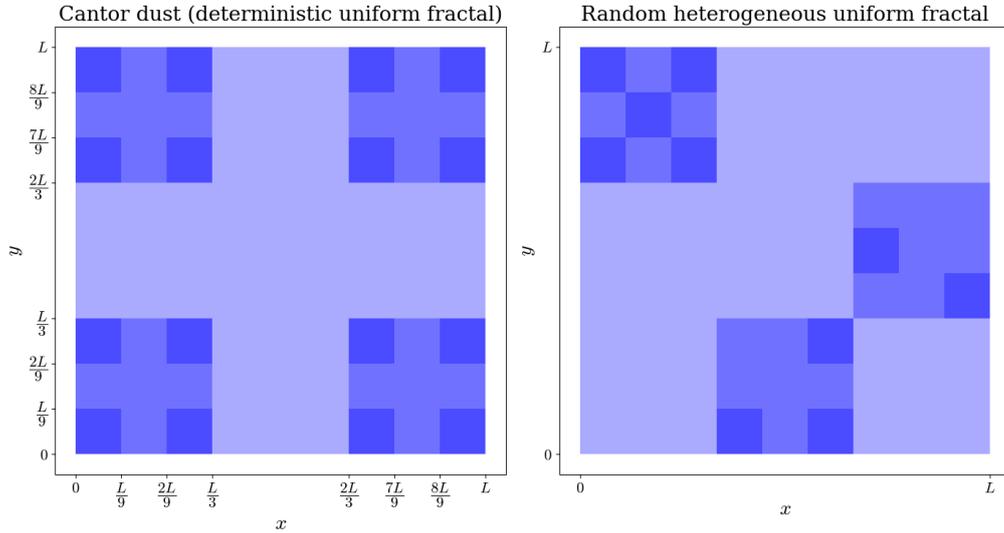


Figure 1.9 – (gauche) Poussière de Cantor pour  $N = 2$  plongée dans un espace euclidien  $\mathbb{R}^2$ , à partir de laquelle la transformation  $S$  de la fractale statistique hétérogène uniforme (droite) est inspirée. Chacune de ces deux figures superpose le support carré plein initial ainsi que les pré-fractales obtenues lors des deux premières itérations du processus récursif grâce auquel chacune de ces deux fractales pourrait être construite. La couleur bleu clair est associée aux supports initiaux, tandis que le bleu et le bleu foncé aux supports des pré-fractales respectivement obtenues à l'issue de la première et la deuxième application des transformations qui répétées à l'infini permettraient de créer ces deux fractales.

Soit  $F \subset \mathbb{R}^n$  une poussière de Cantor. La relation (1.61) pour la poussière de Cantor s'écrit :

$$H^s(F) = \sum_{i=1}^{N^n} \left(\frac{1}{N+1}\right)^s H^s(F) \iff N^n \left(\frac{1}{N+1}\right)^s = 1 \quad (1.67)$$

La dimension fractale de la poussière de Cantor  $F$  vaut  $dim_H(F) = \frac{n \cdot \log(N)}{\log(N+1)}$ ,  $\forall N > 1$  d'après (1.63). Sur la gauche de la (Fig.1.9) est représentée un support carré plein initial auquel sont superposées les pré-fractales fruits des deux premières itérations du processus récursif, qui poursuivi à l'infini permettra la création de cette fractale d'une poussière de Cantor pour  $n = 2$ .

Les poussières de Cantor définissent les supports de fractales déterministes et uniformes, plongés dans un espace euclidien  $\mathbb{R}^n$ .

On peut aussi calculer leur dimension de Bouligand Minkowski en choisissant par exemple la méthode des boîtes, quand bien même on sait grâce à (1.66) qu'elle est égale à celle de

Hausdorff. Ainsi il faudrait  $(N^n)^k$  boules fermées de diamètre  $\varepsilon = (N + 1)^{-k}$  pour recouvrir le support  $F$  de la poussière de Cantor et donc d'après (1.44) on obtient  $\dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0}$

$$\frac{\log(M_\varepsilon(F))}{-\log(\varepsilon)} = \frac{nk \cdot \log(N)}{k \cdot \log(N + 1)} = \frac{n \cdot \log(N)}{\log(N + 1)}$$

### Courbe triadique de von Koch

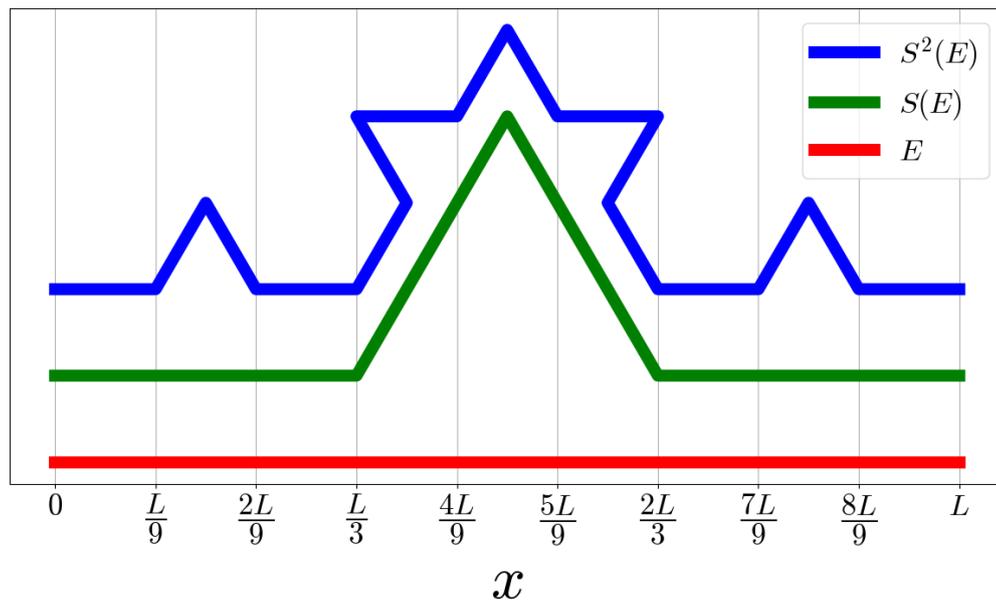


Figure 1.10 – De bas en haut suivant l'axe des ordonnées les trois premières étapes du processus récursif à l'origine de la création de la courbe triadique de von Koch. La courbe rouge correspond au support initial à partir duquel ont été construites les courbes pré-fractales verte et bleue après respectivement une et deux applications de la transformation  $S$  qui répétées à l'infini permettraient de construire cette fractale.

Soit  $F \in \mathbb{R}^2$  la courbe triadique de von Koch. La relation (1.61) pour la courbe triadique de von Koch s'écrit :

$$H^s(F) = 4\left(\frac{1}{3}\right)^s H^s(F) \iff 4\left(\frac{1}{3}\right)^s = 1 \quad (1.68)$$

La dimension fractale de la courbe triadique de von Koch  $F$  vaut  $\dim_H(F) = \frac{\log(4)}{\log(3)}$ ,  $\forall N > 1$  d'après (1.63). Sur la (Fig.1.10) sont déclinées de bas en haut, à partir d'un support initial se résumant à une ligne, les trois premières étapes de processus récursif qui à l'infini aboutira à la construction du support de la courbe de von Koch. En rouge est représenté la ligne  $E$  support initial à partir duquel si on lui applique la transformation  $S$ , sera obtenue la courbe verte  $S(E)$  à qui de nouveau si on applique une nouvelle fois cette transformation, la courbe bleue  $S^2(E)$  en résultera.

La courbe triadique de von Koch définit le support, plongé dans un espace euclidien  $\mathbb{R}^2$ , d'une fractale déterministe et uniforme.

On peut aussi calculer leur dimension de Bouligand Minkowski en choisissant par exemple la méthode des compas, quand bien même on sait grâce à (1.66) qu'elle est égale à celle de Hausdorff. Ainsi il faudrait  $(4)^k$  boules fermées disjointes de diamètre  $\varepsilon = (3)^{-k}$  pour recouvrir le support  $F$  de la courbe triadique de von Koch et donc d'après (1.46) on obtient

$$\dim_B(F) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 1 - \frac{\log(M_\varepsilon(F))}{-\log(\varepsilon)} = 1 - \frac{k \cdot \log(4) - k \cdot \log(3)}{k \cdot \log(3)} = \frac{\log(4)}{\log(3)}$$

### Exemple de fractale déterministe et non uniforme

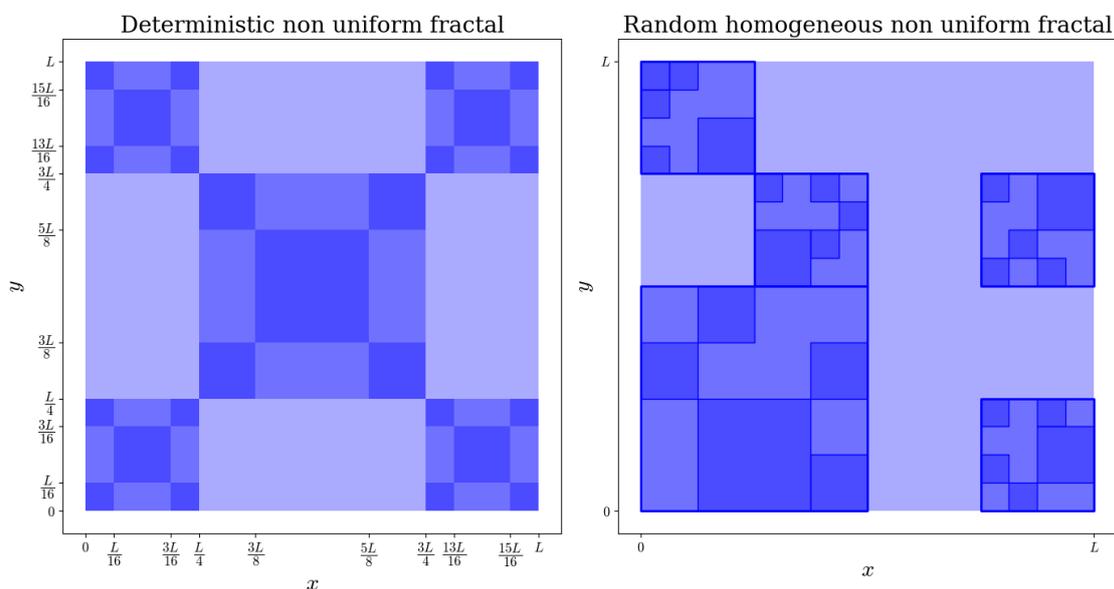


Figure 1.11 – (gauche) Un exemple de fractale déterministe et non uniforme (From J.F. Gouyet [30]), à partir de laquelle la transformation  $S$  de la fractale statistique homogène non uniforme (droite) est inspirée. Chacune de ces deux figures superpose le support carré plein initial ainsi que les pré-fractales obtenues lors des deux premières itérations du processus récursif grâce auquel chacune de ces deux fractales pourrait être construite. La couleur bleu claire est associée aux supports initiaux tandis que le bleu et le bleu foncé aux supports des pré-fractales respectivement obtenues à l'issue de la première et la deuxième application des transformations qui répétées à l'infini permettraient de créer ces deux fractales.

Soit  $F \in \mathbb{R}^2$  la fractale déterministe et non uniforme satisfaisant la relation (1.61) telle que :

$$H^s(F) = 4\left(\frac{1}{4}\right)^s H^s(F) + \left(\frac{1}{2}\right)^s H^s(F) \iff 4\left(\frac{1}{4}\right)^s + \left(\frac{1}{2}\right)^s = 1 \quad (1.69)$$

La dimension de cette fractale déterministe et non uniforme  $F$  vaut  $dim_H(F) = \frac{\log(1+\sqrt{17})}{\log(2)} - 1$  d'après (1.63) en posant  $X = 2^s$  et en résolvant le polynôme d'ordre 2 en  $X$  ainsi obtenu. Sur la gauche de la (Fig.1.11) est représentée un support carré plein initial auquel sont superposées les pré-fractales fruits des deux premières itérations du processus récursif, qui poursuivi à l'infini permettra la création de cette fractale.

### Exemple de fractale non uniforme statistique homogène

Soit  $F \in \mathbb{R}^2$  la fractale statistique homogène et non uniforme dont la transformation  $S = \sum_{i=1}^N S_i$  est identique à celle de la fractale représentée à gauche de la (Fig.1.11) à l'exception faite que les isométries  $f_i$  qui composent les transformations  $S_i = f_i \circ s_i$  sont choisies aléatoirement parmi un ensemble d'isométries données. Ainsi d'après (1.37) la dimension de cette fractale statistique homogène et non uniforme  $F$  vaut aussi  $dim_H(F) = \frac{\log(1+\sqrt{17})}{\log(2)} - 1$ . Sur la droite de la (Fig.1.11) est représentée un support carré plein initial auquel sont superposées les pré-fractales fruits des deux premières itérations du processus récursif, qui poursuivi à l'infini permettra la création de cette fractale.

### Exemple de fractale uniforme statistique hétérogène

Soient  $F \in \mathbb{R}^2$  la fractale uniforme statistique hétérogène dont la transformation  $S = \sum_{i=1}^X f_i \circ s$  telle que  $X \in [1, 3]$  une variable aléatoire régie par la loi de probabilité  $P$ , partage la même contraction  $s$  que celle de la transformation à l'origine de la création de la poussière de cantor pour  $N = 2$  plongée dans un espace euclidien  $\mathbb{R}^2$ . Dès lors la relation (1.61) pour cette fractale s'écrit :

$$H^s(F) = \sum_{i=1}^{\mathbb{E}(X)} \left(\frac{1}{N+1}\right)^s H^s(F) \iff \mathbb{E}(X) \left(\frac{1}{N+1}\right)^s = 1 \quad (1.70)$$

La dimension de cette fractale uniforme statistique hétérogène  $F$  vaut  $dim_H(F) = \frac{\log(\mathbb{E}(X))}{\log(N+1)}$  d'après (1.63). Sur la droite de la (Fig.1.9) est représentée un support carré plein initial auquel est superposé les pré-fractales fruits des deux premières itérations du processus récursif, qui poursuivi à l'infini permettra la création de cette fractale.

## 1.5 . Fractales auto-affines

On dit d'une fractale qu'elle est auto-affine lorsque la ou les  $N$  transformations  $S_i$  à l'origine du processus récursif capable de construire son support  $F$  sont des transformations affines. Les similitudes (1.23) ainsi que les isométries (1.24) sont des transformations affines, l'inverse n'étant pas vrai. Ainsi donc une fractale auto-similaire est une fractale auto-affine qui a la particularité d'être construite exclusivement par des similitudes.

### 1.5.1 . Transformations affines

Reste à définir maintenant ce qu'est une transformation affine dans le cadre des espaces euclidiens. Pour cela il nous faut définir au préalable ce qu'est une transformation semi-affine.

Soit un espace affine  $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^n$  tel que sa dimension  $\dim(\mathcal{E}) \geq 2$ , d'après [100], une application  $f$  est une transformation semi-affine si elle définit une bijection de  $\mathcal{E}$  dans  $\mathcal{E}$  vérifiant les deux propositions ci-dessous :

- **conservation de la dimension entre le sous-espace de départ et le sous-espace d'arrivée, tous les deux inclus dans  $\mathcal{E}$  :**

$$\forall \mathcal{F} \subset \mathcal{E}, f(\mathcal{F}) \subset \mathcal{E} \text{ \& } \dim(f(\mathcal{F})) = \dim(\mathcal{F})$$

- **conservation du parallélisme entre deux sous-espaces affines de  $\mathcal{E}$  :**

$$\forall (\mathcal{F}, \mathcal{G}) \subset \mathcal{E}^2, \mathcal{F} \text{ \& } \mathcal{G} \text{ parallèles } \implies f(\mathcal{F}) \text{ \& } f(\mathcal{G}) \text{ parallèles}$$

Toujours d'après [100], les transformations affines  $f$  de  $\mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}$  se définissent alors comme les transformations semi-affines pour lesquelles  $\forall (a, b, c, d) \in \mathcal{E}^4$  formant les segments parallèles  $[ab]$  et  $[cd]$  tels que  $a \neq b, c \neq d$  :

$$\forall (a, b, c, d) \in \mathcal{E}^4, \left\{ \begin{array}{l} a \neq b \\ c \neq d \end{array} \right., [ab] \text{ \& } [cd] \text{ parallèles } \implies \frac{\|f(a) - f(b)\|}{\|f(c) - f(d)\|} = \frac{\|a - b\|}{\|c - d\|} \quad (1.71)$$

L'ensemble des similitudes et donc des isométries satisfont (1.71) et en font donc des transformations affines. Restent les transvections ou cisaillements et les contractions anisotropes qui elles sont à ranger exclusivement dans l'ensemble des transformations affines. On pourra définir ces applications grâce notamment à leurs représentations matricielles :

$$\begin{pmatrix} \tau_1 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1(n-1)} & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \tau_2 & \cdots & \sigma_{2(n-1)} & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \tau_{n-1} & \sigma_{(n-1)n} \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{n(n-1)} & \tau_n \end{pmatrix} \quad (1.72)$$

La représentation matricielle d'une transvection se caractérise par :

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2, \tau_i = 1 \text{ et } \sigma_{ij} \neq 1 \quad (1.73)$$

La représentation matricielle d'une contraction anisotrope se caractérise par :

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2, \tau_i \in ]0, 1[ \text{ et } \sigma_{ij} = 0 \quad (1.74)$$

Le cas des contractions anisotropes nous intéressera plus particulièrement dans la suite de ce travail, et tout particulièrement dans la section 5.3. Ainsi nous allons vérifier que pour ces transformations (1.39) et (1.40) sont toujours vraies et que l'on peut donc définir un unique support  $F$  invariant pour  $S$  quand bien même celle-ci serait une ou la somme de contractions anisotropes.

**démonstration** : Soient les  $N$  contractions anisotropes  $S_I$  telles que  $\forall I \in \llbracket 1, N \rrbracket, \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \forall (x, y) \in (\mathbb{R}^n)^2, |(S_I(x))_i - (S_I(y))_i| = (\tau_I)_i |x_i - y_i|$ , avec  $(\tau_I)_i \in ]0, 1[$ . Refaisons

l'hypothèse que nous allons démontrer par la suite qu'il existe parmi l'ensemble  $\mathcal{A}$  des sous-ensembles compacts et fermés  $E \subset D$  avec  $D \subset \mathbb{R}^n$  un sous-ensemble compact fermé non vide limite  $F \subset \mathbb{R}^n \mid F = S(F)$  alors :

$$d(F, S(E)) = d(S(F), S(E)) = d\left(\bigcup_{I=1}^N S_I(F), \bigcup_{I=1}^N S_I(E)\right)$$

$$\iff d\left(\bigcup_{I=1}^N S_I(F), \bigcup_{I=1}^N S_I(E)\right) \leq \max_I \left( \{d(S_I(F), S_I(E))\} \right) = \max_I \left( \left\{ \max_i \left( \{(\tau_I)_i\} \right) \right\} \right) d(F, E)$$

alors  $\forall k \in \mathbb{N}^*$  on a :

$$0 < d(F, S^k(E)) = d(S^k(F), S^k(E)) \leq \max_I \left( \left\{ \max_i \left( \{(\tau_I)_i\} \right) \right\} \right)^k d(F, E) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0 \quad (1.75)$$

$$\iff d(F, S^k(E)) \xrightarrow[k \rightarrow +\infty]{} 0$$

Étant donné que  $E$  est un sous-ensemble compact (fermé) non vide de  $\mathbb{R}^n$  alors  $\forall k \in \mathbb{N}$ ,  $S^k(E)$  seront eux aussi des sous-ensembles nécessairement non vides et compacts fermés de  $\mathbb{R}^n$  alors lorsque  $k \rightarrow +\infty$  les  $S^k(E)$  tendent vers un sous-ensemble compact (fermé) non vide limite  $F$  appelé support tel que  $\forall k \in \mathbb{N}$ ,  $F = S(F)$ . Pour ce qui est de l'unicité de  $F$  on peut le démontrer par l'absurde. Soient  $(A, B) \subset \mathcal{A}^2$  tels que  $A = S(A)$  et  $B = S(B)$  :

$$d(A, B) = d(S(A), S(B)) = d\left(\bigcup_{I=1}^N S_I(A), \bigcup_{I=1}^N S_I(B)\right)$$

$$\iff d\left(\bigcup_{I=1}^N S_I(A), \bigcup_{I=1}^N S_I(B)\right) \leq \max_I \left( \{d(S_I(A), S_I(B))\} \right) = \max_I \left( \left\{ \max_i \left( \{(\tau_I)_i\} \right) \right\} \right) d(A, B)$$

or  $\tau_i \neq 0$  d'où  $d(A, B) = 0$  ce qui signifie que  $A = B$  et finit de démontrer l'unicité de  $F$ .

### 1.5.2 . Exemples de fractales auto-affines

Contrairement à ce que l'on avait pu énoncer pour les fractales auto-similaires, il n'existe pas de méthode générique analogue à celle décrite dans la sous-section 1.4.1, permettant de calculer la dimension de Hausdorff des fractales auto-affines. Ainsi il n'existe pas non plus de formule simple, à l'instar de (1.63) pour calculer la dimension de Hausdorff dans le cas où les transformations  $S_i$  sont affines.

### ...uniformes et incluses dans $\mathbb{R}^2$

Ici nous allons présenter une certaine catégorie de fractales auto-affines dont les procédures  $S$  à l'origine de la construction de celles-ci sont des bijections de l'ensemble  $\mathbb{R}^2$  dans lui même définies telles que :

$$S = f \circ \sum_{i=1}^N g_i \quad \mid \quad \forall (p, q) \in (\mathbb{R}^{*+})^2, f = \begin{pmatrix} \frac{1}{q} & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix} \quad \& \quad N \in \llbracket 1, n \cdot p \rrbracket \quad (1.76)$$

avec  $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ ,  $g_i$  des isométries ou des compositions d'isométries et d'après [22] la dimension de Hausdorff de ces fractales est donnée par le résultat suivant :

$$\dim_H(F) = \frac{\log\left(\sum_{j=1}^p N_j^{\frac{\log(p)}{\log(q)}}\right)}{\log(p)} \quad (1.77)$$

tandis que celle de Bouligand-Minkowski se calcule telle que :

$$\dim_B(F) = \frac{\log(p^*)}{\log(p)} + \frac{\log\left(\sum_{j=1}^p N_j\right) - \log(p^*)}{\log(q)} \quad (1.78)$$

avec  $p$  le nombre de lignes,  $q$  le nombre de colonnes,  $p^*$  le nombre de lignes pour lesquelles on retrouve le support  $F$ , et enfin pour chaque ligne  $\forall j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ ,  $N_j$  le nombre de colonnes pour lesquelles on retrouve le support  $F$ . Ici nous ne démontrerons pas les formules (1.77) et (1.78), mais nous allons les appliquer à différents cas de figure.

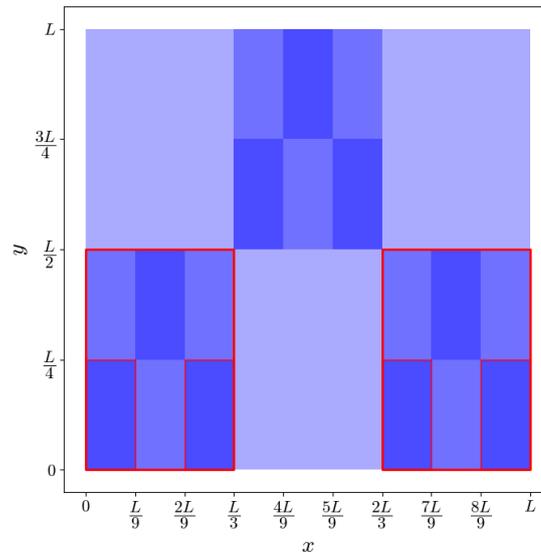


Figure 1.12 – Trois premières étapes du processus récursif à l'origine de la création d'une fractale auto-affine uniforme incluse dans l'espace euclidien  $\mathbb{R}^2$ . La couleur bleu clair est associée au support initial carré plein à partir duquel ont été construits après respectivement une et deux applications de la transformation affine, les supports des pré-fractales respectivement bleu et bleu foncé. Encadrés en rouges sont les motifs pour lesquels si l'on conserve exclusivement les transformations affines responsables de leurs constructions, cette fractale se résumera à l'ensemble de Cantor pour  $N = 2$  représenté sur la (Fig.1.8).

Commençons par le cas de la fractale représentée sur la (Fig.1.12) conçue grâce à la procédure  $S = f \circ \sum_{i=1}^3 g_i$  avec  $f = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ . La dimension de Hausdorff de cette fractale est  $dim_H(F) \simeq 1,35$  tandis que celle de Bouligand-Minkowski  $dim_B(F) \simeq 1,37$ , cependant on rappelle (1.49) : "dans le cas général où une fractale n'est pas auto-similaire  $dim_H(F) \leq dim_B(F)$ ", ce qui est notre cas ici et donc comme prévu cette fractale auto-affine vérifie bien (1.49). A présent si l'on retire de la procédure  $S$  à l'origine de la création de la fractale représentée sur la (Fig.1.12), l'isométrie qui composée à la contraction anisotrope  $f$  permet la construction du motif non encadré en rouge répété à l'infini, on obtient une nouvelle fractale pour laquelle cette fois  $dim_H(F) = dim_B(F) = \frac{\log(2)}{\log(3)}$ . Cette dimension fractale n'est pas sans nous rappeler celle calculée précédemment pour l'ensemble de Cantor (1.67) dans le cas illustré par la (Fig.1.8) où celui-ci est inclus dans l'ensemble  $\mathbb{R}$  et telle que  $N = 2$ . Or ce n'est pas une coïncidence bien que cela aurait pu l'être, cette nouvelle fractale obtenue en modifiant  $S$  est bel et bien cet ensemble de Cantor, car en fixant  $p^* = 1$ , quel que fût le choix qui aurait pu être fait pour  $p \in \mathbb{N}^*$ , cela revient à supprimer pour le support  $F$  une de ses deux projections  $proj(F) \subset \mathbb{R}^2$ . En effet suivant une des deux directions de l'espace euclidien  $\mathbb{R}^2$ ,  $\forall E \subset \mathbb{R}^2$  telle que  $dim(E) = 2$ , la procédure  $S$  se résume à chaque itération  $n$  du processus itératif, à diviser  $p$  fois la  $proj(E)$  sans jamais multiplier le nombre de ses copies ce qui conduit à faire tendre cette projection vers un point lorsque  $n \rightarrow +\infty$ .

## 1.6 . Courbes fractales

On dit d'une courbe qu'elle est fractale, si celle-ci possède un tracé qui plongé dans l'espace euclidien à deux dimension  $\mathbb{R}^2$ , peut être assimilé à un support  $F \subset \mathbb{R}^2$  pour lequel il existe une bijection  $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$  de la forme :

$$S = \sum_{j=1}^M \left( f_j \circ \sum_{i=1}^{m_j} g_i \right) \quad (1.79)$$

avec  $\forall j \in \llbracket 1, M \rrbracket$ ,  $f_j$  des contractions et  $\forall i \in \llbracket 1, m_j \rrbracket$ ,  $g_i$  des isométries telles que :

$$S(F) = F$$

Autrement dit une courbe est fractale, si son tracé  $F$  reste inchangé lors de l'application d'une transformation résultant de la combinaison linéaire de contractions. On distingue alors les courbes auto-similaires des courbes auto-affines en fonction de la nature respectivement isotrope ou anisotrope des contractions  $f_j$  composant la bijection  $S$  pour laquelle  $S(F) = F$ ,  $F$  le support de ces courbes.

Précédemment dans la sous-section 1.4.3, nous avons présenté la courbe triadique de von Koch. Cette courbe représentée sur la (Fig.1.10) est un exemple de courbe fractale qui ici en l'occurrence est auto-similaire, déterministe et uniforme. Sur la (Fig.1.13) un exemple de courbe fractale auto-affine est donné. Ainsi on peut constater qu'à l'instar de la fractale auto-affine représentée sur la (Fig.1.12) la contraction du support de cette courbe n'est pas la même suivant toutes les directions.

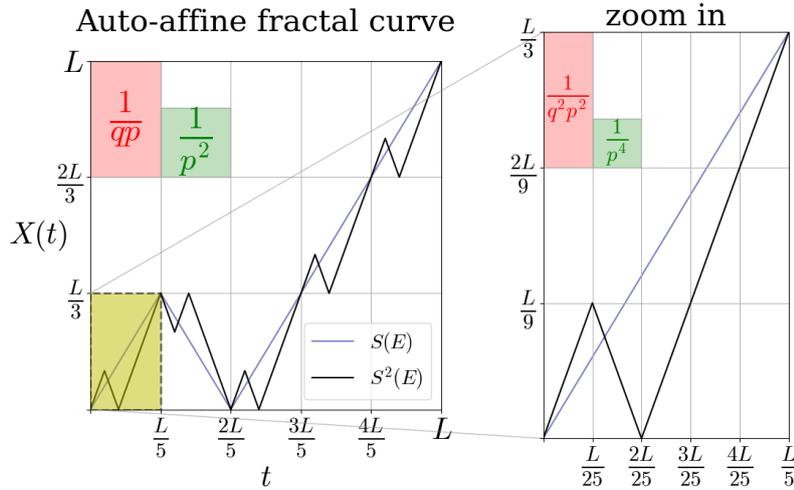


Figure 1.13 – Un exemple de courbe pré-fractale auto-affine, déterministe et uniforme (From J.F.Gouyet [30]) dont le support est obtenu par application successive de la contraction anisotrope  $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$ . Ici on représente cette pré-fractale obtenue après deux itérations de la transformation affine  $S$  et cela suivant ceux deux échelles de contraction. Pour chacune de ces échelles indicées par  $n \in \{1, 2\}$ , sont représentés : en bleu l'ensemble étalon  $A_{\frac{1}{5^n}} \in \mathbb{R}^2$ , cube fermé (1.7) de côté  $\frac{1}{5^n}$ , servant à mesurer la dimension de Bouligand-Minkowski (1.44) de cette courbe suivant la méthode des boîtes et en rouge l'un des  $5^n$  rectangles de largeur  $\frac{1}{5^n}$  et de longueur  $\frac{1}{3^n}$  au moyen desquelles on pourrait recouvrir complètement cette courbe.

D'autres courbes fractales auto-affines seront présentées dans la suite de ce travail, notamment dans les sous-sections 1.6.3 et 5.3.2.

### 1.6.1 . Exposant de Hurst

Dans le cas des courbes fractales auto-affines, il existe un exposant compris entre zéro et un permettant de déterminer très facilement la dimension de Bouligand-Minkowski (1.44) ainsi que le caractère auto-affine ou auto-similaire de ces courbes. Cet exposant noté habituellement  $H$ , porte le nom de Harold Edwin Hurst, un hydrologue dont les travaux [41] et [42], auront été formalisés par Benoît Mandelbrot [65] dans le cadre de la géométrie fractale. Ainsi pour le tracé  $F$  d'une fonction  $X$  donnée, on peut affirmer que cette courbe est fractale si et seulement si :

$$\exists! H \in ]0, 1] \mid \sqrt{\text{var}(\delta X(\delta t))} \propto \delta t^H, \forall \delta t \in \mathbb{R}^+ \quad (1.80)$$

avec  $\text{var}(\delta X(\delta t))$  la variance de la fonction  $\delta X(t, \delta t) = X(t + \delta t) - X(t)$ ,  $\forall (t, \delta t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$  construite à partir de la fonction  $X$ .

**démonstration** : Soit  $F \in \mathbb{R}^2$  le support d'une courbe fractale, tracé d'une fonction  $X$ ,

vérifiant  $S(F) = F$  telle que  $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{q} & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}$ ,  $\forall (p, q) \in (\mathbb{R}^{*+})^2$  est une contraction potentiellement anisotrope. Ainsi pour des variations  $\delta X(t, \delta t) = X(t + \delta t) - X(t)$ ,  $\forall t \in \mathbb{R}$  de la fonction  $X$  pour un  $\delta t \in \mathbb{R}^+$  donné, en appliquant la contraction  $S$  au support  $F$ , on obtient alors :  $S(\delta t) = \frac{1}{q}\delta t$  et  $\sqrt{\text{var}(S(\delta X(\delta t)))} = \sqrt{\frac{1}{p^2}\text{var}(\delta X(\delta t))} = \frac{1}{p}\sqrt{\text{var}(\delta X(\delta t))}$ . Dès lors  $\exists! H = \frac{\log(p)}{\log(q)} \in ]0, 1]$  tel que  $\forall \delta t \in \mathbb{R}^+$  l'échelle à laquelle on se place,  $\sqrt{\text{var}(\delta X(\delta t))} \propto \delta t^H$  est toujours vrai. Nous ne démontrerons pas ici la réciproque car celle-ci est triviale.

Une équation équivalente à (1.80) est :

$$\exists! H \in ]0, 1] \mid \sqrt{\text{var}(\delta X(\delta t))} \propto \nu^{-H} \sqrt{\text{var}(\delta X(\nu \delta t))}, \forall (\nu, \delta t) \in (\mathbb{R}^+)^2 \quad (1.81)$$

De plus si le tracé  $F$  de cette fonction  $X$  est une courbe fractale alors :

$$F : \begin{cases} \text{est auto-similaire} & \text{si } H = 1 \\ \text{est auto-affine} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.82)$$

**démonstration :** Lorsque l'exposant de Hurst  $H = 1$  alors cela implique que pour la contraction  $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{q} & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}$ ,  $\forall (p, q) \in (\mathbb{R}^{*+})^2$  telle que  $S(F) = F$ ,  $p = q$ . Dans ce cas  $S$  est une contraction isotrope et par conséquent la courbe fractale  $F$  est auto-similaire. En revanche lorsque  $H \neq 1$  alors  $p \neq q$ , autrement dit  $S$  est une contraction anisotrope et donc le support  $F$  est auto-affine.

Enfin la dimension de Bouligand-Minkowski (1.44) d'une courbe fractale dont on connaît l'exposant de Hurst  $H = \frac{\log(p)}{\log(q)} \in ]0, 1]$  est donnée par la formule suivante :

$$\dim_B(F) = 2 - H \quad (1.83)$$

**démonstration :** Sur la (Fig.1.13), on a représenté pour  $n \in \{1, 2\}$ ,  $q = 5$  et  $p = 3$  : en bleu l'ensemble étalon  $A_{\frac{1}{q^n}} \in \mathbb{R}^2$ , cube fermé (1.7) de coté  $\frac{1}{q^n}$ , servant à mesurer la dimension de Bouligand-Minkowski (1.44) d'une courbe fractale suivant la méthode des boîtes et en rouge l'un des  $q^n$  rectangles de largeur  $\frac{1}{q^n}$  et de longueur  $\frac{1}{p^n}$  au moyen desquelles on pourrait recouvrir complètement une courbe auto-affine. Dès lors si on généralise  $\forall (n, q, p) \in \mathbb{N} \times (\mathbb{R}^{*+})^2$ , on comprend que pour recouvrir totalement le support  $F$  d'une courbe fractale auto-affine telle que  $S(F) = F$  et  $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{q} & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}$ ,  $\forall (p, q) \in (\mathbb{R}^{*+})^2$  une contraction anisotrope, il nous faudra

$M_{\frac{1}{q^n}}(F) = q^n \cdot \frac{1}{q^n p^n} / \frac{1}{q^{2n}}$  cubes fermés  $A_{\frac{1}{q^n}} \in \mathbb{R}^2$  avec  $\frac{1}{q^n p^n} / \frac{1}{q^{2n}}$  la proportion de cube fermé nécessaire pour recouvrir l'un des  $q^n$  rectangles de largeur  $\frac{1}{q^n}$  et de longueur  $\frac{1}{p^n}$ . Ainsi  $M_{\frac{1}{q^n}}(F) = q^{n(2-H)}$  et donc d'après (1.44)  $\dim_B(F) = 2 - H$ .

On peut aussi généraliser la loi de Hurst (1.80) dans le cas des courbes fractales non-uniformes ou pour celles dont la multiplicité de leurs uniques motifs est supérieur à un :

$$\forall j \in [1, M], \exists! H_j \in ]0, 1] \mid \sqrt{\text{var}(\delta X(\delta t))} = \frac{\sum_{j=1}^M (m_j + 1) \cdot \lambda_j \cdot \delta t^{H_j}}{M}, \forall \delta t \in \mathbb{R}^+ \quad (1.84)$$

avec  $m_j$  la multiplicité,  $\lambda_j$  le coefficient de proportionnalité et  $H_j$  l'exposant de Hurst correspondant à la  $i^{me}$  échelle de contraction.

### 1.6.2 . Décompositions en ondelettes

A présent nous allons présenter un formalisme mathématique qui nous sera grandement utile lors de l'analyse de courbes fractales car intimement lié à l'exposant de Hurst. A l'instar de l'analyse de Fourier, les ondelettes permettent de décomposer un signal complexe dans une base d'Hilbert. Cependant lorsque l'analyse de Fourier s'attache à identifier les différentes fréquences composant un signal  $X(t), \forall t \in \mathbb{R}$ , la décomposition en ondelette, quant à elle permet de mettre en évidence les possibles brutales variations de ce signal dans le temps.

On définit ainsi les ondelettes comme les fonctions de carré sommable<sup>2</sup> de la forme :

$$\forall(\nu, \tau, m, n) \in [1, +\infty[ \times \mathbb{R}^{+*} \times \mathbb{Z}^2, \Psi_{m,n}(t) = \sqrt{\frac{\nu^m}{\tau}} \cdot \Psi\left(\frac{\nu^m t - n\tau}{\tau}\right) \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}) \quad (1.85)$$

formant une base hilbertienne, avec  $\Psi \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  l'ondelette mère. Autrement dit une base orthonormale de l'espace  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  qui pour le produit scalaire défini dans cet espace tel que :

$$\forall(X, Y) \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}) \times \mathbf{L}^2(\mathbb{R}), \langle X|Y \rangle = \int_{\mathbb{R}} X(t)Y(t)dt \quad (1.86)$$

satisfait l'ensemble des propriétés suivantes :

$$\forall(m_1, n_1, m_2, n_2) \in \mathbb{Z}^4, \langle \Psi_{m_1, n_1} | \Psi_{m_2, n_2} \rangle = \delta_{m_1, m_2} \delta_{n_1, n_2} \quad (1.87)$$

$$\forall(m, n) \in \times \mathbb{Z}^2, \langle \Psi_{m, n} | \Psi_{m, n} \rangle = \|\Psi_{m, n}\|^2 = 1 \quad (1.88)$$

$$\forall(m, n) \in \mathbb{Z}^2, \forall X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}), X(t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \langle X | \Psi_{m, n} \rangle \Psi_{m, n}(t) \quad (1.89)$$

Ainsi que la propriété de moyenne nulle des ondelettes :

$$\forall X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}), \int_{\mathbb{R}} X(t)dt = 0 \quad (1.90)$$

Un signal quelconque défini par la fonction  $X \in \mathbf{L}^2$  pourra donc être reconstitué par la combinaison linéaire des vecteurs d'une base d'ondelettes et ainsi s'écrire sous la forme :

$$X \equiv \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \Phi_m \quad (1.91)$$

$$\Phi_m \equiv \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \langle X | \Psi_{m, n} \rangle \cdot \Psi_{m, n} \quad (1.92)$$

---

2.  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  est un espace hilbertien renvoyant à l'ensemble des fonctions du type  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  tel que  $\int_{\mathbb{R}} |f(t)|^2 dt$  converge. Autrement dit si  $|f(t)|^2$  est intégrable sur  $\mathbb{R}$  et que son résultat est un nombre fini.

## Décomposition en ondelettes de Haar

Parmi l'ensemble des fonctions disponibles pour former une base d'ondelettes de l'espace  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$ , la première à avoir été décrite [31] et portant le nom de son découvreur Alfred Haar est aussi la plus simple. Dans la suite de notre travail, lorsque nous serons amenés à décomposer un signal au moyen d'une décomposition en ondelettes, nous le ferons systématiquement suivant une base d'ondelettes de Haar. La fonction  $\Psi \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  définie telle que :

$$\forall \tau \in \mathbb{R}^{+*}, \Psi(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ 1 & \text{si } \frac{1}{2} \leq x < 1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.93)$$

correspond à l'ondelette mère à partir de laquelle d'après (1.85) pour  $\nu = 2$  on pourra construire toutes les autres ondelettes de Haar  $\forall (m, n) \in \times \mathbb{Z}^2$  s'écrivant telles que :

$$\forall \tau \in \mathbb{R}^{+*}, \Psi_{m,n}(t) = \sqrt{\frac{2^m}{\tau}} \Psi\left(\frac{2^m t - n\tau}{\tau}\right) = \begin{cases} -\sqrt{\frac{2^m}{\tau}} & \text{si } \frac{n\tau}{2^m} \leq t < \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m} \\ \sqrt{\frac{2^m}{\tau}} & \text{si } \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m} \leq t < \frac{(n+1)\tau}{2^m} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (1.94)$$

Ce sont des fonctions de type "créneau" qui ne sont pas sans rappeler la fonction de Heaviside ou bien la fonction porte.

Ainsi à partir de la forme de leur ondelette mère (1.94), il est plutôt aisé de comprendre que les ondelettes de Haar satisferont les propriétés (1.88) et (1.90). Qu'en est-il des deux autres propriétés ? Pour ce qui est de la propriété définissant l'orthogonalité entre les vecteurs de la base des ondelettes de Haar (1.87), on peut la vérifier de la manière suivante :

**démonstration :** Soient  $(\Psi_{m_1, n_1}, \Psi_{m_2, n_2}) \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}) \times \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  deux ondelettes de Haar, vérifions  $\forall (m_1, n_1, m_2, n_2) \in \mathbb{Z}^4$  que ces fonctions sont orthogonales entre elles.

Si  $m_1 = m_2$  et  $n_1 \neq n_2$ , alors  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}] \cap [\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}] = \emptyset$ . Autrement dit les intervalles sur lesquels respectivement les ondelettes  $\Psi_{m_1, n_1}$  et  $\Psi_{m_2, n_2}$  ne sont pas nulles, ne partagent pas d'intersection et donc  $\langle \Psi_{m_1, n_1} | \Psi_{m_2, n_2} \rangle = 0$ . (On rappelle que lorsque  $m_1 = m_2 = m$  et  $n_1 = n_2 = n$ , on se retrouve alors dans la configuration de la propriété (1.88).)

A présent dans le cas où  $m_1 \neq m_2$  et choisissons par exemple que  $m_1 < m_2$ , deux situations sont à envisager :

Si  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}] \cap [\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}] = \emptyset$  alors  $\langle \Psi_{m_1, n_1} | \Psi_{m_2, n_2} \rangle = 0$ . En effet comme précédemment dans le cas où  $m_1 = m_2$ , on se retrouve dans la situation pour laquelle sur l'intervalle  $[\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}]$  où  $\Psi_{m_1, n_1}$  ne s'annule pas,  $\forall t \in [\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}]$ ,  $\Psi_{m_2, n_2}(t) = 0$  et inversement sur l'intervalle  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}]$ .

Qu'en est-il lorsque  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}] \cap [\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}] \neq \emptyset$ . Une intersection non vide entre ces deux intervalles, implique en fait que  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}] \subset [\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}]$ , et plus précisément encore que  $[\frac{n_2\tau}{2^{m_2}}, \frac{(n_2+1)\tau}{2^{m_2}}]$  est inclus soit dans  $[\frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{\tau}{2^{m_1+1}} +$

$\frac{n_1\tau}{2^{m_1+1}}$ , soit dans  $[\frac{\tau}{2^{m_1+1}} + \frac{n_1\tau}{2^{m_1}}, \frac{(n_1+1)\tau}{2^{m_1}}[$ . Quoiqu'il en soit, sur ces deux intervalles  $\Psi_{m_1, n_1}$  est constante et égale respectivement à  $\mp\sqrt{\frac{2^{m_1}}{\tau}}$ . Dès lors d'après (1.90),  $\langle \Psi_{m_1, n_1} | \Psi_{m_2, n_2} \rangle = \mp\sqrt{\frac{2^{m_1}}{\tau}} \cdot \int_{\mathbb{R}} \Psi_{m_2, n_2}(t) dt = 0$ .

Ainsi  $\forall (m_1, n_1, m_2, n_2) \in \mathbb{Z}^4$  nous venons de vérifier la propriété (1.87) pour la famille des ondelettes de Haar.

Désormais il ne reste plus qu'à vérifier la propriété (1.89), traduisant le fait que la famille libre et orthonormale constituée par les ondelettes de Haar est complète pour l'espace  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  et définit donc une base orthonormale de ce dernier. A ce stade il est important de bien faire remarquer que  $\forall X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  et  $\forall (m, n) \in \mathbb{Z}^2$ ,  $\Psi_{m, n}$  une ondelette de Haar, le produit scalaire  $\langle X | \Psi_{m, n} \rangle$  revient en pratique à calculer :

$$\alpha_{m, n} = \langle X | \Psi_{m, n} \rangle = \sqrt{\frac{2^m}{\tau}} \left( \int_{\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}}^{\frac{(n+1)\tau}{2^m}} X(t) dt - \int_{\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}}^{\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}} X(t) dt \right) \quad (1.95)$$

dont le résultat est proportionnel à la valeur moyenne de la fonction  $X$  sur l'intervalle  $I_{(m, n, a)} = [\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}, \frac{(n+1)\tau}{2^m}[$ , moins sa valeur moyenne sur l'intervalle  $I_{(m, n, b)} = [\frac{n\tau}{2^m}, \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}[$  telle que :

$$\langle X | \Psi_{m, n} \rangle \cdot \Psi_{m, n}(t) = \frac{\langle X(t) \rangle_{I_{(m, n, a)}} - \langle X(t) \rangle_{I_{(m, n, b)}}}{2} \cdot \Psi\left(\frac{2^m t - n\tau}{\tau}\right) \quad (1.96)$$

Sur la (Fig.1.14) on aura représenté sur ces intervalles, le tracé d'une fonction quelconque  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  et celui de  $\langle X | \Psi_{m, n} \rangle \cdot \Psi_{m, n}$  de sorte à se figurer l'un des créneaux qui combiné avec les autres d'après (1.91) et (1.92), nous permettra de reconstituer le signal de  $X$  tout entier. Ici nous avons choisi de les tracer côte à côte, pour bien mettre en évidence le fait que l'amplitude crête à crête de  $\langle X | \Psi_{m, n} \rangle \cdot \Psi_{m, n}$  se résume à la différence entre la valeur moyenne de la fonction  $X$  sur l'intervalle  $I_{(m, n, a)} = [\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}, \frac{(n+1)\tau}{2^m}[$ , et celle sur l'intervalle  $I_{(m, n, b)} = [\frac{n\tau}{2^m}, \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}[$ .

Sur la (Fig.1.15), cette fois-ci on a illustré la décomposition d'une fonction quelconque  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  définie nulle sur l'intervalle  $\mathbb{R} \setminus [0, T[$ , suivant une base d'ondelettes de Haar telle que  $\tau = T$  telle que  $\forall m_* \in \mathbb{N}$  :

$$P_{m_*} \equiv \sum_{m=-\infty}^{m_*} \Phi_m \equiv \langle X(t) \rangle_{[0, T[} + \sum_{m=0}^{m_*} \Phi_m \quad (1.97)$$

$$\Phi_{m_*} \equiv \sum_{n_*=0}^{2^{m_*}-1} \langle X | \Psi_{m_*, n_*} \rangle \cdot \Psi_{m_*, n_*} \quad (1.98)$$

**démonstration** : En effet puisque  $\forall t \in \mathbb{R} \setminus [0, T[$ ,  $X(t) = 0$  alors  $\forall m < 0$ ,  $\Phi_m(t) = \langle X | \Psi_{m, 0} \rangle \cdot \Psi_{m, 0} = \frac{2^m}{T} \int_0^{\frac{T}{2^{m+1}}} X(t) dt$  tel que  $\int_0^{\frac{T}{2^{m+1}}} X(t) dt = \int_0^T X(t) dt$ . Ainsi pour une telle fonction,  $\forall m < 0$ ,  $\Phi_m(t) = 2^m \langle X(t) \rangle_{[0, T[}$ . Dès lors  $\sum_{m=-\infty}^{-1} \Phi_m(t) = \langle X(t) \rangle_{[0, T[} \cdot \sum_{m=-\infty}^{-1} 2^m = \langle X(t) \rangle_{[0, T[}$ , en rappelant que la série  $\sum_{m=-\infty}^{-1} 2^m = \sum_{m'=1}^{\infty} \frac{1}{2^{m'}} = 1$ .

Dès lors les approximations  $P_{m_*}$  s'affineront à mesure que  $m_* \in \mathbb{N}$  croît. On comprend ainsi que  $P_{m_*} \xrightarrow{m_* \rightarrow +\infty} X$  et que comme cette assertion est vraie  $\forall X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  alors les ondelettes de Haar  $\Psi_{m,n}$ ,  $\forall(m,n) \in \mathbb{Z}^2$  forment une base de l'espace  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  qui plus est orthonormale.

Nous avons fait le choix dans ce travail de donner une explication plutôt formelle de la décomposition en ondelettes d'un signal. Cependant dans une conférence [15] donnée à l'académie des sciences le 13/03/2018, Ingrid Daubechies physicienne devenue célèbre notamment pour ses travaux sur les ondelettes, propose une vulgarisation très bien amenée des ondelettes de Haar basée sur des exemples simples. Dans son exposé, elle fait le choix de construire  $\forall m \in \mathbb{Z}$  les combinaisons linéaires  $\Phi_m$  à partir des fonctions approchées  $P_m$  d'une fonction  $X$  telles que  $\forall m \in \mathbb{Z}$ ,  $\Phi_m = P_m - P_{m-1}$ . Ainsi cela lui permet de décrire simplement les fonctions approchées  $\forall m \in \mathbb{Z}$ ,  $P_m$  comme les moyennes glissantes sur les intervalles  $[\frac{n\tau}{2^{m+1}}, \frac{(n+1)\tau}{2^{m+1}}[$  de la fonction  $X$ , plutôt que comme des combinaisons linéaires de vecteurs de l'espace  $\mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  bien qu'elle finisse par brièvement l'évoquer au cours de sa présentation.

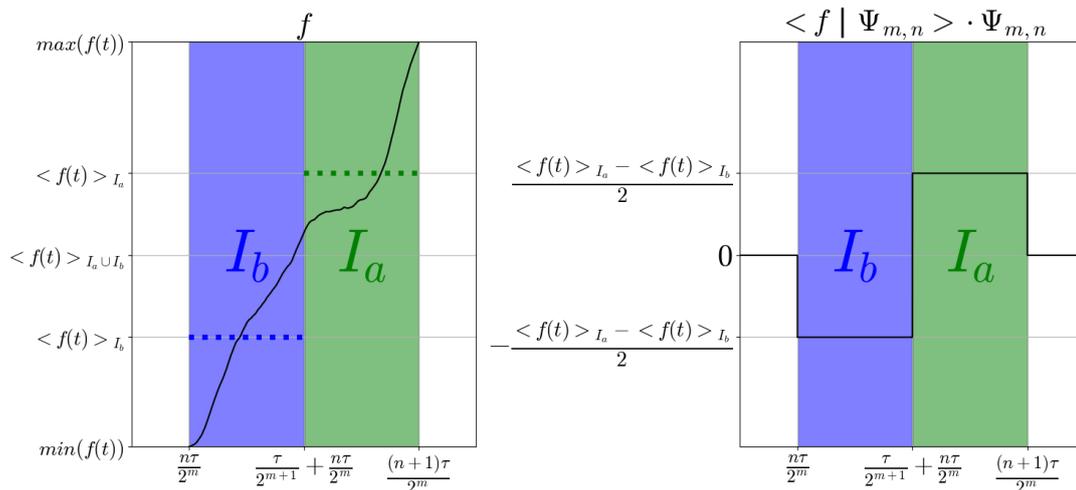


Figure 1.14 – Sur un intervalle  $\forall(m,n) \in \mathbb{Z}^2$ ,  $[\frac{n\tau}{2^m}, \frac{(n+1)\tau}{2^m}[ = I_a \cup I_b$ , on a ici le tracé d'une fonction quelconque  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$ , côte à côte avec celui de l'ondelette de Haar  $\Psi_{m,n}$  multipliée par le produit scalaire  $\langle X | \Psi_{m,n} \rangle$ . Les pointillés bleus respectivement verts situent la valeur moyenne de  $X$  respectivement sur l'intervalle  $I_b = [\frac{n\tau}{2^m}, \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}[$  et sur l'intervalle  $I_a = [\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}, \frac{(n+1)\tau}{2^m}[$ .

### Determination de l'exposant de Hurst d'un signal à partir de sa décomposition en ondelette

Dans [99] Simonsen & al démontrent que l'exposant de Hurst d'une courbe fractale peut être déterminé au moyen de la décomposition suivant une base d'ondelettes de cette dernière. Ainsi pour un signal  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  ils mettent en évidence le fait que celui-ci est une courbe

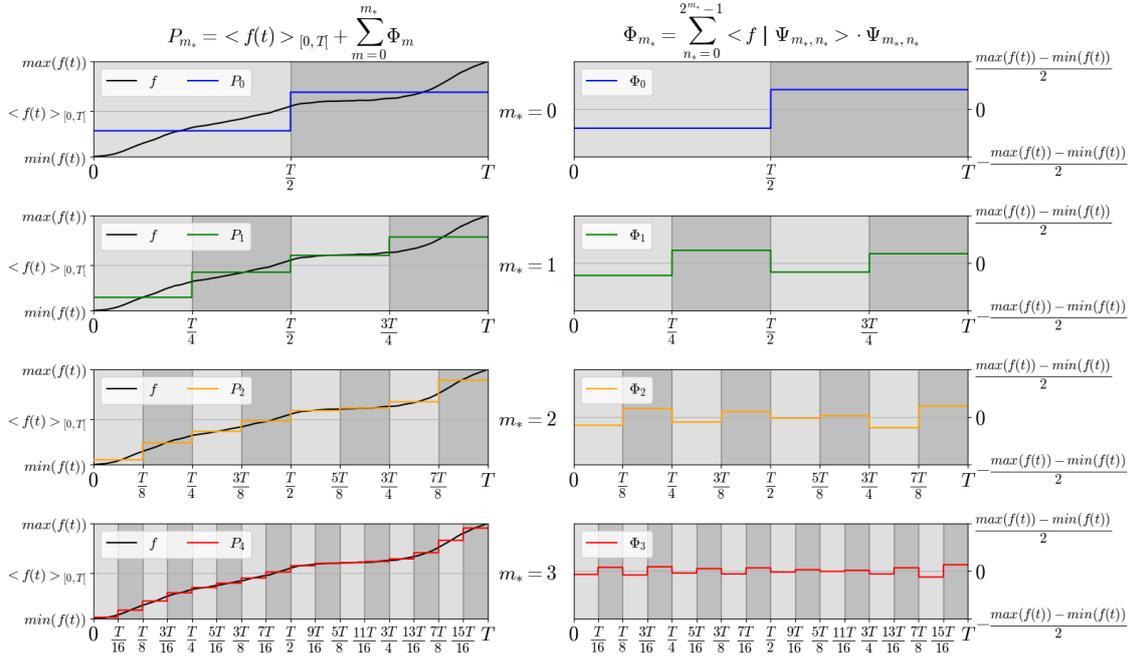


Figure 1.15 – Exemple de décomposition en ondelettes de Haar  $\Psi_{m_*, n_*}$ ,  $\forall (m_*, n_*) \in \mathbb{N}^2$  d'une fonction quelconque  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  définie nulle sur l'intervalle  $\mathbb{R} \setminus [0, T[$ . La base d'ondelettes de Haar est définie telle que  $\tau = T$  et pour chaque rangée de cette figure correspondant à une valeur  $m_*$  donnée, on trace d'après (1.97)  $P_{m_*}$  une fonction approchée de  $X$  (gauche) et d'après (1.97) la combinaison linéaire d'ondelettes de Haar  $\Phi_{m_*}$ . Ainsi on constate que lorsque  $m_* \rightarrow +\infty$ ,  $P_{m_*}$  s'approche de la courbe  $X$  et que les combinaisons linéaires d'ondelettes de Haar  $\Phi_{m_*}$  décomposent les détails de la fonction  $X$ , aux différentes échelles  $\frac{\tau}{2^{m_*}}$ .

fractale si et seulement si :

$$\exists! H \in ]0, 1], \langle |\alpha_m| \rangle = \nu^{-\frac{1}{2}-H} \langle |\alpha_{m-1}| \rangle, \forall m \in \mathbb{Z} \quad (1.99)$$

avec pour un  $m \in \mathbb{Z}$  donné,  $\langle |\alpha_m| \rangle$  la moyenne sur l'ensemble des  $|\alpha_{m,n}| = |\langle X | \Psi_{m,n} \rangle|$ ,  $\forall n \in \mathbb{Z}$ , telles que  $\{\Psi_{m,n}, \forall (m,n) \in \mathbb{Z}^2\}$  soit une base d'ondelettes définies comme d'après (1.85) pour un  $\nu \in [1, +\infty[$  et un  $\tau \in \mathbb{R}^{+*}$ .

**démonstration** : Soit  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  une courbe fractale alors d'après (1.81)  $\forall t \in \mathbb{R}, \exists! H \in ]0, 1], X(t) \cong \lambda^{-H} X(\lambda t)$ ,  $\forall \lambda \in \mathbb{R}^{+*}$  ( $\cong$  signifie ici que ces deux fonctions  $\forall t \in \mathbb{R}$  sont statistiquement congrues). Soit  $\{\Psi_{m,n}, \forall (m,n) \in \mathbb{Z}^2\}$  une base d'ondelettes définies comme d'après (1.85) pour un  $\nu \in [1, +\infty[$  et un  $\tau \in \mathbb{R}^{+*}$ . Dès lors on en déduit que

$\forall (m, n) \in \mathbb{Z}^2, \langle X(t) | \Psi_{m,n}(t) \rangle \cong \nu^{-H} \langle X(\nu t) | \Psi_{m,n}(t) \rangle$  or :

$$\begin{aligned} \nu^{-H} \langle X(\nu t) | \Psi_{m,n}(t) \rangle &= \nu^{-H} \sqrt{\frac{\nu^m}{\tau}} \int_{\mathbb{R}} X(\nu t) \Psi\left(\frac{\nu^m t - n\tau}{\tau}\right) dt \\ &= \nu^{-\frac{1}{2}-H} \sqrt{\frac{\nu^{m-1}}{\tau}} \int_{\mathbb{R}} X(t) \Psi\left(\frac{\nu^{m-1} t - n\tau}{\tau}\right) dt \\ &= \nu^{-\frac{1}{2}-H} \langle X(t) | \Psi_{m-1,n}(t) \rangle \end{aligned}$$

d'où :

$$\forall (m, n) \in \mathbb{Z}^2, \alpha_{m,n} \cong \nu^{-\frac{1}{2}-H} \alpha_{m-1,n}$$

et donc  $\exists! H \in ]0, 1]$ ,  $\langle |\alpha_m| \rangle = \nu^{-\frac{1}{2}-H} \langle |\alpha_{m-1}| \rangle$ ,  $\forall m \in \mathbb{Z}$ . Nous ne démontrerons pas ici la réciproque car celle-ci est triviale.

Dans le cas où la fonction  $X \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R})$  est décomposée suivant une base d'ondelettes de Haar, et que le tracé de celle-ci est une courbe fractale alors  $\forall m \in \mathbb{Z}$ , en multipliant (1.99) par  $\sqrt{\frac{\nu^m}{\tau}}$  on obtient d'après (1.95) :

$$\left\langle \left| \langle X(t) \rangle_{I(m,n,a)} - \langle X(t) \rangle_{I(m,n,b)} \right| \right\rangle = \frac{\left\langle \left| \langle X(t) \rangle_{I(m-1,n,a)} - \langle X(t) \rangle_{I(m-1,n,b)} \right| \right\rangle}{2^H} \quad (1.100)$$

telle que  $\forall (m, n) \in \mathbb{Z}^2, I(m,n,a) = [\frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}, \frac{(n+1)\tau}{2^m}]$  et  $I(m,n,b) = [\frac{n\tau}{2^m}, \frac{\tau}{2^{m+1}} + \frac{n\tau}{2^m}]$ .

### 1.6.3 . Exemples de courbes fractales auto-affines

#### Mouvements browniens scalaires

On dit du mouvement d'une particule que celui-ci est brownien, lorsqu'il est le fruit d'un processus markovien<sup>3</sup> particulier pour lequel  $\forall t \in \mathbb{R}$  un instant donné, lors de la transition entre l'état  $W_t \in \mathbb{R}$  mesuré à cet instant  $t$  et un autre  $W_{t'} \in \mathbb{R}$  cette fois-ci à l'instant  $t' = t + \delta t$ ,  $\forall \delta t \in \mathbb{R}^+$ , l'évolution entre ces deux états est donnée telle que :

$$\Delta W_{\delta t} = W_{t'} - W_t = \mathcal{N}(0, \sigma^2 \delta t) \quad (1.101)$$

avec  $\mathcal{N}(0, \sigma^2 \delta t)$  une loi normale<sup>4</sup> de variance  $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$  et de moyenne nulle. Dans le cas particulier où  $\sigma = 1$ , ce mouvement brownien est défini par un processus de Wiener.

Dans le cas du mouvement brownien, l'état d'une particule est définie par sa position  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  de l'espace à  $n \in \mathbb{N}$  dimensions et  $\Delta \mathbf{x}(\delta t) \in \mathbb{R}^n$  définit donc l'écart entre une position à un instant  $t$  et une autre à l'instant  $t' = t + \delta t$ ,  $\forall \delta t \in \mathbb{R}^+$ . Par conséquent la

3. Un processus markovien est un processus stochastique pour lequel  $\forall t \in \mathbb{R}$  définissant l'instant présent, la transition de l'état  $W_t$  à un autre situé dans le futur, dépend uniquement des informations connues à cette instant présent  $t$  et est parfaitement indépendante de celles contenues dans le passé.

4. La densité de probabilité d'une loi normale  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$  dont la moyenne est définie par  $\mu \in \mathbb{R}$  et la variance  $\sigma^2 \in \mathbb{R}^+$  est de la forme  $\rho(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$ .

probabilité pour que  $\delta \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  corresponde à l'écart mesuré entre deux positions au bout d'une durée  $\delta t \in \mathbb{R}^+$ , sera donc distribuée suivant la loi normale à  $n$  dimensions<sup>5</sup>  $\mathcal{N}(0, 2\mathbf{D}\delta t)$ , elle même obtenue après intégration de l'équation :

$$\forall(\delta \mathbf{x}, \delta t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+, \frac{\partial \rho(\delta \mathbf{x}, \delta t)}{\partial \delta t} = \nabla \mathbf{D} \nabla \rho(\delta \mathbf{x}, \delta t) \quad (1.102)$$

appelée équation de diffusion et pour laquelle  $\mathbf{D}$ , une matrice symétrique telle que  $\forall(i, j) \in \llbracket 1, n \rrbracket^2, D_{i,j} \in \mathbb{R}^+$ , définit ce que l'on appelle son coefficient de diffusion et  $\rho(\delta \mathbf{x}, \delta t)$  la densité de probabilité mesurée au bout d'une durée  $\delta t$  pour un écart  $\delta \mathbf{x}$ . Autrement dit pour une position de départ connue  $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$  à l'instant  $t_0 \in \mathbb{R}$ , la position  $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n, \forall t \in [t_0, +\infty[$  peut être définie par une variable aléatoire  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$  dont la densité probabilité est définie par la loi normale à  $n$  dimensions  $\mathcal{N}(\mathbf{x}_0, 2\mathbf{D}(t - t_0))$ , résultant de l'intégration de l'équation de diffusion suivante :

$$\forall(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+, \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nabla \mathbf{D} \nabla \rho(\mathbf{x}, t) \quad (1.103)$$

et cela en prenant pour conditions initiales  $\mathbf{x}_0$  et  $t_0$ . Or il est à noter que souvent la matrice  $\mathbf{D}$  se résumera à une matrice diagonale dont tous ses éléments sont égaux, ce qui aura pour conséquence de simplifier<sup>6</sup> (1.103) en :

$$\forall(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^+, \frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = D \cdot \Delta \rho(\mathbf{x}, t) \quad (1.104)$$

avec  $D \in \mathbb{R}^+$ , ainsi que  $\forall t \in \mathbb{R}$  la variance  $var(\mathbf{X})$  telle que :

$$\forall t \in \mathbb{R}, var(\mathbf{X}) = n \cdot 2Dt \quad (1.105)$$

Nous reviendrons plus en détail sur la genèse du mouvement brownien dans la sous-section 3.1.2, et notamment sur les raisons qui font que l'équation (1.103) régit la densité de probabilité  $\rho(\mathbf{x}, t)$ .

Ainsi pour un coefficient de diffusion  $\mathbf{D}$ , se résumant à une matrice diagonale dont les éléments sont égaux, le tracé de la position  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  d'une particule en fonction du temps  $t \in \mathbb{R}$ , définit le support d'une courbe pour laquelle la variance des écarts de positions  $\mathbf{x}(t + \delta t) - \mathbf{x}(t), \forall t \in \mathbb{R}$  mesurés pour une durée  $\delta t \in \mathbb{R}^+$  donnée, vérifie d'après (1.105) :

$$\forall \delta t \in \mathbb{R}, \sqrt{var(\delta \mathbf{x}(\delta t))} = \sqrt{n \cdot 2D\delta t} \quad (1.106)$$

ce qui d'après (1.80), signifie que cette courbe est fractale et qui plus est auto-affine puisque son coefficient de Hurst  $H = \frac{1}{2} \neq 1$ .

---

5. La densité de probabilité d'une loi normale multidimensionnelle  $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$  dont la moyenne est définie par  $\mu \in \mathbb{R}^n$  et la matrice de covariance par  $\Sigma \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R}^+)$  est de la forme  $\rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\det(\Sigma)(2\pi)^n}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\frac{(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)}{\Sigma_{i,j}}\right)\right)$ .

6. La densité de probabilité de la loi normale multidimensionnelle  $\mathcal{N}(\mathbf{x}_0, 2\mathbf{D}(t - t_0))$  solution de (1.104) pour les conditions initiales  $\mathbf{x}_0$  et  $t_0$ , verra aussi sa forme se simplifier en  $\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(4\pi D(t - t_0))^n}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right)$ .

## 2 - Dépôts d'agrégats atomiques et diffusion de surface

Par diffusion de surface on entend les mouvements erratiques qu'opèrent à la surface d'un substrat, des particules (atomes, agrégats atomiques) adsorbées sur celui-ci. En général la diffusion de ces dernières est liée à leur agitation thermique et leur distribution à la surface du substrat est décrite par l'équation de diffusion (2.4). Cependant dans ce chapitre, nous verrons par exemple que le potentiel chimique de ces particules à la surface d'un substrat peut impacter localement et dans le temps leurs coefficients de diffusion  $D$  (2.3) et ainsi ajouter de la complexité à cette équation (2.4). Dans la suite, on parlera d'auto-diffusion dans le cas où ces particules sont de la même nature atomique que le substrat et d'hétérodifffusion dans le cas contraire. Ce chapitre s'inspire largement de la revue d'articles à ce sujet compilée par P. Jensen [44] ainsi que l'introduction à la science des surfaces [87] écrite par K. Oura *et al.*. Notre but est de définir correctement le cadre physique dans lequel nos simulations s'inscrivent et ainsi justifier nos choix lors de nos modélisations de l'auto-organisation d'agrégats atomiques.

### 2.1 . Diffusion d'adatoms à la surface d'un substrat

#### 2.1.1 . Mécanisme de diffusion des adatoms à la surface de leur substrat

Pour un substrat dont la structure cristalline ne possède aucun défaut, l'énergie potentielle perçue par les adatoms à la surface de celui-ci correspond à une nappe sur laquelle on retrouve périodiquement les puits dont les positions dépendent de l'arrangement atomique de ce substrat. Ces puits énergétiques ou minimums d'énergies locaux associés à la valeur  $E_{min}$ , correspondent au sites d'adsorptions inter-atomiques dans lesquels les adatoms (les atomes adsorbés) pourront se loger<sup>1</sup> ; tandis que les maximums  $E_{max}$  quant à eux se situent là où sont agencés les atomes constituant le réseau cristallin. Ainsi suivant leurs excitations thermiques, les adatoms seront en mesure ou non d'effectuer des sauts d'un site d'adsorption à un autre. Pour cela leurs énergies devront être supérieures à la barrière de potentiel  $\Delta E = E_{max} - E_{min}$ , sans quoi ils ne pourront s'extraire des puits dans lesquels ils sont adsorbés. Attention cependant à ne pas confondre cette énergie d'activation  $\Delta E$  avec l'énergie de désorption  $E_{lib} > \Delta E$  qui comme son nom l'indique correspond à l'énergie minimum que devra posséder un adatome pour se libérer totalement de l'attraction du substrat.

La partie droite de la (Fig.2.1) représente, dans le cas simplifié d'un réseau cristallin à une dimension, le minimum suivant l'axe des  $z$  de l'énergie potentielle d'un adatome parcourant sa surface à la coordonnée  $x$ . Afin de déterminer ce profil énergétique et par conséquent la barrière de potentiel  $\Delta E = E_{max} - E_{min}$ , on modélise l'interaction entre un adatome et

---

1. Dans [60] S. Linas *et al.* met en évidence dans le cas du graphène épitaxié sur une surface métallique, la présence d'un effet de Moiré qui induit des minimums d'énergies locaux de valeurs différentes à la surface du substrat. Sur la (Fig.3) de [36] Y. Han modélise les effets de Moiré dans le cas d'un substrat constitué d'une feuille de graphène supportée par le plan cristallin Ru(0001)

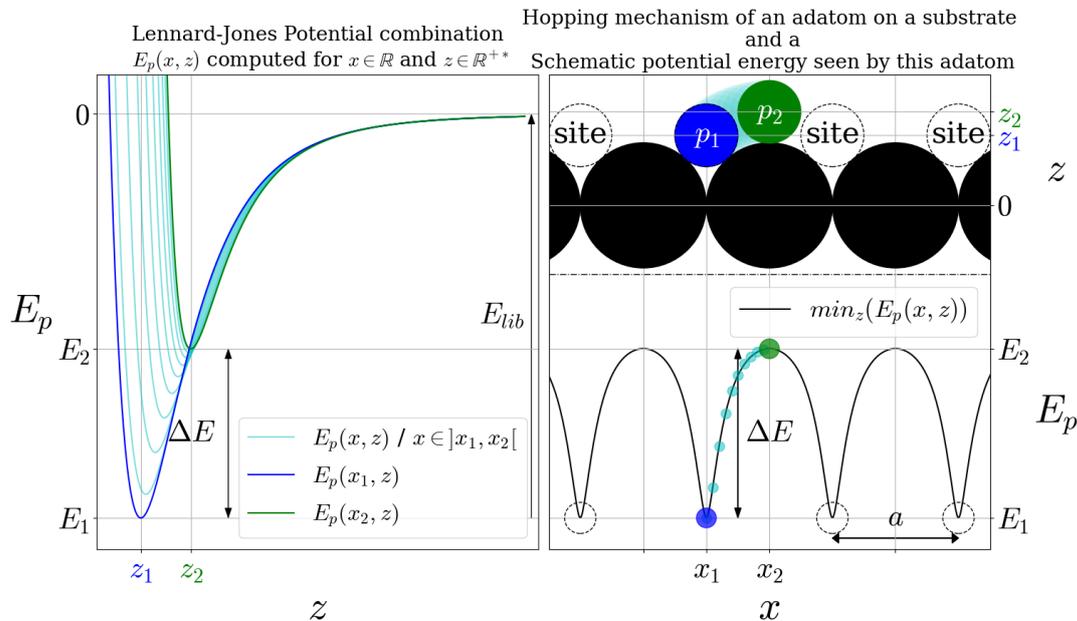


Figure 2.1 – Pour un substrat schématisé par à un réseau cristallin à une dimension (droite haut), a été modélisée  $\forall (x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{+*}$ ,  $E_p(x, z)$  l'interaction entre un adatome et les atomes constituant ce substrat (gauche) et le minimum suivant l'axe des  $z$  de l'énergie potentielle d'un adatome évoluant à la surface d'abscisse  $x$  de ce réseau cristallin (droite bas). Cette énergie potentielle  $E_p(x, z)$  correspond à la somme de quatre potentiels empiriques de Lennard-Jones décrivant chacun l'interaction entre l'adatom et l'un des quatre atomes plus proches voisins de ce dernier composant le substrat (les autres pouvant être négligés compte tenu de la courte portée de ce type de potentiel).  $\Delta E = E_2 - E_1$  définit la barrière de potentiel à franchir pour un adatome lorsqu'il effectue un saut d'un site d'adsorption  $p_1 = (x_1, z_1)$  à un autre (sites signalés par des ronds en pointillé sur le réseau cristallin), tandis que  $E_{lib}$  correspond à l'énergie nécessaire pour qu'un adatome soit totalement désorbé par le substrat. La position  $p_2 = (x_2, z_2)$  définit un point de selle sur lequel un adatome est en équilibre instable entre deux puits d'équilibre énergétique. (inspired by (Fig.1) from Gomer *et al.* [29])

chacun des atomes constituant le substrat sur lequel il se déplace par le potentiel empirique de Lennard-Jones [47],[48] et [59] défini tel que :

$$V(d_i) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{d_i} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{d_i} \right)^6 \right) \quad (2.1)$$

avec  $\sigma$  et  $\epsilon$  définissant respectivement les échelles de longueur et d'énergie qui auront été évaluées empiriquement et  $d_i$  correspondant à la distance séparant l'adatome du  $i^{me}$  atome composant le substrat. Sur le graphique de gauche de la (Fig.2.1) est représentée en fonction de la position  $(x, z)$  à laquelle se trouve un adatome de son substrat, son énergie potentielle  $E_p(x, z) = \sum_i V(d_i(x, z))$  (L'interaction à longue distance du potentiel de Lennard- Jones étant faible, nous avons choisi de prendre en compte seulement ceux des quatre atomes du substrat les plus proches voisins de l'adatome). Sur ce graphe nous avons tracé les projections pour différentes valeurs de la coordonnée  $x$  de  $E_p(x, z)$ . Ces tracés nous permettent de visualiser le col énergétique reliant la position d'équilibre stable d'un site d'adsorption  $p_1 = (x_1, z_1)$  à laquelle on mesure suivant l'axe des  $x$  un minimum d'énergie local  $E_p(x_1, z_1) = E_1 = E_{min}$  et celle instable du point de selle  $p_2 = (x_2, z_2)$  pour laquelle à l'inverse on mesure un maximum d'énergie local  $E_p(x_2, z_2) = E_2 = E_{max}$ . Il est à noter qu'à l'origine, ce potentiel avait été proposé par J.E. Lennard-Jones, afin de décrire les interactions entre atomes chimiquement inertes d'un gaz rare. D'après (2.1) au delà d'une distance critique  $d^* = 2^{\frac{1}{6}} \cdot \sigma$  séparant deux de ces atomes rares, ces derniers s'attirent et inversement pour une distance inférieure à  $d^*$  ils se repoussent. Du reste ce potentiel est couramment utilisé pour décrire les interactions inter-atomiques de systèmes condensés et notamment celui d'un adatome et son substrat.

Ainsi d'après les travaux de M.Ø. Pedersen *et al.* [88], le mécanisme de saut serait lié à l'énergie thermique des adatoms, et la fréquence de saut  $\nu = \frac{1}{\tau}$  pour les adatoms se déplaçant à la surface du substrat, peut être définie selon la loi d'Arrhenius telle que :

$$\nu a = \nu_0 a \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_b T}\right) \quad (2.2)$$

avec  $k_b$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température,  $a$  la distance de saut et  $\nu_0$  la fréquence de vibration d'un adatome au fond d'un puits que l'on peut aussi interpréter comme la fréquence de tentative de saut. M.Ø. Pedersen *et al.* auront évalué expérimentalement le comportement de cette fréquence de saut  $\nu$  en fonction de la température, dans le cas de l'hétérodifusion d'adatoms d'azote à la surface d'un réseau carré en Fer constituant le substrat. Pour ce faire, ils seront parvenus à identifier le mouvement de chacun des adatoms d'azote sur la (Fig.1 de [88]) qu'ils auront pu filmer à l'aide d'un STM (microscope à effet tunnel) capturant entre 6 – 30 images/min et ainsi pu d'après la (Fig.2.2) mesurer la valeur de leur fréquence de saut  $\nu$  sur un intervalle de températures donné. Le graphique représenté sur la (Fig.2.2) est ce que l'on appelle un graphe d'Arrhenius, pour lequel on trace suivant une échelle semi-log en ordonnée, l'évolution de la fréquence de saut  $\nu$  des adatoms, en fonction de l'inverse de la température  $T$  de ces derniers. Ainsi sur ce type de tracé, d'après (2.2) la courbe représentant l'évolution de  $\nu$  en fonction de  $\frac{1}{T}$ , se résumera à une droite dont la pente correspondra à la valeur de la barrière de potentiel  $\Delta E$  que les adatoms auront à franchir pour sauter d'un puits

de potentiel à un autre à la surface du substrat tandis que son offset aura la valeur de  $\nu_0$ . Ici dans le cas d'adatoms d'azote se déplaçant à la surface d'un réseau carré constitué d'atomes de fer, la barrière de potentiel ressentie par ces adatoms au moment de s'extraire d'un puits de potentiel a été évaluée à  $\Delta E = 0.92 \pm 0.04$  eV et la fréquence de saut de ces derniers a été mesurée à  $\nu = 4.3 \cdot 10^{12}$  Hz, connaissant la valeur  $a = 2.87$  Å de la longueur d'une arête de ce réseau carré.

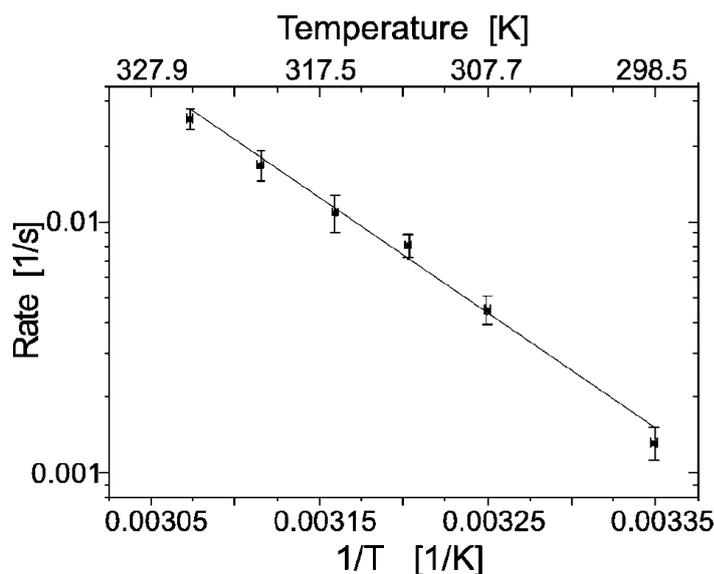


Figure 2.2 – Graphe d'Arrhenius des fréquences de saut  $\nu$ , supposée définie comme d'après (2.2), d'adatoms d'azote évoluant à la surface d'un substrat Fe(100) pour différentes températures  $T$ . La ligne droite continue correspond au tracé de la courbe ajustée par la méthode des moindres carrés des points expérimentaux représentés sur un même graphe. Ainsi à chacun de ses sauts, la barrière de potentiel à franchir par un adatome, vaut  $\Delta E = 0.92 \pm 0.04$  eV et sa fréquence de saut a été évaluée à  $\nu = 4.3 \cdot 10^{12}$  Hz. (From Pedersen *et al.* [88])

Dès lors le déplacement à la surface du substrat d'un adatome, peut être vu comme celui d'une particule positionnée sur un réseau et visitant à chacun de ses sauts, l'un des sites de ces plus proches voisins. Ces sites correspondent aux sites d'adsorptions représentés en haut à droite de la (Fig.2.1), définissant d'un point de vue énergétique des puits de potentiel. On note alors  $p = \frac{1}{z}$  la probabilité pour cette particule de visiter de manière équiprobable, l'un des  $z$  sites étant les plus proches de sa position.  $z$  définit donc ce que l'on appelle le nombre de coordination du réseau. Cette probabilité définit en fait ce que l'on appelle un taux de transition. Prenons le cas d'un réseau carré, le taux de transition vaut  $p = \frac{1}{4}$ , tandis que si le réseau avait été hexagonal  $p = \frac{1}{6}$ . Dans les deux cas,  $a$  la longueur des arêtes de leurs mailles est unique. Ainsi d'après la définition (2.2) de la fréquence de saut  $\nu$  des adatoms, on est en mesure de définir le coefficient de diffusion de ces derniers à la surface de leur substrat tel

que :

$$D = \frac{\nu a^2}{2d} \quad (2.3)$$

qui n'est autre que celui défini pour une marche aléatoire à  $d$ -dimension.

**démonstration** : Soient un adatome dont  $\nu = \frac{1}{\tau}$  est la fréquence de saut d'un site à l'autre du substrat sur lequel elle évolue et  $\rho(\mathbf{x}, t)$  la densité de présence d'un adatome à un instant  $t \in \mathbb{R}$  et à une position  $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$  à la surface du substrat qui n'est autre qu'un réseau cristallin dont le nombre de coordination est  $z = 2 * q$ ,  $q \in \mathbb{N}^*$  et pour lequel la longueur d'une arête de ses mailles est unique et vaut  $a$ . On peut alors écrire l'équation maitresse suivante :

$$\rho(x_1, x_2, t + \tau) = \sum_{i=1}^z \frac{1}{z} \cdot \rho(x_1 + a \cdot \cos(\alpha_i), x_2 + a \cdot \sin(\alpha_i), t)$$

avec  $\forall i \in \llbracket 1, z \rrbracket, \alpha_i \equiv i \cdot \frac{2\pi}{z}$  les  $z$  différentes directions possibles pouvant être emprunter par l'adatome à la surface du réseau 2D. Or d'après le développement de Taylor de cette densité de présence  $\rho$  en fonction de la coordonnée de temps puis celui en fonction des coordonnées d'espace on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(x_1, x_2, t)}{\partial t} &= \nu a^2 \frac{\partial^2 \rho(x_1, x_2, t)}{\partial x_1^2} \cdot \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \frac{\cos(\alpha_i)^2}{2} \\ &+ \nu a^2 \frac{\partial^2 \rho(x_1, x_2, t)}{\partial x_2^2} \cdot \frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \frac{\sin(\alpha_i)^2}{2} \end{aligned}$$

Dès lors quelle que soit la nature du réseau à deux dimension que constitue la surface du substrat, dans le membre de droite de l'équation précédente les facteurs  $\frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \frac{\sin(\alpha_i)^2}{2} = \frac{1}{4}$  et  $\frac{1}{z} \sum_{i=1}^z \frac{\cos(\alpha_i)^2}{2} = \frac{1}{4}$ . Une fois simplifiée d'après (1.104) on identifie cette équation comme étant l'équation de diffusion à deux dimensions :

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{\nu a^2}{4} \cdot \Delta \rho(\mathbf{x}, t) \quad (2.4)$$

pour laquelle  $D = \frac{\nu a^2}{4}$  correspond à son coefficient de diffusion.

Ce coefficient de diffusion dépend donc de la température d'après (2.3) et (2.2), mais aussi de l'orientation du plan cristallin à la surface duquel les adatoms diffusent. En effet l'arrangement atomique du réseau cristallin est ce qui définit le profil du potentiel énergétique ressenti par les adatoms qui diffusent à sa surface. D'après les observations réalisées à l'aide d'un FIM (microscope ionique à effet de champ) par [2], ces derniers on pu mettre en évidence la dépendance qui existe entre  $\nu$  la fréquence de saut d'adatoms de rhodium et l'orientation des plans du réseau cristallin cubique à faces centrées en rhodium sur lesquels ces derniers diffusaient. Sur la (Fig.2.3) leurs résultats sont représentés suivant un graphe d'Arrhenius pour lequel on trace toujours en fonction de l'inverse de la température  $T$  des adatoms, l'évolution cette fois-ci de  $\log(\langle r^2 \rangle)$  qui n'est que le logarithme du moment d'ordre deux de la distance parcourue par chaque adatome durant un intervalle de temps  $\Delta t = 3$  min. Or  $\langle r^2 \rangle$  peut

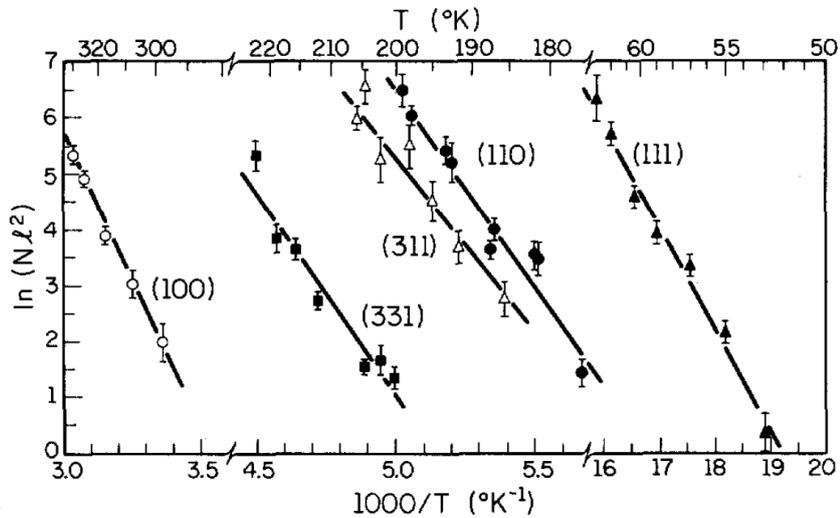


Figure 2.3 – Graphe d'Arrhenius représentant en fonction de l'inverse de la température  $T$ , le moment d'ordre deux des distances parcourues par les adatoms de rhodium durant un intervalle de temps  $\Delta t = 3$  min et cela lors de leurs auto-diffusions à la surface de différents types de plans cristallins. (From Ayrault *et al.* [2])

être défini à partir du coefficient de diffusion  $D$  et donc d'après (2.3) de la fréquence de saut  $\nu$  et de la longueur d'une arête de ce réseau carré  $a$  tel que :

$$\langle r^2 \rangle = 2d \cdot D \Delta t = \nu a \Delta t = \nu_0 a \Delta t \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_b T}\right) \quad (2.5)$$

Dès lors d'après (2.5) la courbe d'évolution de  $\log \langle r^2 \rangle$  en fonction de  $\frac{1}{T}$  sera elle aussi une simple droite dont la pente correspondra à la valeur de la barrière de potentiel  $\Delta E$  que les adatoms auront à franchir pour sauter d'un puits de potentiel à un autre à la surface d'un plan cristallin d'une orientation donnée. On constate alors sur cette (Fig.2.3) qu'en fonction de l'orientation du plan cristallin d'atomes de rhodium constituant le substrat, la barrière de potentiel  $\Delta E$  à franchir ne sera pas la même. Le coefficient de diffusion des adatoms dépend donc de l'orientation du plan cristallin sur lequel a lieu leur déplacement et nous allons voir que ce coefficient n'est pas nécessairement isotrope. En effet toujours sur la (Fig.2.3) pour les plans cristallins orientés (100) et (111) du réseau cristallin cubique à faces centrées en rhodium constituant le substrat, la diffusion des adatoms à leurs surfaces se fera de manière isotrope tandis que pour les orientations (110), (311) et (331) celle-ci sera anisotrope. Ceci s'explique par le fait que les plans orientés (100) et (111) d'un réseau cristallin cubique à faces centrées, sont respectivement un réseau carré et un réseau hexagonal. Pour ce type de réseaux,  $a$  la longueur d'une arête de leurs mailles est unique. Ainsi les noeuds plus proches voisins les uns des autres seront équidistants et par conséquent les puits de potentiel perçus par les adatoms aussi, il en ressort donc un coefficient de diffusion isotrope défini comme précédemment par (2.3). En

revanche les plan cristallins du réseau cristallin cubique à faces centrées en rhodium orientés suivant (110), (311) et (331) ne sont ni des réseaux carrés, ni des des réseaux hexagonaux. Dans ce cas là, la diffusion des adatoms à leur surface est nécessairement anisotrope. D'après [2] l'anisotropie de chacun de ces trois plans est suffisamment prononcée pour qu'à la surface de ces derniers, les diffusions des adatoms d'azote suivant la direction perpendiculaire à [110] soient trop lentes pour être correctement évaluées sur les plages de température qu'ils auront choisi pour effectuer leurs mesures. Prenons le cas d'un réseau rectangulaire, à la surface de ce dernier le coefficient de diffusion dépendra pour un adatome de la direction qu'il sera amené à suivre. On retrouve ce cas de figure dans [27] et [117]. Pour [117] ce sont des molécules adsorbées de CO qui diffusent à la surface d'un réseau rectangulaire constitué par le plan cristallin Ni(110). Sur le graphe d'Arrhenius de la (Fig.2.4) à gauche est représentée en fonction de l'inverse de la température, l'évolution des coefficients de diffusion suivant les directions perpendiculaires entre elles [110] et [001] ainsi que celle dirigée par leur bissectrice. Grâce aux courbes ajustées suivant les points expérimentaux pour chacune des directions [110] et [100] au moyen de la méthode des moindres carrés, ils ont pu évaluer les barrières de potentiel  $\Delta E_{[110]}$  et  $\Delta E_{[001]}$  ainsi que les pré-facteurs  $\frac{\nu_0 l_{[110]}^2}{4}$  et  $\frac{\nu_0 l_{[001]}^2}{4}$  respectivement grâce à leurs pentes et leurs offsets comme cela avait été fait dans [88] et [2]. Dès lors pour n'importe quelle direction déviant d'un angle  $\Phi$  avec la direction [110] suivie par une molécule de CO lors de sa diffusion à la surface de ce réseau rectangulaire son coefficient de diffusion vaudra :

$$D(\Phi) = \frac{\nu_0}{4} \cdot \left( l_{[110]}^2 \exp\left(\frac{\Delta E_{[110]}}{k_B T}\right) \cdot \cos^2(\Phi) + l_{[001]}^2 \exp\left(\frac{\Delta E_{[001]}}{k_B T}\right) \cdot \sin^2(\Phi) \right) \quad (2.6)$$

Sur la (Fig.2.4) à droite aura été vérifié que le tracé de l'équation (2.6) correspondait bien avec les points expérimentaux mesurés pour trois directions différentes de [110] et [001]. Ainsi cette équation se généralise donc pour n'importe quel autre réseau rectangulaire tel que :

$$D(\Phi) = \frac{\nu_0}{4} \cdot (D_x \cdot \cos^2(\Phi) + D_y \cdot \sin^2(\Phi)) \quad (2.7)$$

### 2.1.2 . Équation régissant la diffusion des adatoms à la surface du substrat

Les adatoms diffusent donc à la surface du substrat. L'équation régissant l'évolution de leur concentration  $c$  à la surface du substrat est donnée par la seconde loi de Fick :

$$\frac{\partial c(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(x, y, t) \cdot \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D(x, y, t) \cdot \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} \right) \quad (2.8)$$

qui lorsque le coefficient de diffusion  $D$  ne dépend ni du temps, ni de l'espace, se simplifie en :

$$\frac{\partial c(x, y, t)}{\partial t} = D \cdot \Delta \rho(x, y, t) \quad (2.9)$$

La seconde loi de Fick est le produit de la combinaison de l'équation de continuité  $\frac{\partial c(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  décrivant la conservation de la masse du système constitué par cette assemblée de particules et la première loi de Fick définissant le flux de particules  $\mathbf{j}$  tel que :

$$\mathbf{j} = -D \cdot \nabla c(\mathbf{x}, t) \quad (2.10)$$

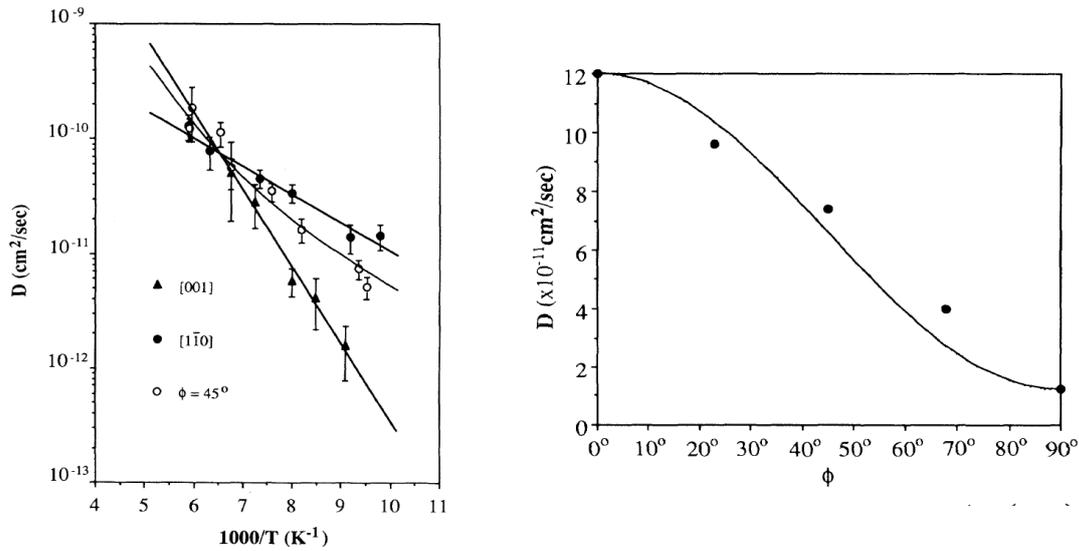


Figure 2.4 – (gauche) Graphe d’Arrhenius représentant en fonction de la température  $T$ , le coefficient de diffusion  $D(\Phi)$  des molécules adsorbées de monoxyde de carbone, diffusant à la surface d’un réseau rectangulaire constitué par le plan cristallin Ni(110), suivant une direction orientée par un angle  $\phi$  (l’angle  $\phi$  est mesuré par rapport à la direction  $[1\bar{1}0]$  du plan cristallin Ni(110)). Sur ce graphe on retrouve les points expérimentaux, ainsi que les courbes ajustées de ces points au moyen de la méthode des moindres carrés et cela pour chacune des directions  $[1\bar{1}0]$  et  $[100]$  et  $\phi = \frac{\pi}{4}$ . De ces courbes d’après (2.3) et (2.2) ont pu être déduits, les barrières de potentiel  $\Delta E_{[1\bar{1}0]}$  et  $\Delta E_{[001]}$ , ainsi que les pré-facteurs  $\frac{\nu_0 l_{[1\bar{1}0]}}{4}$  et  $\frac{\nu_0 l_{[001]}}{4}$  que l’on retrouve dans l’équation (2.6). (droite) Estimation théorique à une température  $T = 110 \text{ K}$  fixée, de la valeur du coefficient de diffusion  $D(\Phi)$  et cela  $\forall \Phi \in [0, \frac{\pi}{2}[$ . (From Xiao *et al.* [117])

### 2.1.3 . Nature de la diffusion des adatoms à la surface du substrat

La diffusion des adatoms à la surface du substrat peut être influencée par le niveau de couverture c’est à dire la quantité d’atomes par unité de temps qui seront adsorbés par le substrat ainsi que l’état de surface de ce substrat comprenant donc des défauts et des marches à l’origine de pièges ou de modifications locales du coefficient de diffusion pour les adatoms.

**la diffusion de traceurs** correspond à celle observée dans le cas où le niveau de couverture est suffisamment faible (typiquement autour de 0.01 ML) pour que les adatoms ne ressentent pas la présence de leurs voisins lorsque ceux-ci diffusent à la surface du substrat. Ainsi le mouvement collectif des adatoms pourra être modélisé par les déplacements indépendant les uns des autres de chacun des adatoms.

**la diffusion chimique** cette fois caractérise la diffusion observée lorsque le niveau de couverture est trop important pour considérer que les adatoms lorsqu’ils diffusent à la surface du substrat, ne sont pas influencés par la présence de leurs voisins. D’après [83]

la répulsion et l'attraction réciproques des adatoms à la surface du substrat auront pour effet de modifier le profil de potentiel énergétique de la (Fig.2.1). Sur la (Fig.2.5) on constate dans le cas simplifié de la diffusion d'adatoms à la surface d'un réseau cristallin unidimensionnel l'asymétrie du profil de son potentiel énergétique qui aura pour conséquence de modifier l'énergie d'activation  $\Delta E$  suivant la direction de saut suivie par les adatoms et donc leur fréquence de saut  $\nu$ . Dès lors la première loi de Fick (2.10) se généralise en :

$$\mathbf{j} = -m \cdot c \cdot \nabla \mu(\mathbf{x}, t) \quad (2.11)$$

avec  $\mu$  le potentiel chimique de cette assemblée d'adatoms et  $m$  la mobilité des adatoms qui peut être reliée à leur coefficient de diffusion par la relation d'Einstein  $D = mk_B T$ , cette relation est plus amplement expliquée dans la sous-section 2.3 de [29]. L'équation (2.11) peut aussi s'écrire telle que :

$$\mathbf{j} = -m \cdot c \cdot \frac{\partial \mu(\mathbf{x}, t)}{\partial c} \nabla c(\mathbf{x}, t) \quad (2.12)$$

Ainsi à température constante, le coefficient de diffusion de cette assemblée d'adatoms  $D_C$  dépend effectivement de la variation de la concentration d'adatoms à la surface du substrat tel que :

$$D_C = \frac{D}{k_B T} \cdot c \cdot \frac{\partial \mu(\mathbf{x}, t)}{\partial c} = \frac{\nu(c) a^2}{4} \cdot \frac{\partial \mu(\mathbf{x}, t) / k_B T}{\partial \ln(c)} \quad (2.13)$$

le facteur adimensionné  $\frac{\partial \mu(\mathbf{x}, t) / k_B T}{\partial \ln(c)}$  est appelé le facteur thermodynamique. Lorsque ce facteur est proche de  $\sim 1$ , c'est à dire lorsque cette diffusion chimique tend à se rapprocher de celle de traceurs, on peut facilement calculer le potentiel chimique et on obtient  $\mu = \mu_0 + k_B T \cdot \ln(c)$  avec  $\mu_0$  le potentiel chimique de l'espèce atomique des adatoms dans l'état standard.

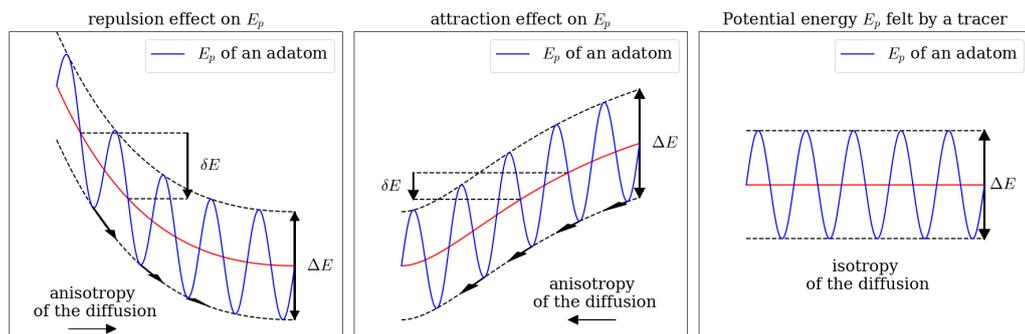


Figure 2.5 – Effets sur le profil énergétique perçu par un adatome à la surface de son substrat, des interactions attractives et répulsives que cet adatome entretient avec ses paires. (From Nauvomets *et al.* [83])

**la diffusion intrinsèque** d'une assemblée d'adatoms décrit celle prenant place à la surface d'une terrasse d'un réseau cristallin comportant aucun défaut, assez grande (typiquement 100 Å) pour que ces derniers décrivent des mouvements de diffusion à sa surface. D'après [98] aux frontières de cette terrasse les adatoms diffusant à sa surface rencontrent une barrière de potentiel significativement plus grande que celles séparant les sites d'adsorptions inter-atomiques qu'ils franchissent ordinairement. A l'inverse ceux diffusant en contrebas de cette terrasse rencontreront un puits énergétique bien plus profond que ceux correspondant aux sites d'adsorptions inter-atomiques. L'effet sur le comportement diffusif d'un adatome causé par l'asymétrie du profil du potentiel énergétique ressentie par ce dernier aux abords d'une marche (Fig.2 de [97]), porte le nom de la première personne à l'avoir décrit R.L. Schwoebel. Parmi les travaux ayant traité de cet effet sur la diffusion ainsi que l'organisation en îlots des adatoms, on retrouve [20] et [54]. Dans [54] ils auront modélisé l'effet Schwoebel sur la diffusion de particules à l'approche d'une marche par le biais d'une simulation numérique. Sur la (Fig.3 de [54]) sont représentés les sauts autorisés pour une particule suivant que sa position soit en amont ou en aval d'une terrasse représentant un adatome dans une modélisation de type TSK proposée pour la première fois par W.Kossel [53] et I.N.Stranski [103]. Ce modèle est plus amplement développé en anglais pour une large variété de réseaux cristallins, dans l'ouvrage [93] écrit par Madame et Monsieur Rizescu. Ici donc on considère que l'énergie thermique des adatoms est à la fois suffisamment faible pour rendre impossible le franchissement d'une terrasse tout en étant assez importante pour donner la possibilité aux adatoms d'effectuer des sauts d'un site d'adsorption à un autre. Ainsi pour une terrasse dépourvue de défaut et une couverture donnée, on comptera un nombre constant d'adatoms diffusant à sa surface ; ces derniers ne pouvant quitter l'aire délimitée par ses frontières. La diffusion de cette assemblée d'adatome est donc circonscrite à la surface de la terrasse, on parle alors de diffusion intrinsèque.

**la diffusion de transfert de masse** se définit de celle d'une assemblée d'adatoms à la surface d'un réseau cristallin comportant un certain nombre de défauts et de marches perturbant localement le profil de son potentiel énergétique et par conséquent la fréquence de saut  $\nu$  et donc le coefficient de diffusion comme on a pu le voir précédemment pour les limites d'une terrasse en ce qui concernait la diffusion intrinsèque. Dès lors pour évaluer correctement le coefficient de diffusion  $D_M$ , il sera nécessaire de connaître la proportion d'adatoms encore mobile  $\frac{c_M}{c}$  qui d'après l'équation (26) de [5] est donné par :

$$\frac{c_M}{c} = \exp\left(-\frac{\Delta G_M}{k_B T}\right) \quad (2.14)$$

telle que  $\Delta G_M$  définit l'énergie libre de formation des adatoms mobiles, quand  $c_M$  et  $c$  correspondent respectivement à la concentration d'adatoms encore mobile à la surface du substrat et à celle de l'ensemble des adatoms mobiles ou piégés à la surface de celui-ci. En effet toujours d'après [5]  $D_M = \frac{c_M}{c} D$  or (2.2) d'où :

$$D_M = \frac{\nu_0 a^2}{4} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_M + \Delta G}{k_B T}\right) \quad (2.15)$$

## 2.2 . Diffusion d'îlots atomiques à la surface d'un substrat

On définit un îlot atomique comme le regroupement à la surface du substrat d'adatoms allant du simple dimère au rassemblement de centaines d'adatoms, on les appelle aussi agrégats atomiques à deux dimensions. Ces îlots sont le fruit de l'assemblage par accrétion d'adatoms qui à l'origine diffusaient librement à la surface du substrat ou bien par le dépôt de ces derniers à la surface d'un de ces regroupements déjà constitués. L'épaisseur de ces agrégats atomiques à deux dimensions se résume à une ou deux couches d'adatoms.

Ces îlots sont susceptibles eux aussi de diffuser à la surface de leur substrat bien que leurs coefficients de diffusion décroissent assez rapidement quand le nombre d'adatoms qui les constituent augmente. K. Kyuno *et al.* ont pu observer cette tendance dans le cas de l'auto-diffusion d'îlots de platine [56]. A l'aide d'un FIM comme cela avait été fait pour de simples adatoms dans [2], K. Kyuno *et al.* [56] ont mesuré les coefficients de diffusion d'îlots de platine, en observant le mouvement de leurs centres de masse à la surface du plan cristallin (111) d'un cristal cubique à faces centrées constitué du même élément chimique et ensuite pu sur la (Fig.6 de [56]) tracer le graphe d'Arrhenius pour des îlots de platine comptant de deux à sept adatoms. A gauche de la (Fig.2.6) pour chacune de ces tailles d'îlots, sont comparées les énergies d'activation mesurées expérimentalement à partir de la pente des tracés réalisés sur le graphe d'Arrhenius et celles prédites par la théorie développée par S. Liu *et al.* dans [62]. Bien que les énergies d'activation théoriques sont toujours inférieures respectivement d'en moyenne 60% par rapport à celles mesurées expérimentalement, la tendance reste la même.

Or cette tendance selon laquelle le coefficient de diffusion des îlots diminue à mesure que le nombre d'adatoms qui les constituent augmente n'est pas toujours vérifiée pour certaines tailles mais surtout formes d'îlots. Il a pu être constaté notamment dans [51], que cette fois-ci dans le cas de l'auto-diffusion d'îlots de rhodium à la surface du plan cristallin (100) d'un cristal cubique à faces centrées, une évolution des coefficients de diffusion des îlots en fonction de leurs tailles qui ne soit pas strictement décroissante. La courbe de cette évolution est représentée à droite de la (Fig.2.6). Ceci s'explique par le fait que pour le même nombre d'adatoms les constituant, certaines configurations d'îlots se révèlent plus stables que d'autres. Pour des configurations compactes en forme de rectangles ou d'hexagones par exemple, les adatoms à la périphérie de ce type d'îlots comptent un nombre de proches voisins qui est supérieur à celui mesuré pour les adatoms périphériques d'îlots dont les configurations le sont moins. Ces îlots plus compacts possèdent donc des configurations maximisant les interactions entre les adatoms eux-mêmes et leur substrat, et ainsi plongent ces îlots dans des creux d'énergie potentielle bien plus profonds que ceux de configurations moins compactes. Dès lors si la diffusion des îlots est due aux mouvements individuels de leurs atomes périphériques, reconfigurant au fil du temps la forme de ces agrégats atomiques à deux dimensions, les configurations stables nécessitent pour être modifiées de la part des adatoms qui les constituent, de franchir des barrières de potentiel supérieures à celles perçues par ceux appartenant à des configurations moins stables, quand bien même parfois ces îlots comptent plus d'adatoms. Le caractère non monotone de l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la tailles des îlots de rhodium étudiés dans [51], suggère donc que pour ces îlots le mécanisme de leur diffusion dépend essentiellement des déplacements individuels de leurs adatoms périphériques. A.F. Voter dans [111] aura

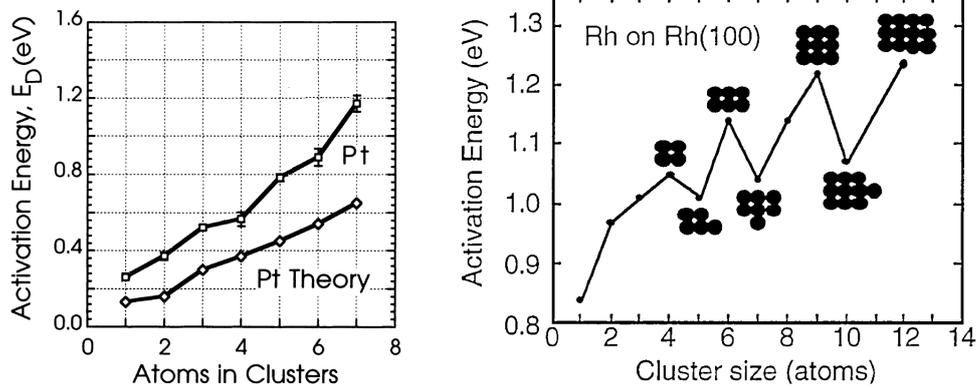


Figure 2.6 – (gauche) Évolution en fonction du nombre d’atomes constituant un îlot de platine, de son énergie d’activation  $\Delta E$ , lorsque cet îlot auto-diffuse à la surface du plan cristallin Pt(111). Ici sont comparés les énergies d’activation mesurées expérimentalement par Kyuno *et al.* dans [56] et celles prédites par la théorie développée par S. Liu *et al.* dans [62]. (from from Kyuno *et al.* [56]) (droite) Évolution en fonction du nombre d’atomes constituant un îlot de rhodium ainsi que de sa configuration, de l’énergie d’activation  $\Delta E$  de cet agrégat atomique à deux dimensions, lorsqu’il auto-diffuse à la surface du plan cristallin Rh(100). Le caractère non monotone de cette évolution mesurée expérimentalement par Kellogg *et al.* dans [51]), suggère pour ces îlots que leur mécanisme de diffusion dépend grandement des déplacements individuels de leurs adatoms périphériques. (from Kellogg *et al.* [51])

proposé une simulation de dynamique moléculaire modélisant l’auto-diffusion d’îlots d’argent à la surface du plan cristallin (100) d’un cristal cubique à faces centrées. Dans celle-ci il constate aussi que les configurations stables à forme rectangulaire obtenues pour 4, 6 et 8 adatoms possèdent une énergie d’activation supérieure à celles moins stables comptant respectivement 5, 7 et 9 adatoms. Précédemment dans [56], des configurations plus satisfaisantes pour certaines tailles d’îlots pouvaient déjà être remarquées. Pour cela il fallait étudier plus en détail leurs coefficients de diffusion, c’est à dire à la fois les énergies d’activation  $\Delta E$  mais aussi les pré-facteurs  $D_0 = 2d\nu_0 a$  définissant ces coefficients d’après les équations (2.3) et (2.2). En effet d’après le (Tab.2 de [56]) si l’énergie d’activation  $\Delta E$  croit strictement avec la tailles des îlots pour lesquels celle-ci aura été mesurée, ce n’est pas le cas du pré-facteur  $D_0$ . Ces pré-facteurs  $D_0$  pour des îlots comptant encore une fois 4 et 6 adatoms sont significativement inférieurs respectivement à ceux mesurés pour des îlots formés de 5 et 7 adatoms.

Cela nous amène donc à décrire pour les adatoms constituant un îlot, les différents processus collectifs et/ou individuels à l’origine de la diffusion d’un îlot.

### 2.2.1 . Mécanismes de diffusions individuelles des adatoms constituant un îlot

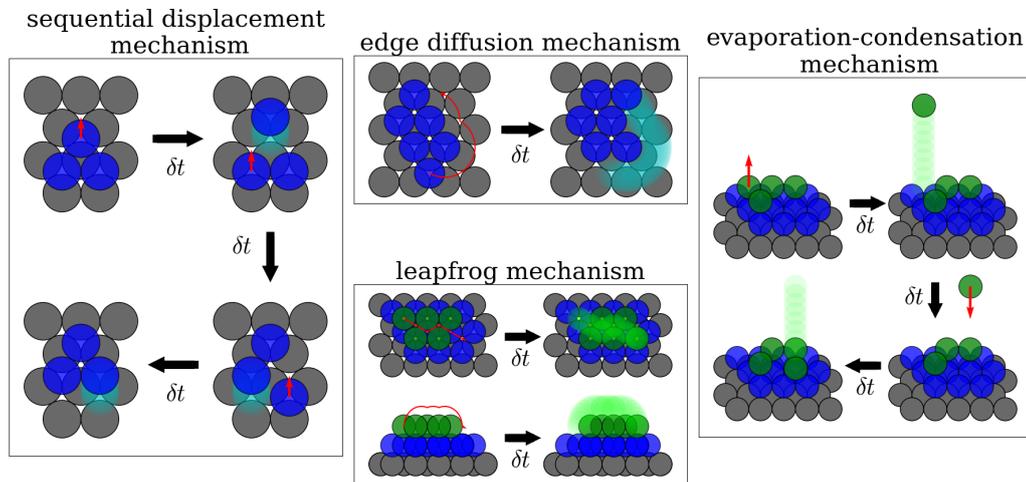


Figure 2.7 – Schématisation des différents mécanismes à l'origine des diffusions individuelles des adatoms à la surface d'un substrat.

Dans le cas où la diffusion des îlots s'explique par les déplacements individuels des adatoms qui les constituent, les quatre principaux mécanismes de diffusions individuelles des adatoms le constituant sont :

**Les déplacements séquentiels des adatoms d'un îlot :** Les adatoms constituant un îlot se déplaceront tour à tour à la surface du substrat tout en restant en contact les uns avec les autres et ainsi conservant l'intégrité de l'îlot qu'ils composent. De ces déplacements individuels effectués par les adatoms, il en résulte la diffusion de leur centre de masse. Ce mouvement est schématisé à gauche de la (Fig.2.7).

**Les déplacements le long d'un îlot de ses adatoms périphériques :** Les adatoms périphériques d'un îlot pourront se déplacer à la surface du substrat en suivant le contour de ces agrégats atomiques à deux dimensions et ainsi définir un mouvement global du centre de masse de ces îlots. Ce mouvement est schématisé en haut au milieu de la (Fig.2.7).

**Le mécanisme de saute mouton :** Les adatoms situés à la surface d'un îlot pourront diffuser à la surface de celui et ainsi changer de position et de fait le centre de masse de l'agrégat atomique à deux dimensions qu'ils constituent. Ce mouvement est schématisé en bas au milieu de la (Fig.2.7). Il a été étudié plus en détail par T.R. Linderoth *et al.* dans [61] et cela dans le cadre de l'auto-diffusion d'îlots de platine à la surface du plan cristallin (111) d'un cristal cubique à faces centrées.

**L'évaporation et la condensation des adatoms d'un îlot :** Si il existe encore des adatoms diffusant librement à la surface du substrat, ils pourront continuer à s'agréger et ainsi se condenser avec les îlots, à l'inverse les adatoms à la surface ou en périphérie

de ces agrégats atomiques à deux dimensions pourront s'évaporer et s'agréger ailleurs à la surface de cet îlot ou bien sur celle d'un îlot différent ou du substrat. Ce mouvement est schématisé à droite de la (Fig.2.7).

### 2.2.2 . Mécanismes de diffusions collectives des adatoms constituant un îlot

D'après le graphe d'Arrhenius représenté sur la (Fig.6 de [56]) à une température  $T$  donnée et/ou le (Tab.2 de [56]), les coefficients de diffusion mesurés pour différentes tailles d'îlots de platine auto-diffusant à la surface du plan cristallin (111) d'un cristal cubique à faces centrées sont inférieurs d'une dizaine d'ordres de grandeur à ceux mesurés pour des adatoms simples. Indépendamment de l'élément chimique, il est clair que ces processus individuels à l'origine de la diffusion des îlots sont bien plus lents que la diffusion d'un simple adatome.

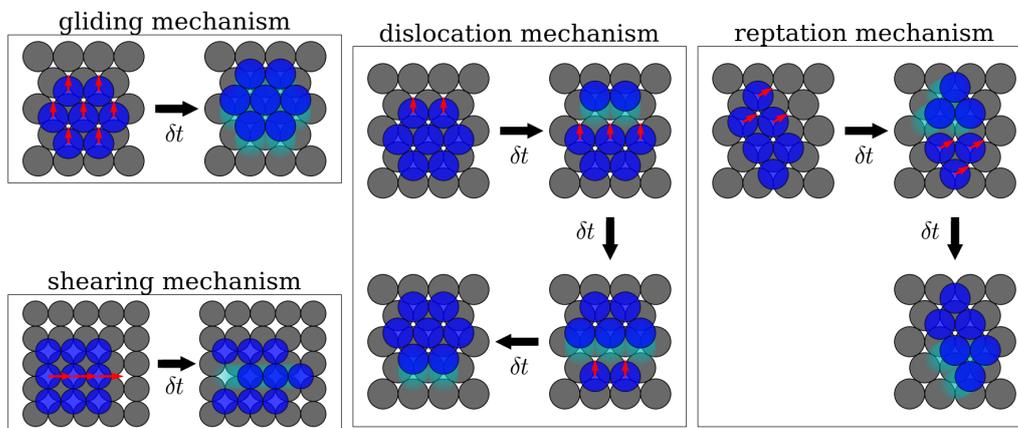


Figure 2.8 – Schématisation des différents mécanismes à l'origine de la diffusion collective des adatoms à la surface d'un substrat.

Cependant il existe des mécanismes de diffusions collectives des adatoms constituant un îlot, pour lesquels les coefficients de diffusion mesurés pour ces agrégats atomiques à deux dimensions sont bien supérieurs à ceux mesurés précédemment pour des îlots se muant grâce aux déplacements individuels de leurs adatoms. On en compte quatre principaux :

**La diffusion d'un îlot par glissement** : se réfère au cas où l'ensemble des adatoms constituant cet agrégat à deux dimensions se déplace d'un bloc à la surface du substrat. On retrouve un schéma illustratif de ce type de diffusion en haut à gauche de la (Fig.2.8)

**La diffusion d'un îlot par cisaillement** : correspond cette fois-ci au cas où des rangées d'adatoms constituant cet agrégat atomique à deux dimensions se déplacent les unes après les autres tout en conservant l'intégrité de l'îlot. Des déplacements de ces sous-ensembles il en résulte une modification de la forme de cet agrégat atomique à deux dimensions et donc de la position de son centre de masse. En bas à gauche de la (Fig.2.8) ce type de diffusion est schématisé.

**La diffusion d'un îlot par dislocation** : décrit la situation suivant laquelle deux sous-ensembles d'un agrégat atomique à deux dimensions anciennement adjacents sont séparés et forment un défaut d'empilement. Par exemple pour deux sous-ensembles à la surface du plan cristallin (111) d'un cristal cubique à faces centrées, un des sous-ensembles se positionne sur les sites correspondant au motif du cristal cubique à faces centrées tandis que l'autre sur ceux qui correspondrait au motif du substrat si il avait été hexagonal compact. Ainsi à partir de l'un des sous-ensembles, rangée par rangée, l'îlot se reconstitue et son centre de masse se meut du même coup. Cette méthode de diffusion est représentée au milieu de la (Fig.2.8).

**La diffusion d'un îlot par reptation** : figure celle des sous-ensembles de cet agrégat atomique à deux dimensions qui se déplacent les uns après les autres, tour à tour disloquant et reconstituant l'intégrité de l'îlot. Cette diffusion est schématisée à droite de la (Fig.2.8)

Dans [35], J.C. Hamilton *et al.* proposent d'étudier certains des processus collectifs cités plus haut notamment par le biais d'une simulation numérique de dynamique moléculaire. Leurs conclusions sont les suivantes : Pour des îlots comptant moins de 20 adatoms le mécanisme le plus favorable énergétiquement est celui de leur diffusion par glissement à la surface du substrat. Lorsque le nombre d'adatoms d'un îlot est compris entre 20 et 100 adatoms le mécanisme dominant parmi ceux jouant un rôle durant sa diffusion est celui de la diffusion d'un îlot par dislocation. Enfin si l'agrégat atomique à deux dimensions rassemble plus de 100 adatoms alors sa diffusion à la surface du substrat sera plutôt due à des mécanismes de diffusion par cisaillement le long de ses marches. Expérimentalement à l'aide d'un FIM, S.C. Wang et G. Ehrlich [113] on pu observer à la surface du plan cristallin (111) d'un cristal cubique à faces centrées l'auto-diffusion d'îlots d'iridium en forme hexagonal. Sur la (Fig.6 de [113]), ils ont ainsi constaté que ces îlots hexagonaux ne changeaient pas de configuration et en ont ainsi conclu que ces derniers diffusaient par glissement à la surface du substrat. Cette observation confirme les résultats obtenus précédemment dans [35] pour les petits îlots.

Comme nous l'avons vu dans [56], on ne peut pas observer en temps réel les processus responsables de la diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat. Cependant l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la taille des îlots ou bien la forme de ces agrégats atomiques à deux dimensions définiront autant d'indices suggérant parmi l'ensemble des mécanismes de diffusions, lesquels seront les plus susceptibles d'être à l'origine du mouvement de ces îlots. La pertinence des hypothèses émises sur la nature de ces processus de diffusions pourra aussi être éprouvée par des simulations semblables à celles proposées par A.F. Voter dans [111]. On rappelle que comme dans [2], à l'aide d'un microscope électronique et des images qu'il capture à des intervalles de temps  $\Delta t$  réguliers, on extrapole la valeur du coefficient de diffusion du centre de masse d'un îlot à partir de celle du moment d'ordre deux de la distance parcourue par celui-ci durant cet intervalle de temps  $\Delta t$ . Or cet intervalle  $\Delta t$  est largement supérieur à la période de saut  $\tau = \frac{1}{\nu}$  des adatoms, on ne peut donc pas directement observer ces sauts au microscope et ainsi donc de fait des mécanismes de diffusions individuelles ou collectives des adatoms constituant ces îlots. [35]

## 2.3 . Dépôts d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat

Avant d'exposer de manière non exhaustive, différentes méthodes de simulations numériques visant à modéliser des dépôts d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat ainsi que les équations maîtresses qui les sous tendent ; nous allons faire une rapide revue des méthodes expérimentales grâce auxquelles il est possible de réaliser de telles dépôts.

Quelle que soit la méthode expérimentale qu'un expérimentateur sera amené à choisir, elle consistera toujours à l'élaboration d'un faisceau d'agrégats atomiques qui accélèrent en direction d'un substrat placé perpendiculairement à ce faisceau dans une chambre ultra vide. Cependant on pourra classer ces méthodes expérimentales en deux grandes familles suivant l'énergie cinétique qu'atteindront les agrégats atomiques au moment où ils rentreront en collision avec le substrat. Ainsi deux cas de figure seront possibles, lors de son impact un agrégat atomique pourra se disloquer ou conserver son intégrité suivant que cette énergie cinétique par atome soit supérieure ou inférieure à celle assurant les liaisons atomiques au sein de ce cluster.

### 2.3.1 . Dépôts d'agrégats atomiques à haute énergie cinétique

Parmi les expériences de dépôts d'agrégats atomiques à haute énergie cinétique, on peut citer les travaux de Yamada [121], [119] premier à avoir produit des expériences de dépôts à partir de faisceaux d'agrégats atomiques ionisés ICB pour "ionized cluster beam" en anglais. Ces faisceaux sont produits à partir d'une source se matérialisant par un creuset contenant le matériau que l'on souhaite faire évaporer adiabatiquement, à l'instar de ce qui avait pu être fait pour la source décrite dans [9]. A l'intérieur de ce creuset se forme un gaz super-saturé qui peu à peu se condense en des agrégats atomiques. Ces clusters s'échappent alors par le biais d'une buse et viennent s'ioniser dans une chambre d'ionisation. Une fois chargés ils subissent alors l'action d'un champ électrique généré par des électrodes, ayant pour but de les faire accélérer en direction du substrat. On retrouve la description de ce protocole expérimental sur la (Fig.1 de [121]). Lors de cette accélération les agrégats atomiques finissent par atteindre une certaine énergie cinétique au moment de heurter en bout de course le substrat. Cette énergie par atome sera suffisante pour venir rompre les liaisons atomiques assurant la cohésion de ces clusters et ainsi les faire éclater en milliers d'atomes. Ces atomes conserveront alors l'énergie cinétique n'ayant pas servi . L'énergie cinétique n'ayant pas servi à l'éclatement du cluster, elle sera conservée par ces atomes. Ces derniers se comportent alors à la surface du substrat comme le feraient des adatoms. A la différence près qu'ils seront tous très énergétiques. Ceci aura pour conséquence de favoriser les croissances épitaxiales sur un substrat à basse température, un exemple est donné dans [120] travail dans lequel Yamada grâce à la méthode ICB aura été en mesure de faire croître à la surface d'un substrat en silicium un film mince d'aluminium dont l'orientation cristalline est corrélée à celle du substrat.

La méthode ICB précédemment décrite possède cependant un défaut majeur qui est de ne potentiellement produire aucun agrégat atomique ou bien des agrégats de très petite taille. En effet d'après [105] en adaptant à la sortie de la source d'un montage type ICB un spectromètre de masse à temps de vol, on constate que pour des clusters d'argent et/ou de germanium, on ne compte pas plus de trente cinq atomes par agrégat, quand pour [92] dans lequel ces mêmes mesures ont été réalisées pour un plus large panel d'éléments chimiques (Te, Zn, Se, Mg,

Al, Ge et Ag), on compte moins de dix atomes par cluster. Ainsi la méthode ECI acronyme pour "energetic cluster impact" [33] aura été développée par Haberland afin de palier à ce défaut majeur de la méthode ICB. L'évolution déterminante de la méthode ECI par rapport à la précédente ne réside pas dans le fait de fragmenter le matériau issu de la source grâce aux décharges provoquées par un magnétron, mais d'avoir choisi une source de Sattler [96]. Ce type de source utilise un flux de gaz rare (argon dans le cas de [33]) pour premièrement faire ralentir par collision avec les atomes d'argon de ce flux, les monomères, dimères, trimères, etc très excités de l'élément que l'on souhaite voir condenser à l'intérieur de la source et ainsi favoriser leurs accrétions; mais aussi dans un second temps pouvoir expulser hors de celle-ci ces agrégats atomiques ainsi formés, lorsque ces derniers auront réussi à agréger un nombre voulu d'atomes. Afin de piloter la distribution de tailles de ces agrégats atomiques et ainsi avoir un bien meilleur contrôle sur ce qui se passera ensuite au moment où ces clusters iront heurter le substrat, il faudra ajuster la pression du flux de gaz rare en fonction de la nature de l'élément chimique que l'on souhaite voir s'agréger [94]. De même que pour la méthode IBC, on retrouve pour la méthode ECI une chambre d'ionisation et des électrodes générant un champ électrique qui accélérera les agrégats atomiques une fois ionisés. La description du protocole expérimental de la méthode ECI est cette fois-ci représenté sur la (Fig.1 de [33]).

Que ce soit par la méthode IBC [121] ou bien ECI [33] en déposant des agrégats atomiques ionisés projetés à haute énergie cinétique sur un substrat, on obtiendra un film mince composé des atomes qui à l'origine formaient ces clusters.

### 2.3.2 . Dépôts d'agrégats atomiques à basse énergie cinétique

Grâce à une simulation de dynamique moléculaire, on peut modéliser la physique des impacts d'agrégats atomiques sur un substrat et ainsi évaluer comment se comporte cet ensemble entre le moment où aura lieu le bombardement et quelques femto secondes plus tard. Sur la (Fig.2.9) tiré de [32], un travail réalisé par Haberland *et al.*, est représentée la simulation du bombardement d'un substrat en molybdène par des  $\text{Mo}_{1043}$  (clusters constitués de 1043 atomes de molybdène eux aussi), suivant que ces derniers possèdent une énergie cinétique valant 0.1 eV/atome, 1.0 eV/atome et 10.0 eV/atome. Dans le cas où leur énergie cinétique vaut 0.1 eV/atome, les premiers agrégats atomiques qui iront se déposer à la surface du substrat, le feront sans presque perturber l'organisation cristalline de celui-ci. Cette observation est confirmée par la (Fig.5 de [32]) qui représente suivant la direction perpendiculaire au substrat, la densité atomique  $\rho_{\text{substrate}}$  des atomes provenant de celui-ci et  $\rho_{\text{clusters}}$  celle des atomes issus à l'origine des clusters, telles que 1 équivaut à la valeur de la densité atomique du substrat lorsqu'il n'est pas perturbé. Les agrégats atomiques suivant viennent alors heurter les autres clusters ayant déjà recouvert le substrat. Ils s'empileront donc les uns sur les autres tout en conservant les formes qu'ils auront initialement obtenues au moment où ils se seront agglomérés dans la source. Le dépôt qui en résulte est granuleux et comporte de larges cavités, ce qui a pour conséquence de rendre sa densité inférieure à moins de la moitié de celle du substrat. Le dépôt ainsi constitué s'avère donc être très superficiel et l'on pourra aisément le retirer de la surface du substrat. Pour un bombardement d'agrégats atomiques dont l'énergie cinétique est cette fois-ci de 1.0 eV/atome, le substrat subira des perturbations non négligeables autour des premières couches composant sa structure cristalline. De ces perturbations en résulte

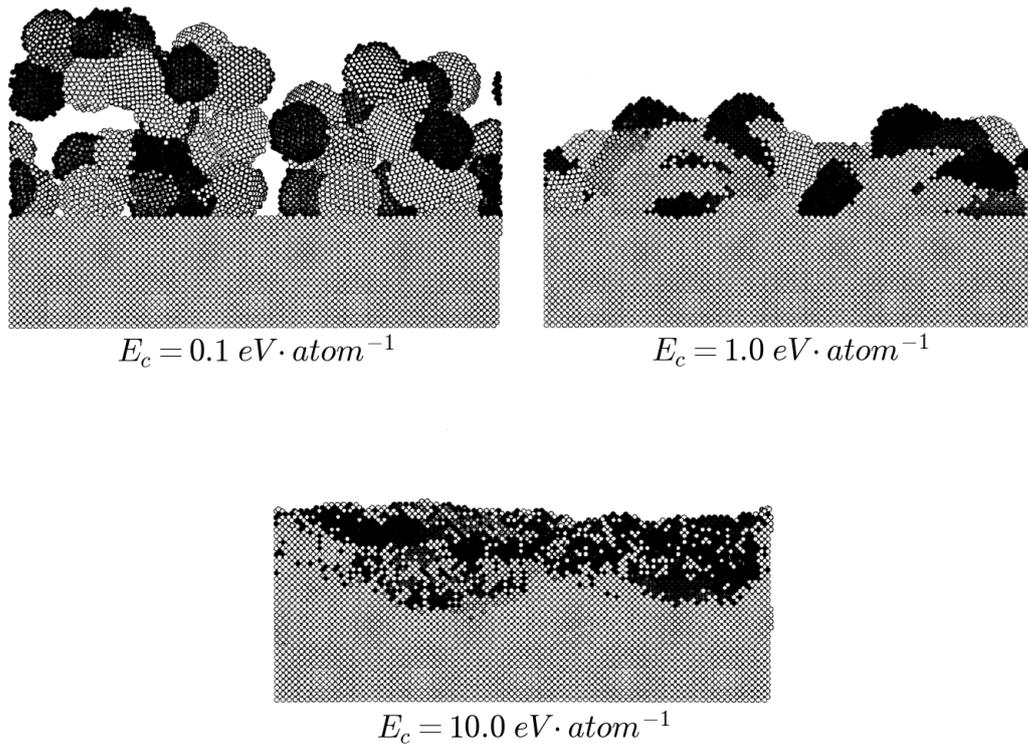


Figure 2.9 – Simulations de dynamique moléculaire modélisant l'état du substrat et des clusters l'ayant percuté, quelques femto secondes après la fin de ce bombardement par ECI. Le réseau cristallin constituant le substrat est composé d'atomes de molybdène, tout comme les agrégats atomiques  $\text{Mo}_{1043}$  composés pour chacun de 1043 atomes de molybdène. Chaque image correspond à une simulation réalisée pour des clusters projetés sur le substrat avec une énergie cinétique  $E_c$  donnée. Dans le sens de la lecture on a  $E_c = 0.1 \text{ eV/atome}$ ,  $E_c = 1.0 \text{ eV/atome}$  et  $E_c = 10.0 \text{ eV/atome}$  et on constate que plus cette énergie cinétique est importante, moins la forme initiale des agrégats atomiques ainsi que celle du substrat seront préservées à l'issue du dépôt. (From Haberland *et al.* [32])

un mélange entre les atomes de ces premières couches et ceux ayant appartenu aux clusters. Ce qui aura pour conséquence une bien meilleure adhésion du film mince ainsi constitué à la surface du substrat. Celui-ci sera d'ailleurs bien plus compact que le dépôt précédent, sa densité avoisinant 80% de celle du substrat non perturbé. Enfin lorsque les agrégats atomiques sont projetés à une énergie cinétique atteignant 10.0 eV/atome, le mélange entre les atomes ayant appartenu aux clusters et ceux du substrat concerne désormais aussi des atomes qui se localisaient initialement sur des couches du substrat bien plus profondes que celles de l'exemple précédent. Pour une telle énergie cinétique les agrégats atomiques éclatent et il devient difficile de faire la différence entre eux et le substrat tant leurs intégrités n'auront pas du tout été conservées.

Dès lors grâce à la (Fig.2.9), on comprend qu'en fonction de la nature atomique du substrat et de celle des clusters qui le bombardent, plus l'énergie cinétique de ces agrégats atomiques est importante, moins la morphologie du dépôt qui se formera à la surface du substrat ne conservera la forme initiale des agrégats atomiques à l'origine de sa création. D'autres simulations de dynamiques moléculaires modélisant des dépôts d'agrégats atomiques existent. C. Massobrio et B. Nacer dans [67] proposent notamment une modélisation dans laquelle cette fois-ci le substrat n'est pas constitué du même élément chimique que celui des clusters à hautes énergies qui le bombardent. On retrouve aussi ce type de simulation dans [50] où Kelchner *et al.* s'intéressent entre autres à l'influence qu'auront les tailles des agrégats atomiques sur la morphologie finale du film mince résultant de leur dépôt à basse énergie. Ainsi ils en arrivent à la conclusion que pour des petits agrégats constitués seulement de dix à cinq atomes, ces derniers ont tendance à coalescer. Autrement dit ces clusters minimisent leurs tensions de surface en fusionnant les uns avec les autres et de fait perdent leurs formes initiales. Dès lors même à basse énergie cinétique si l'on souhaite que notre dépôt conserve la forme initiale des agrégats atomiques à l'origine de sa création, une condition nécessaire sera que ces clusters aient une taille suffisante pour limiter ce phénomène de coalescence. En conservant en mémoire la forme initiale des agrégats atomiques à l'origine de leurs constructions, les films minces bénéficient de l'excellent rapport surface sur volume de ces clusters. Ainsi ces structures partageront le même pouvoir de réactivité chimique que celui des agrégats atomiques qui les composent.

Dans la suite de notre travail nous considérerons exclusivement ce type de dépôts d'agrégats atomiques à basses énergies cinétiques ou LECBD acronyme pour "low energetic clusters beam deposition". Dans la littérature les groupes de recherches ayant expérimenté la LECBD sur des substrats en graphites sont nombreux [7], [8], [25], [26], [28], [76], [89] et [114]. En ce qui concerne la nature de la source choisie pour former des agrégats atomiques lors de ces expériences de LECBD, plusieurs choix sont possibles. A l'instar de celle employée lors des expériences d'ECI [33], une source de Sattler [96] a pu être utilisée notamment par P. Mélinon *et al.* dans [76]. Quant à eux A. Perez *et al.* ont fait le choix d'une source à vaporisation laser pour former leurs agrégats atomiques dans [89].

## 2.4 . Diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat

Dans la sous-section 2.2.2 nous avons exposé les différents mécanismes à l'origine de la diffusion d'agrégats atomiques à deux dimensions appelés îlots dont les épaisseurs se limitaient

à une ou deux couches d'adatoms. Ces mécanismes de diffusions sont toujours possibles dans le cas d'agrégats atomiques à trois dimensions, dont les épaisseurs dépassent largement celles de ces îlots. Cependant nous allons à nouveau constater dans cette section que les processus individuels ne peuvent constituer à eux seuls les principaux moteurs du mouvement pour de gros agrégats atomiques à trois dimensions.

#### 2.4.1 . Résultats expérimentaux

Ces agrégats atomiques à trois dimensions sont ceux dont nous venons de décrire dans la sous-section 2.3.2 les modalités de formations et de dépôts à la surface d'un substrat. Plus particulièrement nous étudierons la diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat ayant été déposés à basse énergie cinétique ou LECBD. Dans la suite de ce travail lorsque l'on emploiera la dénomination "agrégats atomiques", cela sera pour décrire des clusters préformés au sein d'une source ; tandis que le terme "îlot", lui, renverra aux rassemblement atomiques qui se forment par l'accrétion d'adatoms à l'origine diffusant librement à la surface d'un substrat, comme cela est décrit dans la section 2.2.

De la même façon que celle décrite dans [75], L. Bardotti *et al.* [3] réalisent un LECBD de clusters d'antimoine dont le nombre d'atomes est distribué autour d'une valeur moyenne de  $2300 \pm 600$  atomes à la surface d'un substrat de graphite de type HOPG acronyme en anglais pour "highly ordered pyrolytic graphite". Ce type de substrats en graphite compte peu de défauts sinon des marches délimitant de larges terrasses sur lesquelles pourront diffuser librement les agrégats atomiques. Ces plans cristallins dépourvus de défaut, facilitent grandement l'observation des agrégats atomiques déposés à leurs surfaces. Les substrats de graphite de type HOPG possèdent aussi l'avantage d'être facilement réutilisables. En effet un ancien dépôt d'agrégats atomiques peut être retiré de sa surface par clivage au ruban adhésif. La nouvelle surface ainsi obtenue pourra être ensuite débarrassée de ses impuretés adsorbées lors d'un étuvage. Pour cela le substrat sera chauffé à haute température  $T = 500$  °C durant 5 h et tout ceci dans une atmosphère ultra-vide.

Comme on peut le voir sur la (Fig.2 de [3]) la distribution de la taille des agrégats atomiques déposés et diffusant à la surface du substrat correspond à celle de ces clusters mesurée au moment où ils auront quitté la source. Cela signifie que lors de leur impact avec le substrat ces derniers auront conservé leurs formes et de ce fait ne se seront pas brisés. Les conditions d'une LECBD semblent donc bien être respectées, d'autant plus que l'énergie cinétique par atomes de ces clusters d'antimoines est  $\sim 0.01$  eV/atome. Cette valeur est bien inférieure à  $\sim 0.1$  eV/atome. Or d'après la modélisation faite dans [32] pour des agrégats atomiques de molybdène comptant un millier d'atomes à  $\sim 0.1$  eV/atome, ces clusters conservaient parfaitement leurs formes tandis que leur substrat lui n'était que très légèrement perturbé.

Sur la (Fig.2.10) pour des températures  $T$  à la surface du substrat comprises entre 285 – 500 K, L. Bardotti *et al.* mesurent des coefficients de diffusion allant de  $10^{-9}$  à  $10^{-4}$  cm<sup>2</sup>/s. Or précédemment dans [56] à des températures similaires, K. Kyuno *et al.*, pour des îlots de platine dont les tailles comprises entre 2 et 8 adatoms étaient alors bien plus petits que ces agrégats Sb<sub>2300</sub>, avaient mesuré des coefficients de diffusion dont les ordres de grandeur étaient compris entre  $10^{-18}$  à  $10^{-14}$  cm<sup>2</sup>/s. Dès lors comme précédemment dans [113] ce ne sont pas les mécanismes de diffusions individuelles qui dominent lors de la diffusion d'agrégats atomique mais

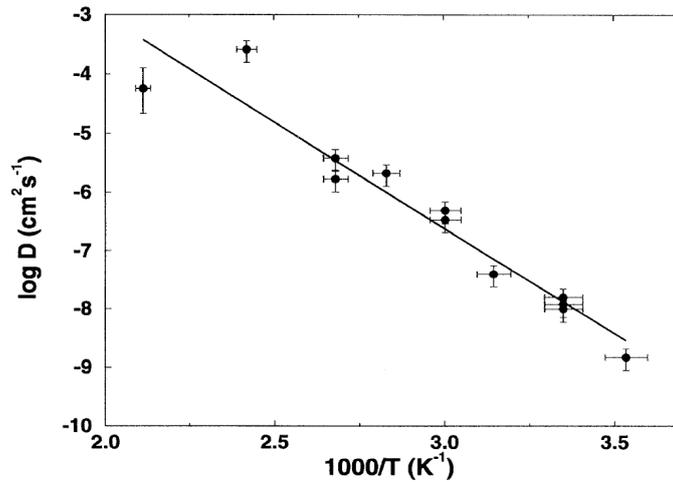


Figure 2.10 – Graphe d’Arrhenius représentant en fonction de la température  $T$ , le coefficient de diffusion  $D$  d’agrégats d’antimoine  $Sb_{2300}$  constitués de 2300 atomes, diffusant à la surface d’un substrat en graphite de type HOPG. Sur ce graphe on retrouve les point expérimentaux, ainsi qu’une courbe ajustée de ces points. Or d’après (2.3) et (2.2) ont pu être déduits à partir du tracé de cette courbe, la barrière de potentiel  $\Delta E = 0.7 \pm 0.1$  eV ainsi que le pré-facteur  $D_0 = 1.6 \times 10^4$  cm<sup>2</sup>/s (From Bardotti *et al.* [3])

les mécanismes de diffusions collectifs. De plus à la différence des îlots, les agrégats atomiques ne sont pas toujours orientés suivant une configuration en épitaxie avec les plans cristallins du substrat sur lesquels ils diffusent et de ce fait ces clusters limitent significativement leurs interactions avec ceux-ci comme cela avait été suggéré dans [52]. Ainsi cela sera aussi une des raisons qui expliquera la diffusion bien plus rapide des agrégats atomiques par rapport aux îlots à la surface d’un substrat.

#### 2.4.2 . Résultat théorique

Afin d’identifier parmi les mécanismes de diffusions collectives cités dans la sous-section 2.2.2, lesquels meuvent les agrégats atomiques, à l’instar des simulations de dynamique moléculaire qui avait pu être réalisées par J.C. Hamilton *et al.* dans [35] pour les îlots, P. Deltour *et al.* dans [16] auront réalisé un travail analogue mais cette fois-ci pour des agrégats atomiques diffusant à la surface d’un substrat de la même nature atomique que ces derniers. A nouveau comme cela était le cas pour les adatoms dans la sous-section 2.1.1, ils utilisent un potentiel empirique de Lennard-Jones défini tel que (2.1) pour modéliser les interactions existantes entre : une paire d’atomes appartenant au substrat, une paire d’atomes au sein d’un cluster et enfin une paire d’atomes dont un appartient au substrat et l’autre à un agrégat atomiques. Les échelles de longueur  $\sigma$  et d’énergie  $\epsilon$  dans (2.1) seront respectivement  $(\sigma_{ss}, \epsilon_{ss})$ ,  $(\sigma_{cc}, \epsilon_{cc})$  et  $(\sigma_{sc}, \epsilon_{sc})$  pour les différents types d’interactions citées au dessus. Par la suite le couple  $(\sigma_{cc}, \epsilon_{cc})$  définira les échelles de longueur et d’énergie de référence. Ainsi l’unité de temps de cette simulation est donnée par  $\tau = \sqrt{m \cdot \frac{\sigma_{cc}^2}{\epsilon_{cc}}}$  avec  $m$  la masse d’un atome, tandis que  $T$

la température du substrat défini comme un thermostat sera donnée sur la base de la valeur  $T^* = \frac{\epsilon_{cc}}{k_B}$  et le coefficient de diffusion  $D$  mesuré à la position du centre de masse d'un agrégat atomique, lui sur celle de la valeur  $D^* = \sigma_{cc} \cdot \sqrt{\frac{\epsilon_{cc}}{m}}$ .

Dès lors le substrat est modélisé par un réseau atomique hexagonal pour lequel chacun des  $N_s$  atomes composant ce réseau à deux dimensions est attaché à sa position d'équilibre par un ressort à faible raideur et forment ainsi un système à  $N_s$  oscillateurs harmoniques. Initialement les atomes d'un cluster sont disposés à la surface de ce réseau sous la forme d'un cristal cubique. Au bout de  $500\tau$  le système est considéré à l'équilibre et c'est seulement à partir de ce moment là que les mesures sont réalisées. Ainsi à  $T = 0.3 \cdot T^*$  les agrégats atomiques finissent par prendre la forme d'une gouttelette semi sphérique mouillant partiellement le substrat illustré à gauche de la (Fig.2.11) pour un cluster formé de  $N = 100$  atomes. L'angle de mouillage est plutôt indépendant de la taille des agrégats atomiques pour des clusters qui dans ces simulations voient leurs nombres d'atomes varier entre 10 et 500. Dans [38] l'évaluation de celui-ci est expliqué en détail pour des clusters de molécule d'eau comptant une centaine d'atome. Cet angle dépend avant tout ici de l'intensité  $\epsilon_{sc}$  des interactions qui existent entre les atomes appartenant au substrat et ceux formant l'agrégat atomique. Pour une intensité suffisamment importante, la gouttelette qu'il forme finira par totalement s'étaler à la surface du substrat.

Lors de son déplacement à la surface d'un substrat à la température de  $T = 0.3 \cdot T^*$ , un agrégat atomique reste rigide et conserve son "identité". Toujours pour un cluster comptant  $N = 100$  atomes, une moitié de celui-ci a été colorée en gris à un instant  $t$  donné durant de sa diffusion à la surface du substrat et le cliché à droite de la (Fig.2.11) représente ce même agrégat atomique un instant  $t + \Delta t$  après que celui-ci ait parcouru l'équivalent de 3.5 fois la longueur d'une maille hexagonale de ce substrat. Ils constatent alors que chacune des moitiés du cluster a conservé ses atomes initialement colorés malgré la diffusion de cette agrégat atomique, c'est en cela que l'on dit qu'il conserve son "identité". Cette observation tend à confirmer les interprétations faites dans [3] à propos de la nature collective des processus à l'origine du mouvement des clusters d'antimoine à la surface d'un substrat HOPG. Plus encore le fait que dans ces simulations les agrégats atomiques conservent leurs identités montre que ces derniers lors de leurs diffusions sont dominés par un mécanisme de diffusion par glissement.

Dès lors toujours d'après P. Deltour *et al.* dans [16], le coefficient de diffusion d'un agrégat atomique en plus de varier en fonction de la température du substrat<sup>2</sup>, celui-ci dépendra aussi de deux autres principaux paramètres : la taille que feront ces agrégats atomiques à l'instar des îlots précédemment étudiés, ainsi que la nature du réseau atomique constituant le plan cristallin à la surface duquel ces clusters se déplacent.

Ainsi à l'interface entre le plan cristallin du substrat et la facette de l'agrégat atomique en contact avec celui-ci, l'orientation plus ou moins épitaxiale de ces deux surfaces influencera grandement la valeur du coefficient de diffusion du centre de masse de ce cluster. Plus le réseau atomique à la surface de contact de ce cluster correspondra avec celui du plan cristallin sur lequel il diffuse, plus les processus dominant sa diffusion seront des mécanismes de diffusions

---

2. La température du substrat est à l'origine de l'énergie thermique responsable de la vibration des atomes au sein d'un cluster. Ainsi thermalisés ces agrégats atomiques pourront franchir les barrières de potentiel à la surface du substrat et se mouvoir.

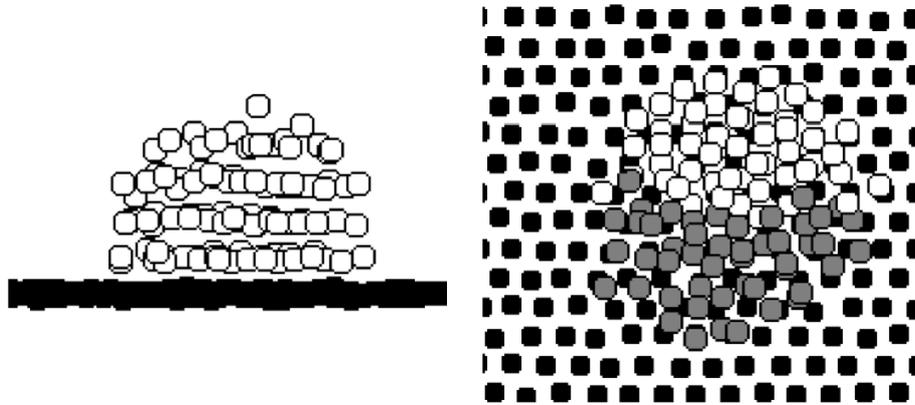


Figure 2.11 – Image construite à partir d’une simulation de dynamique moléculaire visant à étudier l’évolution de la configuration des atomes d’un agrégat atomique durant sa diffusion à la surface d’un substrat. Ce cluster est composé de  $N = 100$  atomes interagissant entre eux et avec ceux du réseau hexagonal que constitue le substrat, via des potentiels de Lennard-Jones (2.1). (gauche) vue latérale permettant d’apprécier l’angle de mouillage avec lequel cet agrégat atomique se dépose à la surface de ce réseau hexagonal, en l’occurrence sous la forme d’une gouttelette quasi-hémisphérique dont la surface de contact avec le substrat  $S \propto N^{\frac{2}{3}}$ . (droite) vue du dessus faisant état de la conservation pour ce cluster de sa configuration initiale et cela après qu’il ait parcouru l’équivalent de 3.5 fois la longueur d’une maille hexagonale de ce substrat. Au préalable, les atomes de cet agrégat atomique auront été colorés en noir ou blanc, suivant la moitié à laquelle ces derniers appartenaient au début de la simulation. (From Deltour *et al.* [16])

individuelles et donc lents. Dans leur simulation pour mettre en évidence cet effet, ils auront mesuré, toujours pour un substrat dont la température est  $T = 0.3 \cdot T^*$  et un cluster formé de  $N = 100$  atomes, le coefficient de diffusion du centre de masse de ce dernier pour différents rapports  $\frac{\sigma_{cc}}{\sigma_{ss}}$  d’échelles de longueur entre la maille de l’agrégat atomique et celle du réseau hexagonal qu’est le substrat. Pour des rapports compris entre  $\sigma_{cc}$  deux fois plus petit que  $\sigma_{ss}$  et inversement, sur la (Fig.2.12) est tracée l’évolution du coefficient de diffusion. Lorsqu’une forte correspondance existe entre le réseau atomique du substrat et celui de la facette de l’agrégat atomique  $\sigma_{cc} = \sigma_{ss}$ , le coefficient de diffusion mesuré est très faible car l’orientation entre ces deux surfaces est proche de l’épitaxie. Ceci se traduit pour le cluster par une configuration dans laquelle il est énergétiquement très stable, autrement dit plongé dans un puits de potentiel duquel ce dernier peut difficilement s’échapper. Le mécanisme de diffusion par glissement dans cette configuration requerrait donc de la part de l’agrégat atomique de franchir une barrière de potentiel proportionnellement  $S \propto N^{\frac{2}{3}}$  fois supérieur à celle perçue par un seul atome. Ce facteur  $S$  de proportionnalité correspondant à la surface de la facette du cluster

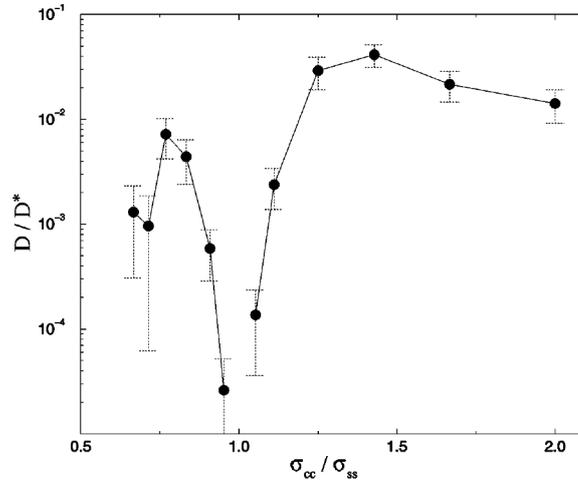


Figure 2.12 – Évolution de la valeur du coefficient de diffusion d'un cluster, en fonction de la correspondance entre le réseau atomique du substrat et celui de la facette de l'agrégat atomique à l'interface avec ce dernier. Ces données auront été obtenues à l'issue de simulations de dynamique moléculaire modélisant les interactions entre atomes par des potentiels de Lennard-Jones (2.1) et partageant chacune les mêmes paramètres  $12500\tau$ ,  $N = 100$ ,  $\epsilon_{sc} = 0.4 \cdot \epsilon_{cc}$  et  $T = 0.3 \cdot T^*$ . Lorsque  $\sigma_{cc} = \sigma_{ss}$  l'orientation entre ces deux surfaces est proche de l'épitaxie et le cluster piégé dans un profond puits de potentiel diffuse très difficilement. (From Deltour *et al.* [16])

quasi-hémisphérique représenté à gauche de la (Fig.2.11) d'où  $R \propto \sqrt[3]{N}$  [38]. Ainsi dans cette configuration ce sont les mécanismes de diffusions individuelles qui sont principalement à l'origine des mouvements lents d'un agrégat atomique, ce qui explique une diffusion si lente à la surface du substrat que lors de simulations; l'échelle de temps  $\tau$  ne permet pas de l'évaluer. Cependant il suffit de s'écarter très légèrement de cette configuration pour que la valeur du coefficient de diffusion croisse très rapidement. L'orientation epitaxiale entre les deux surfaces de contact n'étant plus satisfaite, le mécanisme de diffusion par glissement domine à nouveau la dynamique de l'agrégat atomique. A l'instar des harmoniques dans un signal, dès lors que l'on s'approche des rapport  $\frac{\sigma_{cc}}{\sigma_{ss}} = \frac{1}{2}$  et  $\frac{\sigma_{cc}}{\sigma_{ss}} = 2$  le coefficient de diffusion décroît à nouveau.

A gauche de la (Fig.2.13) toujours pour un cluster comptant  $N = 100$  atomes, P. Deltour *et al.* ont vérifié grâce au tracé réalisé sur un graphe d'Arrhenius que le coefficient de diffusion mesuré pour le centre de masse d'un agrégat atomique dans leur modélisation suivait bien une loi d'Arrhénius comme cela était déjà le cas pour les îlots et les adatoms simples avant eux. Qu'en est il alors de la dépendance du coefficient de diffusion en fonction du nombre d'atomes  $N$  constituant ces clusters? Le graphe à droite de la (Fig.2.13) montre l'évolution du coefficient de diffusion d'un agrégat atomique en fonction de sa taille et cela pour un substrat à la température  $T = 0.3 \cdot T^*$  pour lequel la longueur de la maille de son réseau atomique hexagonal varie et ainsi du même coup le rapport échelles de longueur  $\frac{\sigma_{ss}}{\sigma_{cc}}$ . Pour un rapport

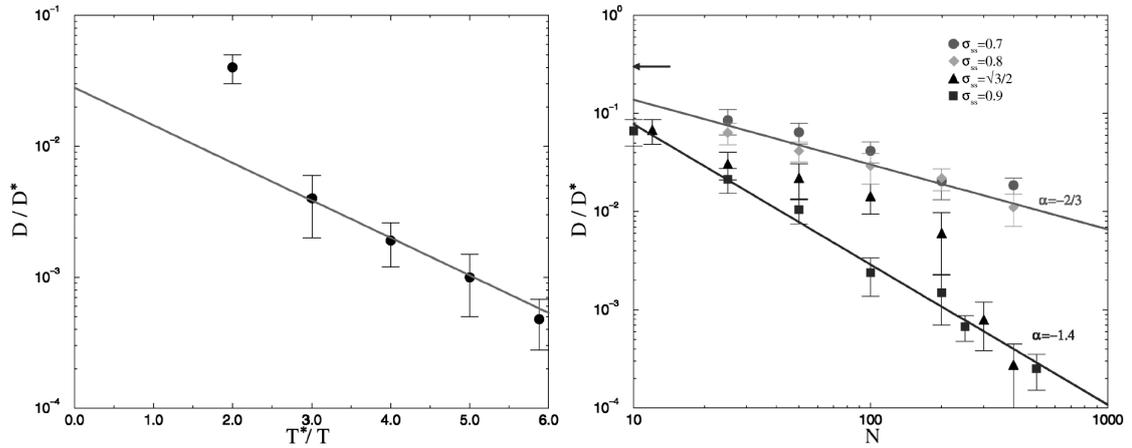


Figure 2.13 – (gauche) Graphe d'Arrhenius représentant en fonction de la température  $T$ , le coefficient de diffusion  $D$  d'un agrégat atomique constitué de  $N = 100$  atomes, diffusant à la surface d'un réseau hexagonal durant  $12500\tau$  telle que  $\epsilon_{sc} = 0.4 \cdot \epsilon_{cc}$ . Sur ce graphe on retrouve des points obtenus au moyen de simulations de dynamiques moléculaires modélisant les interactions entre atomes par des potentiels de Lennard-Jones (2.1), ainsi qu'une courbe ajustée d'après (2.3) et (2.2) de ces points. (droite) Évolution suivant une loi de puissance  $\alpha$ , de la valeur du coefficient de diffusion d'un cluster, en fonction du nombre  $N$  d'atomes qui le composent et cela pour différentes correspondances entre le réseau atomique du substrat et celui de la facette de l'agrégat atomique à l'interface avec ce dernier. Ces données auront été obtenues à l'issue de simulations ayant duré  $12500\tau$  et partageant chacune les mêmes paramètres  $\sigma_{ss} = 0.9 \cdot \epsilon_{cc}$ ,  $\epsilon_{sc} = 0.4 \cdot \epsilon_{cc}$  et  $T = 0.3 \cdot T^*$  (From Deltour *et al.* [16])

$\frac{\sigma_{ss}}{\sigma_{cc}} = 0.7$  ou  $0.8$  pour lequel l'orientation epitaxiale entre les surfaces de contact du cluster et du substrat n'est pas satisfaite, le mécanisme de diffusion par glissement domine la dynamique de l'agrégat atomique. Dès lors dans cette configuration le coefficient de diffusion du cluster suit une loi de puissance  $D \propto N^{-\frac{2}{3}} \propto S^{-1}$ . Autrement dit le pré-facteur  $D_0$  du coefficient de diffusion  $D$  est inversement proportionnel à la valeur de l'aire  $S$  de la facette du cluster en contact avec le plan cristallin. Tandis que pour un rapport  $\frac{\sigma_{ss}}{\sigma_{cc}} = 0.9$  pour lequel l'orientation entre les deux surfaces de contact est plus proche de l'epitaxie, ce sont les mécanismes de diffusions individuelles qui sont à l'origine du mouvement du centre de masse de l'agrégat atomique et bien que le pré-facteur  $D_0$  suit toujours une loi de puissance, celle-ci possède un exposant valant cette fois-ci  $-1.4$ . La (Fig.2.14) représente suivant ces deux cas la trajectoire aléatoire du centre de masse d'un cluster formé de  $N = 100$  atomes à la surface du réseau atomique hexagonal qui modélise le substrat dont la température est encore  $T = 0.3 \cdot T^*$ . Dans le cas où l'agrégat atomique entretient une orientation epitaxiale avec ce dernier, cette trajectoire est très erratique et semble suivre les contours de ce réseau hexagonal en visitant les sites d'adsorption comme le faisaient les adatoms dans la sous-section 2.1.1. En revanche lorsque ce n'est pas le cas, l'agrégat atomique semble ne pas être influencé par le substrat lors

de sa diffusion et la trajectoire de son centre de masse est beaucoup moins discontinue.

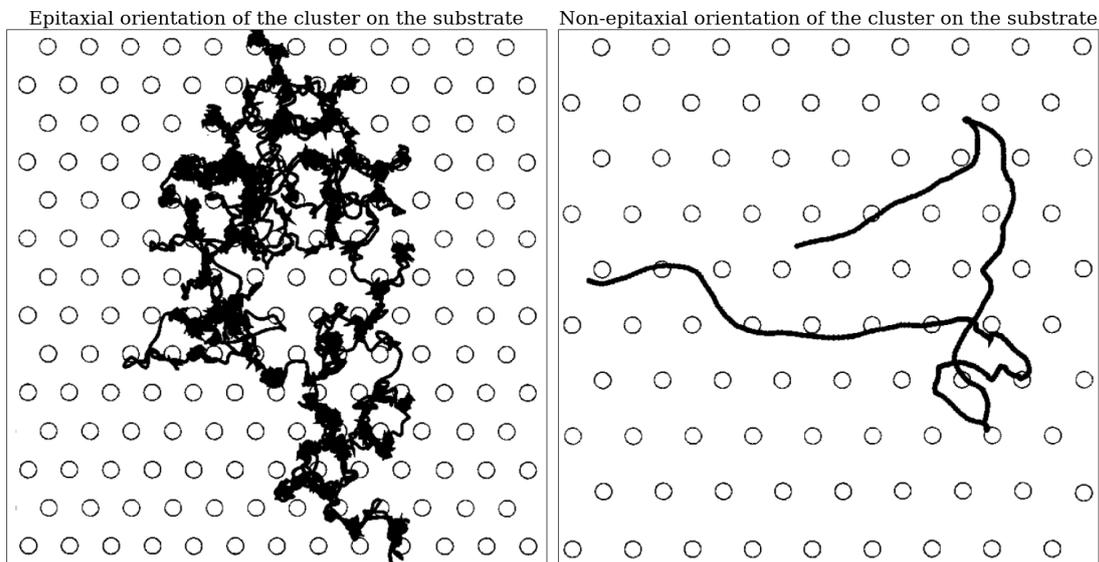


Figure 2.14 – Trajectoires du centre de masse d'un cluster constitué de  $N = 100$  atomes diffusant à la surface d'un réseau cristallin hexagonal, celles-ci obtenues au moyen de simulations de dynamique moléculaire dans lesquelles les atomes interagissent via des potentiels de Lennard-Jones (2.1) pour les paramètres  $\epsilon_{sc} = 0.4 \cdot \epsilon_{cc}$  et  $T = 0.3 \cdot T^*$ . (gauche) Si  $\sigma_{ss} = 0.9 \cdot \sigma_{cc}$  autrement dit pour une très bonne correspondance entre le réseau atomique du substrat et celui de la facette de l'agrégat atomique en contact avec ce dernier, la trajectoire de l'agrégat atomique est très erratique et semble suivre le réseau hexagonal que définissent les sites d'adsorption du réseau atomique hexagonal constituant le substrat. (droite) Cependant lorsque cette correspondance n'est pas bonne  $\sigma_{ss} = 0.7 \cdot \sigma_{cc}$ , la trajectoire de l'agrégat atomique n'est alors plus influencée par la nature du réseau cristallin sur lequel ce cluster diffuse. (From Jensen *et al.* [44])

## 3 - Simulations de structures dendritiques d'agrégats atomiques auto-organisés

### 3.1 . Modélisation de l'auto-organisation d'agrégats atomiques à l'issue de leurs diffusions à la surface d'un substrat

Dans la suite de ce travail, nous allons présenter différents modèles ayant pour but de simuler le plus fidèlement possible l'auto-organisation d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat telle que :

Ces clusters seront déposés à basse énergie cinétique à la surface du substrat et conserveront ainsi leurs "identités". (voir la sous-section 2.3.2)

Dès lors comme dans [3], on considérera que l'orientation entre la surface de contact d'un cluster et celle de son substrat n'est pas épitaxiale et donc que les mouvements d'un agrégat atomique ne sont pas influencés par la maille du plan cristallin à la surface duquel il diffuse. (voir la section 2.4)

Ces clusters seront d'une taille suffisante [50] pour ne pas qu'ils coalescent et finiront seulement par se coller les uns aux autres à l'issue de leurs diffusions à la surface d'un substrat.

#### 3.1.1 . Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions ou "Diffusion Limited Aggregation"

Le processus DLA acronyme en anglais pour "Diffusion limited aggregation", est un modèle très bien adapté pour simuler l'auto-organisation d'agrégats atomiques déposés avec une faible couverture à la surface d'un substrat. Avant d'expliquer pourquoi, nous allons brièvement décrire son algorithme. A un instant  $t$  dans un espace à deux dimensions que l'on appellera par la suite domaine de simulation, une seule et unique particule libre diffuse. Lorsque celle-ci rencontre un rassemblement de particules fixes que l'on pourrait assimiler à une structure dendritique ou une arborescence, elle s'agrège à ce regroupement devenant alors à son tour une particule fixe. Cette arborescence est initialement constituée par sa seule racine la "graine", particule fixe initialement située au centre du domaine de simulation et à partir de laquelle cette structure dendritique va croître. La diffusion d'une nouvelle particule libre se déclenche lorsque prend fin celle de la particule qui la précède. Ce modèle a été proposé pour la première fois en 1981 par T.A Witten et L.M. Sander dans [115] et [116].

Or pour un dépôt à faible couverture, les déplacements des agrégats atomiques à la surface du substrat peuvent être considérés comme étant indépendants les uns des autres à l'instar de la diffusion de traceur décrite pour les adatoms dans la sous-section 2.1.3. Ceci est le cas dans [3] où l'épaisseur en mono-couche de clusters  $Sb_{2300}$  déposée est de 0.14 ML. Ces derniers clairsèment la surface du substrat ce qui a pour conséquence de rendre rares les collisions entre eux. On peut donc raisonnablement faire l'hypothèse que la trajectoire ainsi que la position à laquelle un agrégat atomique s'agrège avec une arborescence de cluster, auront été quasi-indépendantes de celles des autres qui dans le même temps diffusaient aussi.

Autrement dit, compte tenu de la faible densité d'agrégats atomiques à la surface du substrat, il est très peu probable dans l'expérience réalisée dans [3] que pour deux clusters distingués  $A$  et  $B$  diffusant simultanément, ces derniers viennent à se percuter ou bien que le cluster  $A$  après s'être fixé à l'arborescence soit le site que choisira le cluster  $B$  pour se fixer à son tour. Ainsi cet algorithme peut modéliser dans le cas d'un dépôt LECBD à faible couverture, l'auto-organisation d'agrégats atomiques observée à la surface d'un substrat à l'issue de leur diffusion à la surface de celui-ci.

A ce stade il est important de faire remarque que pour n'importe quel algorithme construit sur les bases du modèle de DLA, la notion de temps n'a de sens que pour la dynamique d'une particule libre. En effet le déclenchement artificiel de la diffusion d'une nouvelle particule libre à l'issue de l'accrétion d'une autre l'ayant précédé, rend caduque toute tentative visant à évaluer la dynamique de construction d'une structure dendritique. Dans les perspectives de la conclusion générale, nous verrons que cette mesure revêt un sens si l'on fait le choix d'un autre modèle inspiré toutefois de la DLA, baptisé DDA.

### **Influence sur la morphologie des structures dendritiques de la nature du réseau sous-tendant le domaine de simulation**

On rappelle que nos simulations ont pour but de modéliser la diffusion de clusters dont les mouvements sont parfaitement indépendants de la maille du plan cristallin à la surface duquel ils diffusent. Or les structures dendritiques obtenues par un algorithme DLA, ont des morphologies qui en moyenne sont nettement influencées par la nature du réseau sur lequel a pris place leurs constructions. Dans [71] P. Meakin est le premier à mettre en évidence cette influence sur la morphologie moyenne de ces arborescences dont les croissances auront été simulées à la surface de différents types de réseaux. Sur la (Fig.3.1) en haut à gauche est représenté un nuage de points correspondant aux sites d'un réseau carré sur lesquels ont fini par se fixer les particules issues de quarante simulations de structures dendritiques comptant pour chacune d'entre elles  $N = 80000$  particules. Ce nuage laisse apparaître une forme en croix autour de l'axe horizontal et l'axe vertical passant par le centre de ce réseau, là où se situe la graine. La morphologie moyenne d'une arborescence construite par DLA à la surface d'un réseau carré est donc influencée par celui-ci. Cette observation est confirmée par [73] travail dans lequel à différentes positions  $(R, \theta)$ , P. Meakin et T. Vicsek tracent en fonction de  $\theta$  la courbe en bas à gauche de la (Fig.3.1) représentant la fonction tangentielle d'auto-corrélation de la densité massique définie telle que :

$$C_R(\theta) = \frac{1}{N} \int_0^{\delta r} \int_0^\pi \rho(R+r, \theta+\phi) \rho(R+r, \phi) R d\phi dr \quad (3.1)$$

avec  $\rho$  la densité massique définie comme le nombre de particules comptabilisées dans une surface élémentaire  $R\delta\phi\delta r$ . Ainsi sur la (Fig.3.1) la fonction tangentielle d'auto-corrélation de la densité massique laisse apparaître deux maxima pour les angles  $\theta = \frac{\pi}{2}$  et  $\theta = \pi$  expliquant la forte densité de particules fixes observée autour de l'axe horizontal et de l'axe vertical passant par le centre du réseau carré sur la (Fig.3.1) en haut à gauche. Sur la (Fig.3.1) en haut à droite le nuage de points correspond cette fois-ci aux sites d'un réseau hexagonal sur lesquels sont

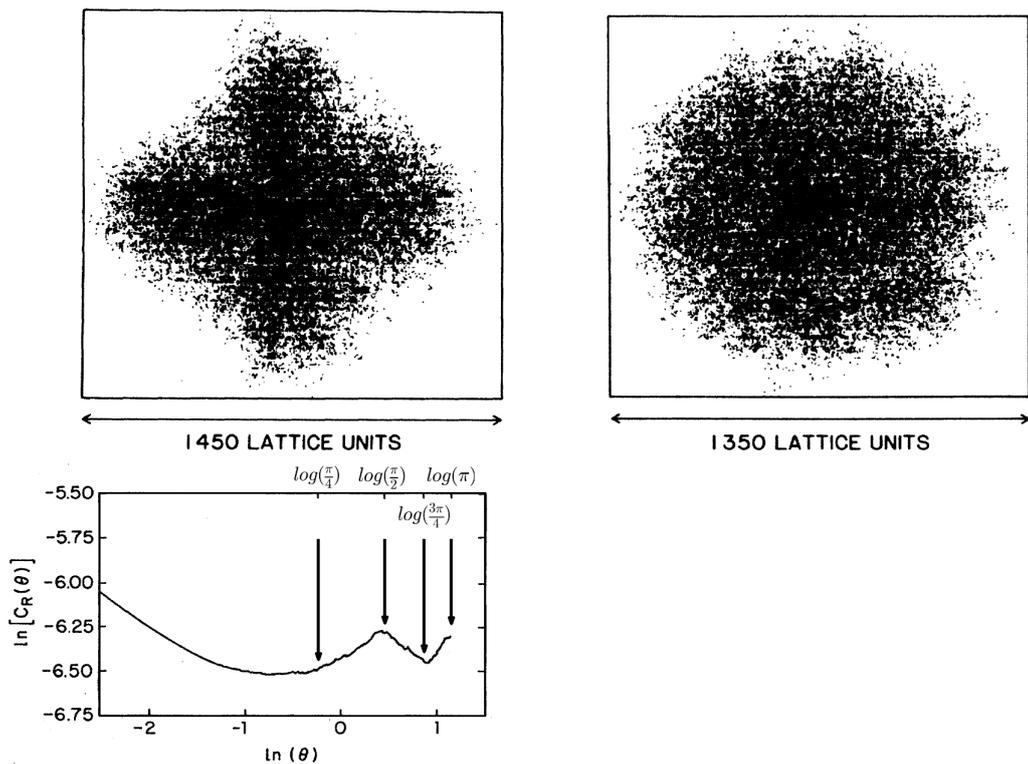


Figure 3.1 – (haut) Cartographies de la densité de probabilité pour une particule libre de se fixer sur l'un des sites d'un réseau définissant le domaine d'une simulation de type DLA. Quarante simulations de structures dendritiques comptant chacune  $N = 80000$  particules auront été nécessaires pour évaluer ces densités. (gauche haut) Pour un réseau carré, les maximum locaux pour une telle densité se situent aux alentours d'une croix centrée sur la position de la "graine". (gauche bas) Cette anisotropie est quantifiée par la fonction tangentielle d'auto-corrélation  $C_R(\theta)$  définie d'après (3.1). (droite haut) Pour un réseau hexagonal, la densité de probabilité pour une particule libre de se fixer sur l'un de ces sites apparaît comme étant uniforme. (From Meakin & al [73] and [71])

venues se fixer les particules issues à nouveau de quarante simulation de structures dendritiques comptant pour chacune d'entre elle  $N = 80000$  particules. A la différence des simulations ayant pris place à la surface d'un réseau carré, la densité massique  $\rho(R, \theta)$  mesurée pour les arborescences ayant crû sur un réseau hexagonal semble isotrope. Cependant P. Meakin ne garantit pas que pour des structures dendritiques de tailles supérieures générées à la surface d'un réseau hexagonal, cette densité  $\rho$  ne se révélerait pas elle aussi anisotrope. Or dans [77] A.Y. Menshutin et L.N. Shchur montrent qu'en effet même pour un réseau hexagonal, la morphologie moyenne des arborescences se développant à sa surface peut être influencée par ce dernier. Sur la gauche de la (Fig.3.2) sont représentées les morphologies moyennes obtenues pour des structures dendritiques formées à la surface d'un réseau hexagonal pour différents niveaux de réduction du bruit lors de leurs constructions. Cette réduction du bruit lors de la formation de ces arborescences consiste à favoriser leurs croissances autour des sites les plus probables en implémentant une condition d'accrétion dans l'algorithme DLA original. Cette condition est simple, une particule libre peut se fixer sur un site, si celui-ci a d'ores et déjà rejeté  $n$  particules libres avant elle. Ainsi plus  $n$  sera important moins les sites d'accrétions les moins probables auront une chance durant la croissance de la structure dendritique d'accueillir une particule. Dès lors pour  $n > 0$  la densité  $\rho$  n'est plus isotrope. De plus sur le graphique à droite de la (Fig.3.2) sont tracées en fonction du nombre de particules fixées  $N$ , pour différentes conditions de rejet  $n$ , l'évolution de la dimension fractale  $D_g$ . Cette dimension fractale est calculée pour une arborescence à partir de son rayon de giration  $R_g$  telle que :

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{c.m}\|^2} \propto N^{\frac{1}{D_g}} \quad (3.2)$$

avec  $\mathbf{r}_{c.m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i$  la position du centre de masse de celle-ci. Lorsque la taille  $N$  des structures dendritiques augmente, à l'exception de  $n = 0$  pour laquelle déjà dans [71] la morphologie moyenne de ces dernières semblait isotrope, la valeur de la dimension fractale  $D_g$  n'est plus constante. Or celle-ci est reliée à la densité massique  $\rho(R, \theta)$  telle que :

$$D_g = \frac{\log\left(\int_0^{R_g} \int_0^{2\pi} dr d\theta \rho(r, \theta)\right)}{\log(R_g)} \quad (3.3)$$

Ainsi cette variation de la valeur de  $D_g$  en fonction de  $N$  pour différents niveaux de réduction du bruit  $n > 0$ , témoigne de l'accentuation de l'anisotropie de  $\rho$  la densité locale de particules fixées autour de la position à la graine  $(R, \theta)$ , à mesure que la taille  $N$  des structures dendritiques étudiées est grande. Le diagramme de la (Fig.8 de [77]) représente l'évolution morphologique des structures dendritiques en fonction de  $k$  le nombre de sites de fixation possibles autour de leurs particules (égale au nombre de coordination  $z = 6$  dans le cas d'un réseau hexagonal) et de  $n$  le niveau de réduction du bruit lors de leurs croissances. Deux régions se distinguent sur ce diagramme, celle pour laquelle le nombre de sites d'accrétions possibles  $k < 6$  et l'autre. Lorsque  $k < 6$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}^*$  la morphologie moyenne des arborescences sera anisotrope alors pour  $k \geq 6$  en dessous d'un certain niveau de réduction de bruit  $n$  celle-ci deviendra isotrope. Or pour des sphères dures, on rappelle que le réseau hexagonal définit pour ces dernières l'arrangement

dont la compacité est maximale. Cela explique pourquoi  $k = 6$  définit la frontière entre les deux régions du diagramme de la (Fig.8 de [77]).

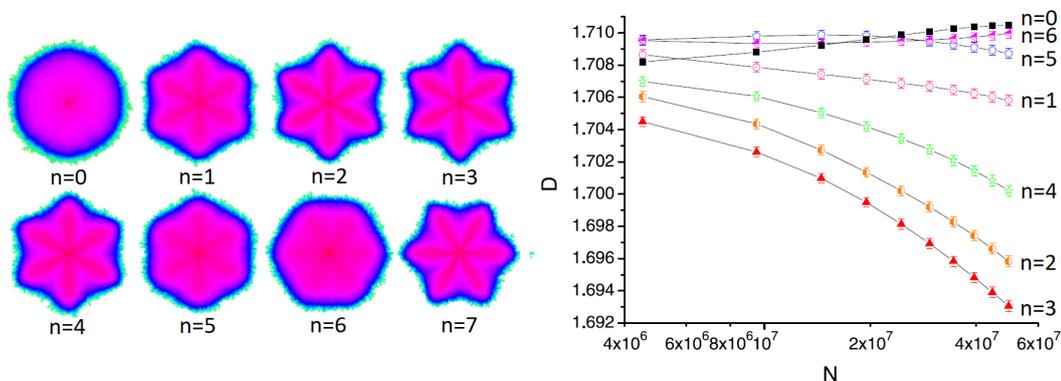


Figure 3.2 – (Gauche) Morphologies moyennes des structures dendritiques formées à la surface d'un réseau hexagonal et cela pour différents niveaux  $n \in \llbracket 0, 7 \rrbracket$  de réduction du bruit lors de leurs constructions. Pour  $n > 0$  la densité de probabilité de présence d'une particule fixe  $\rho$  n'est plus isotrope. (Droite) Évolution en fonction du nombre de particules fixes  $N$  composant une structure dendritique de la dimension fractale  $D_g$  de cette arborescence, définie d'après (3.3) et cela pour différentes conditions de rejet  $n \in \llbracket 0, 6 \rrbracket$ . (From Menshutin & al [77])

### Algorithme DLA hors d'un réseau

Dès lors on comprend qu'il est nécessaire de réaliser des simulations de type DLA hors d'un réseau, c'est à dire piloter par un algorithme faisant diffuser et s'agréger des particules assimilées à des sphères dures tel que  $k \rightarrow +\infty$ ; si l'on souhaite préserver la morphologie des structures dendritiques simulées, de l'influence du réseau sur lequel leurs croissances prendront place. Nous allons ainsi présenter un algorithme bien connu et optimisé au fur et à mesure des années par différents groupes de recherche ([70],[78],[55]) permettant ce type de simulation. Par la suite dans la sous-section 3.1.3, nous apporterons à cet algorithme un certain nombre de modifications afin d'intégrer l'impact qu'un champ de force aura sur le mouvement de ces sphères dures, si celles-ci s'avèrent sensibles à ce dernier.

Afin de fonctionner correctement, cet algorithme nécessite qu'on lui définisse au préalable  $\delta l_{max}$  la distance maximale que pourrait parcourir une particule lors d'un seul de ses sauts à la surface du domaine de simulation ainsi que  $r_p$  le rayon de ces sphères dures. A partir de chacune de ces deux distances en seront calculées deux autres :  $L_{max} \equiv \lceil \delta l_{max} \rceil$  et  $D_c \equiv \lceil 2r_p + 1 \rceil$ , la dernière correspondant à la distance minimale entre une particule libre et une autre fixe en dessous de laquelle une collision entre les deux devient possible. L'addition des

1. Il est à noter que  $r_p > c \cdot \frac{\sqrt{2}}{2}$  de sorte que dans la grille  $\Gamma$  sous-jacente au domaine de simulation et sur laquelle nous reviendrons plus en détail par la suite, deux particules ne puissent jamais partager la même cellule carrée de côtés  $c$ .

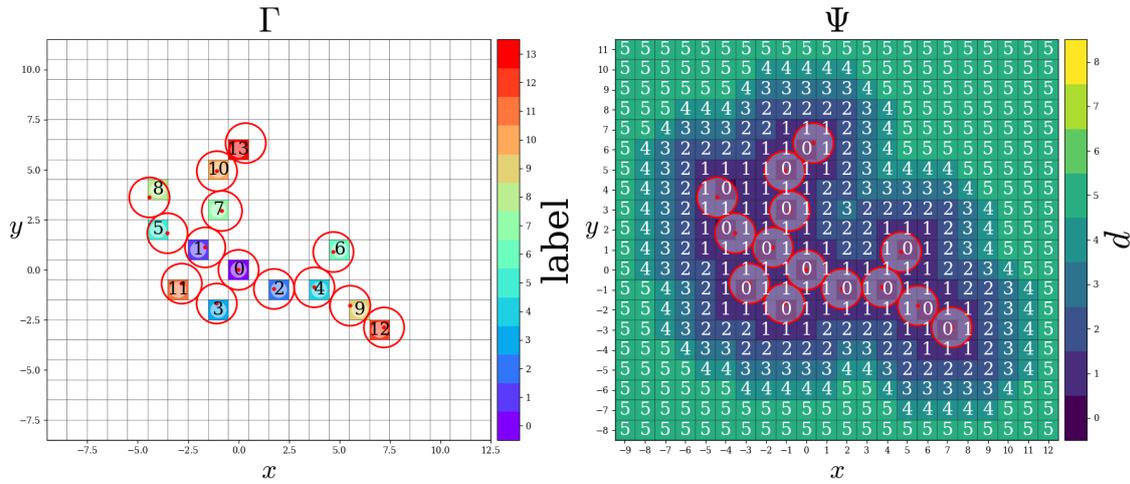


Figure 3.3 – Représentation des grilles  $\Gamma$  (gauche) et  $\Psi$  (droite) à partir de l'exemple d'une arborescence de type DLA composée de quatorze sphères dures. Lors de la construction d'une structure dendritique au moyen d'un algorithme de type DLA hors réseau, les informations contenues dans ces deux grilles, recouvrant l'entièreté du domaine de simulation, sont indispensables à l'exécution d'une telle simulation. Ainsi à tout instant de la croissance d'une arborescence et quelle que fuisse la case choisie : la grille  $\Psi$  fournit la valeur de  $d$ , correspondant à la partie entière inférieure de la distance minimale mesurée entre une case donnée et celles qui sont occupées par les particules fixes ; tandis que  $\Gamma$  indique pour une cellule donnée, si on retrouve ou non à l'intérieur de celle-ci une particule fixe et si tel est le cas le numéro de son étiquette. (inspired by (Fig.3) and (Fig.4) from Kuijpers & al [55])

deux définira la valeur  $D_{max} \equiv L_{max} + D_c$  pour laquelle si la distance minimale entre une particule libre et n'importe qu'elle autre particule fixée à la structure dendritique, égale ou dépasse celle-ci, la distance de saut de cette particule libre vaudra  $\delta l_{max}$ .

Cet algorithme met en jeu tour à tour deux grilles  $\Gamma$  and  $\Psi$  ainsi que  $\Omega$  la liste des coordonnées des particules fixées à la structure dendritique, tous les trois jouant des rôles complémentaires les unes par rapport autres tout au long de ce processus tels que :

- **Liste  $\Omega$**  : est une liste  $N \times 2$  contenant les coordonnées exactes dans l'espace euclidien  $\mathbb{R}^2$  des  $N$  particules fixes constituant la structure dendritique.
- **Grille  $\Gamma$  représentée à gauche de la (Fig.3.3)** : est un  $(2n + 1) \times (2n + 1)$  réseau carré dont la longueur de la maille  $c = 1$  et qui recouvre l'entièreté du domaine de simulation. Sur cette grille pour chacune des particules listées dans  $\Omega$ , la cellule dont la coordonnée est la plus proche de la position hors-réseau de celle-ci contiendra son étiquette<sup>2</sup>. Cette grille aura été décrite dans [55].

2. Les étiquettes des particules fixes composant la structure dendritique pourront être attri-

- **Grille  $\Psi$  représentée à droite de la (Fig.3.3)** : est à nouveau un  $(2n+1) \times (2n+1)$  réseau carré dont la longueur de la maille  $c = 1$  et qui recouvre l'entière du domaine de simulation. Chacune des cellules que l'on retrouvera au sein de cette grille contiendra l'information de  $d$ , la partie entière inférieure de la valeur minimale choisie parmi les distances mesurées entre cette case et celles qui dans cette grille seront occupées par des particules fixes. Dans le cas où  $d > D_{max}$  les cellules afficheront  $D_{max}$ . Cela signifie que pour une case contenant la valeur  $D_{max}$ , on peut seulement affirmer que la particule fixe la plus proche se trouve à une distance supérieure ou égale à  $D_{max}$ . Or étant donné que la distance maximale pouvant être parcourue par une particule libre lors d'un seul de ses déplacements est  $\delta l_{max} < L_{max}$ ; aucune collision entre celle-ci et la structure dendritique ne pourrait donc être constatée à l'issue d'un saut ayant pour point de départ une position du domaine de simulation recouverte par une cellule qui afficherait  $D_{max}$ . Ainsi au regard de la limitation sur la distance des sauts effectués par les particules libres, les informations contenues dans les cellules de cette grille sont nécessaires et suffisantes à la gestion des collisions entre les particules libres et fixes. Cette grille aura été décrite dans [70] et aussi dans [55].
- **Grille  $\Psi_{\delta l}$**  : est un  $(2n+1) \times (2n+1)$  réseau carré analogue à la grille  $\Psi$  qui au lieu de contenir l'information  $d$  dans ces cellules, contiendra  $\delta l_{free} = \max(1, \min(d - D_c, \delta l_{max}))$  la longueur minorée par 1 du plus grand saut permis depuis une position contenue dans celui-ci. A première vue la grille  $\Psi_{\delta l}$  pourrait sembler superflue, cependant nous verrons qu'elle jouera un rôle essentiel lorsque plus tard dans la sous-section 3.1.3, la longueur des sauts sera contrainte aussi par la présence d'un champ de force à la surface du domaine de simulation.

A ces deux grilles vient se rajouter la grille  $\Theta$  définie telle que :

- **Masque  $\Theta$  représenté sur la (Fig.5 de [55])** : est un  $(2D_{max} + 1) \times (2D_{max} + 1)$  réseau carré dont les cellules de côté  $c = 1$  contiennent la valeur de la partie entière de la distance séparant ces dernières de celle au centre de cette grille. Dans le cas où cette valeur est supérieure à  $D_{max}$ , les cellules afficheront  $D_{max}$ .
- **Masque  $\Theta_{\delta l}$**  : A l'instar de ce qu'est  $\Psi_{\delta l}$  pour  $\Psi$ , cette grille l'est pour  $\Theta$ . Ces cellules contiennent ainsi la valeur minorée par 1 du plus grand saut possible sans collision entre une particule libre partant de l'une de ces cellules et une particule fixe dont les coordonnées seraient comprises dans la case centrale de cette grille telle que  $\max(1, \min(d - D_c, \delta l_{max}))$ .

Lors de l'accrétion d'une nouvelle particule à l'ensemble de celles constituant la structure dendritique, on rappelle qu'une cellule de la grille  $\Gamma$  dont les coordonnées  $(x_j, y_i) \in \llbracket -n, n \rrbracket^2$  sont les plus proches de celles de cette nouvelle particule fixe, se verra attribuer son étiquette. Les masques  $\Theta$  et  $\Theta_{\delta l}$  permettent alors d'actualiser les valeurs contenues dans les cases de la grille  $\Psi$  respectivement  $\Psi_{\delta l}$  étant compris au voisinage  $\llbracket -D_{max}, D_{max} \rrbracket^2$  de la cellule de

---

buées suivant l'ordre d'arrivée de ces dernières tout au long du processus d'accrétion.

coordonnées  $(x_j, y_i) \in \llbracket -n, n \rrbracket^2$  telles que :

$$\forall (i, j) \in \llbracket -D_{max}, D_{max} \rrbracket^2, \begin{cases} \Psi_{\delta l_{y_i+i, x_j j}} &= \min(\Psi_{\delta l_{i,j}}, \Theta_{\delta l_{i,j}}) \\ \Psi_{y_i+i, x_j j} &= \min(\Psi_{i,j}, \Theta_{i,j}) \end{cases} \quad (3.4)$$

A présent décrivons les étapes de cet algorithme :

1. On dépose une particule libre aux coordonnées polaires  $(R_{drop}, A)$  dans un repère ayant pour origine la graine. L'angle  $A$  est choisi aléatoire suivant une loi uniforme dans l'intervalle  $[0, 2\pi[$ . Si seule la graine est présente à la surface du domaine de simulation on choisit  $R_{drop} = R_{init} \gg D_c$  sinon la valeur de  $R_{drop}$  aura été définie durant l'étape 4.
2. Dans le cas où la diffusion de la particule libre est isotrope. L'angle  $\alpha$  déterminant la direction et le sens suivant lesquels la particule effectuera son saut, sera choisi aléatoirement suivant une loi uniforme telle que  $p_{iso} = \frac{1}{2\pi}$ .
3. A partir de l'information contenue dans la cellule de la grille  $\Psi$  (ou  $\Psi_{\delta l}$ ) la plus proche de la position de la particule libre, on déterminera la longueur de son prochain saut  $\delta l$  telle que :
  - (a) Si  $d > D_c$  : la particule libre est localisée à une distance supérieure ou égale à  $D_c$  de la particule fixe la plus proche de cette dernière. Aucune collision n'est à prévoir, on choisit donc  $\delta l = \delta l_{free} = \max(1, \min(d - D_c, \delta l_{max}))$  puis on passe à l'étape 5.
  - (b) Sinon : la particule libre est susceptible de rencontrer sur la trajectoire de son saut une particule fixe. Dans ce cas on interroge les cellules de la grille  $\Gamma$  dans un rayon  $D_c$  autour de la position de la particule libre, afin d'établir à partir de  $\Omega$ , une liste restreinte des coordonnées des particules fixes potentiellement candidates pour une collision avec cette dernière. On teste alors pour l'ensemble des particules appartenant à cette liste, si il aura lieu une collision ou non grâce à la méthode décrite dans la section 2 de [55].
    - i. Si une collision entre la particule libre et des particules fixes à lieu, on choisit celle pour laquelle la plus petite valeur de  $\delta l_{hit}$  (longueur du saut maximal pour qu'à l'issue de son déplacement, la particule libre touche sans pénétrer la particule fixe sur laquelle elle se juxtapose) et on déplace la particule suivant cette longueur. On passe alors à l'étape 4.
    - ii. Si aucune collision n'est constatée, on déplace la particule suivant une longueur de saut  $\delta l = \delta l_{free}$  puis on passe à l'étape 5.
4. On met à jour les informations contenues dans les cellules des grilles  $\Omega$ ,  $\Gamma$ ,  $\Psi$  (ou  $\Psi_{\delta l}$ ), et on réévalue  $R_{max}$  (le rayon maximal de la structure dendritique mesuré à partir de sa graine) afin de modifier si besoin la valeur de  $R_{drop} = \max(R_{init}, 3(R_{max} + r_p))$  et  $R_{kill} = 6(R_{max} + r_p)$ , respectivement le rayon à partir duquel une particule libre initie son mouvement de diffusion et celui au delà duquel elle sera replacée à une position de départ  $(R_{drop}, A)$ . On retourne alors à l'étape 1.

5. On vérifie que la nouvelle position de la particule libre soit toujours à l'intérieur du cercle de rayon  $R_{kill}$  et dont le centre est la graine.
  - (a) Si cela est le cas, on repasse par l'étape 2.
  - (b) Sinon on retourne à l'étape 1.

### 3.1.2 . Détermination de la probabilité de saut d'une particule libre dont le mouvement est régi par une équation de Fokker-Planck

#### Équation de Fokker-Planck

Dans l'algorithme décrit dans la sous-section 3.1.1, les particules libres effectuent une marche aléatoire isotrope avant de venir se fixer à la structure dendritique. En effet lors de l'étape 2 de l'algorithme, l'angle  $\alpha$  définissant le sens et la direction suivant lesquels une particule effectuera ses sauts, est déterminé par une loi uniforme dans l'intervalle  $[0, 2\pi[$ . Ainsi le mouvement isotrope décrit par ces particules libres à la surface du domaine de simulation est qualifié de brownien, du nom de Robert Brown un botaniste qui en 1827 observa ce type de mouvements erratiques pour de toutes petites particules contenues dans le fluide situé à l'intérieur des grains de pollen de la *Clarkia pulchella* [10]. Ce système en physique fait partie de la famille des colloïdes, systèmes dans lesquels des particules dites colloïdales subissent suivant toutes les directions les chocs répétés de plus petites constituant le fluide dans lequel elles baignent. En 1908 Paul Langevin décrit la dynamique de diffusion de ces particules intégrant à celle-ci la possibilité d'y inclure une dérive matérialisée par un champ de force dont les particules colloïdales ressentiraient l'influence. Les petites particules de fluides sont animées par leurs énergies thermiques  $k_B T$  et thermalisent ainsi les particules colloïdales dont la dynamique est déterminée pour chacune d'entre-elles par :

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\frac{m}{\tau} \frac{dx(t)}{dt} - V'(x) + \sqrt{\frac{2mK_B T}{\tau}} \eta(t) \quad (3.5)$$

avec  $\tau$  le temps de relaxation du fluide,  $m$  la masse d'une particule colloïdale,  $V(x)$  l'énergie potentielle de cette dernière dérivant d'un champ de force tel que  $F(x) = -V'(x)$  et enfin  $\eta(t)$  un bruit blanc gaussien tel que  $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t-t')$  et  $\langle \eta(t) \rangle = 0$ . Or dans la limite des systèmes colloïdaux sur-amortis tels que  $\tau \ll 1$  cette equation de Langevin adiabatique se résume à :

$$\frac{dx(t)}{dt} = \mu F(x) + \sqrt{2\mu K_B T} \eta(t) \quad (3.6)$$

telle que  $\mu = \frac{\tau}{m}$  définit la mobilité des particules colloïdales tandis que  $D = \frac{K_B T}{m} \tau$  leur coefficient de diffusion. Dès lors  $\forall g \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  d'après la formule démontrée en 1944 par le mathématicien Kiyosi Itô dans [43] :

$$\frac{dg(x(t))}{dt} = \frac{dx(t)}{dt} \frac{dg(x(t))}{dx(t)} + D \frac{d^2 g(x(t))}{dx^2(t)} \quad (3.7)$$

on a<sup>3</sup> :

$$\left\langle \frac{dg(x(t))}{dt} \right\rangle = \left\{ \begin{array}{l} \int_{B.C} dx g(x) \frac{dP(x, t | x_0, t)}{dt} \\ \int_{B.C} dx g(x) \left( \frac{\partial^2 D(x) P(x, t | x_0, t)}{\partial^2 x} - \frac{\partial \mu F(x) P(x, t | x_0, t)}{\partial x} \right) \end{array} \right\} \quad (3.8)$$

et donc comme (3.8) se vérifie pour n'importe qu'elle fonction  $g \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$  on peut écrire :

$$\frac{dP(x, t | x_0, t)}{dt} = \frac{\partial^2 D(x) P(x, t | x_0, t)}{\partial^2 x} - \frac{\partial \mu F(x) P(x, t | x_0, t)}{\partial x} \quad (3.9)$$

l'équation de Fokker-Planck à une dimension qui à deux dimensions s'écrit lorsque le coefficient de diffusion  $D(x, y)$  se résume à un scalaire telle que :

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \Delta (D(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r}, t)) - \nabla (\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r}, t)) \quad (3.10)$$

plus connue sous le nom d'équation de diffusion de Smoluchowski lorsque celle-ci est utilisée pour déterminer la probabilité de présence de particules  $P(\mathbf{r}, t)$ . Cette équation n'est autre que la généralisation de l'équation de diffusion (1.104) pour laquelle on a ajouté le terme de dérive  $\nabla (\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r}, t))$ .

Dans le cas de la diffusion d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat vu dans la sous-section 2.4.2, bien que les agrégats atomiques ne sont pas ce que l'on pourrait appeler des particules colloïdales, celles-ci jouent un rôle analogue. Quant au substrat à l'instar des particules de fluide dans un colloïde, thermalise ces clusters, leur communiquant alors l'énergie thermique nécessaire à la réalisation de leurs mouvements de diffusion. Si on envisage alors que les agrégats atomiques sont sensibles à un champ de force, la dérive résultant de l'influence de ce dernier sur leurs trajectoires pourra être décrite correctement par l'équation (3.9).

## Équation maîtresse

Tout d'abord nous considérerons l'équation de Fokker-Planck la plus simple qui puisse exister l'équation de diffusion (1.104) à une dimension dans le cas où son coefficient de diffusion est constant et uniforme en tout point de l'espace.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2} \quad (3.11)$$

Afin d'intégrer numériquement l'équation (3.11) nous devons d'abord discrétiser l'espace-temps. On subdivise donc l'espace  $[0, L]$  en  $n_x + 1$  pas de largeur  $\delta x = \frac{L}{n_x + 1}$  et le temps  $\mathbb{R}^+$  en périodes dont la durée est  $\delta t$ .  $P(x, t)$  la probabilité de présence d'une particule à la position  $(x, t)$  est notée  $P_i^s$  telle que  $t = s \cdot \delta t$  et  $x = i \cdot \delta x$ . Dès lors (3.11) devient :

$$\frac{P_i^{s+1} - P_i^s}{\delta t} = D \cdot \frac{P_{i+1}^s - 2 \cdot P_i^s + P_{i-1}^s}{\delta x^2}, \quad \forall i \in \llbracket 0, n_x \rrbracket \quad (3.12)$$

3. Pour calculer dans (3.8)  $\langle g'(x)\eta(t) + g'(x)\mu F(x) + g''(x)D(x) \rangle$  on a choisi de calculer  $\langle g'(x)\eta(t) \rangle$  suivant la convention d'Itô telle que  $\langle g'(x)\eta(t) \rangle = \langle g'(x) \rangle \underbrace{\langle \eta(t) \rangle}_0 = 0$  et on a

intégré par partie une fois  $\langle g'(x)\mu F(x) \rangle$  et deux fois  $\langle g''(x)D(x) \rangle$

Le r.h.s<sup>4</sup> de l'équation (3.12) est obtenu en sommant le développement de Taylor à l'ordre deux de  $P(x + \delta x, t)$  et  $P(x - \delta x, t)$  : On note alors  $\alpha$  le coefficient de diffusion adimensionné tel que :

$$\alpha = \frac{D\delta t}{\delta x^2} \quad (3.13)$$

qui n'est autre que le taux de transition de l'équation maîtresse (3.14) décrite ci-dessous, régissant la marche aléatoire d'une particule diffusant suivant l'équation (3.11).

$$P_i^{s+1} = \alpha \cdot P_{i+1}^s + \alpha \cdot P_{i-1}^s + (1 - 2\alpha) \cdot P_i^s, \quad \forall i \in \llbracket 0, n_x \rrbracket \quad (3.14)$$

Cette équation maîtresse définit donc la probabilité de présence d'une particule libre à la coordonnée  $x$  et à l'instant  $t + \delta t$  en fonction de celles mesurées à l'instant  $t$  aux positions d'où cette particule était susceptible d'être présente à ce moment là, telles que les taux de transition pondèrent chacune de ces éventualités. La somme de ces taux devra être alors inférieure ou égale à un, ici  $2\alpha \leq 1$ . Ici dans le cas de la diffusion à une dimension d'une particule libre, à un instant  $t$ , 2 + 1 possibilités existent pour qu'une particule soit à la coordonnée  $x$  à l'instant d'après : la particule venait de la gauche  $P(x - \delta x, t)$ , la particule venait de la droite  $P(x + \delta x, t)$  ou cette dernière est restée sur place  $P(x, t)$ . Comme prévu la marche aléatoire n'étant pas biaisée, les probabilités  $P(x - \delta x, t)$  et  $P(x + \delta x, t)$  sont pondérées de la même façon, en l'occurrence par le taux de transition  $\alpha$ . A présent nous allons considérer l'équation de Fokker-Planck à deux dimensions (3.10) dans le cas général.

### ...dans le cas d'un réseau carré

Comme précédemment, on doit discrétiser l'espace-temps si l'on veut intégrer numériquement (3.10). On subdivise alors le domaine de simulation  $[0, L_x] \times [0, L_y]$  tel que  $L = L_x = L_y$  en cellules carrées<sup>5</sup> d'aire  $\delta l^2 = (\frac{L}{n_l+1})^2$  et le temps  $\mathbb{R}^+$  dans cette simulation en périodes dont la durée vaut  $\delta t$ .  $P(x, y, t)$  est notée  $P_{i,j}^s$  telle que  $t = s \cdot \delta t$ ,  $x = i \cdot \delta l$  et  $y = j \cdot \delta l$ . Dès

4. "right hand side" : membre de droite

5. Ces cellules carrées correspondent aux régions de Voronoï pour les nœuds d'un réseau carré. Les diagrammes de Voronoï doivent leur nom au mathématicien russe Gueorgui Voronoï. En 1908 il proposa [110] un pavage de  $\mathbb{R}^n$  ayant pour but de découper cet espace euclidien à  $n$  dimensions en sous-ensembles appelés cellules englobant chacune la position d'un "germe". Chaque cellule définit alors une région de l'espace pour laquelle il n'existe aucun point qui puisse être plus proche d'un autre germe que celui entouré par la cellule. Sur la (Fig.3.4) nous verrons que pour les nœuds d'un réseau hexagonal, les cellules de Voronoï prennent la forme d'hexagones réguliers.

lors (3.10) devient :

$$\begin{aligned}
\frac{P_{i,j}^{s+1} - P_{i,j}^s}{\delta t} &= \frac{D_{i+1,j}P_{i+1,j}^s - 2D_{i,j}P_{i,j}^s + D_{i-1,j}P_{i-1,j}^s}{\delta l^2} \\
&+ \frac{D_{i,j+1}P_{i,j+1}^s - 2D_{i,j}P_{i,j}^s + D_{i,j-1}P_{i,j-1}^s}{\delta l^2} \\
&- \frac{\mu(F_x)_{i+1,j}P_{i+1,j}^s - \mu(F_x)_{i-1,j}P_{i-1,j}^s}{2 \cdot \delta l} \\
&- \frac{\mu(F_y)_{i,j+1}P_{i,j+1}^s - \mu(F_y)_{i,j-1}P_{i,j-1}^s}{2 \cdot \delta l}, \\
\forall (i, j) &\in \llbracket 0, n_l \rrbracket^2,
\end{aligned} \tag{3.15}$$

A nouveau les deux premiers termes du r.h.s<sup>4</sup> de l'équation (3.15) sont obtenus par la somme des développements de Taylor à l'ordre deux de  $D(x + \delta l, y, t)P(x + \delta l, y, t)$ ,  $D(x - \delta l, y, t)P(x - \delta l, y, t)$ ,  $D(x, y + \delta l, t)P(x, y + \delta l, t)$  et  $D(x, y - \delta l, t)P(x, y - \delta l, t)$ , tandis que les deux derniers sont le résultat de la somme cette fois-ci des développements de Taylor à l'ordre deux de

$-\mu F_x(x + \delta l, y, t)P(x + \delta l, y, t)$ ,  $+\mu F_x(x - \delta l, y, t)P(x - \delta l, y, t)$ ,  $-\mu F_y(x, y + \delta l, t)P(x, y + \delta l, t)$  et  $+\mu F_y(x, y - \delta l, t)P(x, y - \delta l, t)$  multipliée par  $\frac{1}{2}$ . A l'instar de (3.13), à deux dimensions le coefficient de diffusion adimensionné s'écrit toujours :

$$\alpha(x, y) = \frac{D(x, y)\delta t}{\delta l^2}, \quad \forall (x, y) \in [0, L]^2 \tag{3.16}$$

De plus en la présence d'un champ de force, vient s'ajouter un coefficient de dérive lui aussi adimensionné définit tel que :

$$\beta(x, y) = \begin{pmatrix} \beta_x(x, y) = \frac{\mu F_x(x, y)\delta t}{\delta l} \\ \beta_y(x, y) = \frac{\mu F_y(x, y)\delta t}{\delta l} \end{pmatrix}, \quad \forall (x, y) \in [0, L]^2 \tag{3.17}$$

De ces deux coefficients adimensionnés (3.16) et (3.17),  $\forall (x, y) \in [0, L]^2$  on construit les combinaisons linéaires suivantes :

$$w_{left}(x, y) = \alpha(x, y) - \frac{1}{2}\beta_x(x, y) \tag{3.18}$$

$$w_{right}(x, y) = \alpha(x, y) + \frac{1}{2}\beta_x(x, y) \tag{3.19}$$

$$w_{up}(x, y) = \alpha(x, y) + \frac{1}{2}\beta_y(x, y) \tag{3.20}$$

$$w_{down}(x, y) = \alpha(x, y) - \frac{1}{2}\beta_y(x, y) \tag{3.21}$$

telles que :

$$w_{sum}(x, y) = w_{left}(x, y) + w_{right}(x, y) + w_{up}(x, y) + w_{down}(x, y) = 4\alpha(x, y) \tag{3.22}$$

qui ne sont autres que les taux de transition de l'équation maîtresse (3.23) décrite ci-dessous régissant la marche aléatoire d'une particule diffusant suivant l'équation (3.10) à la surface d'un réseau carré.

$$\begin{aligned} \forall (i, j, s) \in \llbracket 0, n_l \rrbracket^2 \times \mathbb{N}, P_{i,j}^{s+1} = & \left( (w_{left})_{i+1,j} \right) \cdot P_{i+1,j}^s + \left( (w_{right})_{i-1,j} \right) \cdot P_{i-1,j}^s \\ & + \left( (w_{up})_{i,j-1} \right) \cdot P_{i,j-1}^s + \left( (w_{down})_{i,j+1} \right) \cdot P_{i,j+1}^s \\ & + \left( 1 - (w_{sum})_{i,j} \right) \cdot P_{i,j}^s \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ici dans le cas du mouvement suivant l'équation (3.15), d'une particule libre à la surface d'un réseau carré se trouvant à la position  $(x, y)$ , à un instant  $t$ , il existait 1 + 4 possibilités pour qu'une particule se retrouve aux coordonnées  $(x, y)$  à l'instant d'après. En effet celle-ci a pu rester sur place  $P(x, t)$  ou bien provenir de la gauche  $P(x - \delta l, y, t)$  ou de la droite  $P(x + \delta l, y, t)$  ainsi que d'en bas  $P(x, y - \delta l, t)$  ou d'en haut  $P(x, y + \delta l, t)$ . Ces cinq possibilités sont biens celles que l'on retrouve dans l'équation maîtresse (3.23).

### ...dans le cas d'un réseau hexagonal

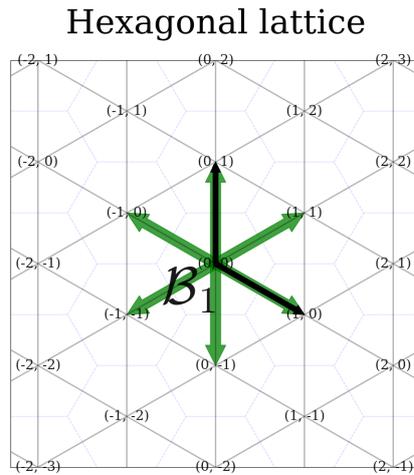


Figure 3.4 – Illustration d'un domaine de simulation sous tendu par un réseau hexagonal dont les coordonnées de chacun des nœuds sont définies par les combinaisons linéaires des vecteurs en noir constituant la base normée non orthogonale  $\mathcal{B}_1$ . Les vecteurs verts représentent l'ensemble des six directions pour lesquelles une particule libre est autorisée à effectuer un mouvement à la surface de ce domaine de simulation. Dans le fond est représenté un réseau en nid d'abeille qui correspond aux cellules de Voronoï<sup>5</sup> de chacun des nœuds du réseau hexagonal.

Afin d'intégrer numériquement l'équation (3.10) à la surface d'un réseau hexagonal, nous aurons besoin de définir une nouvelle base normée non orthogonale  $\mathcal{B}_1$ . En effet lors de l'inté-

gration de cette équation, cette base sera mieux adaptée. Dans celle-ci les coordonnées contravariantes d'un point seront reliées par  $\mathbf{A}$ , la matrice de passage (3.24) décrite ci-dessous, aux coordonnées covariantes exprimées dans la base orthonormale  $\mathbf{B}_0$  précédemment utilisée pour décomposer les déplacements d'une particule libre sur un réseau carré. La base  $\mathbf{B}_1$  est représentée par les vecteurs noirs sur la (Fig.3.4).

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

On subdivisera alors le domaine de simulation  $[0, L]^2$  en  $(n_l + 1)^2$  petit losange d'aire  $\delta l^2 = (\frac{L}{n_l+1})^2$  et le temps  $\mathbb{R}^+$  dans cette simulation en période dont la durée vaut  $\delta t$ .  $P(x_1, y_1, t)$  est notée  $P_{i,j}^s$  telle que  $t = s \cdot \delta t$ ,  $x_1 = i \cdot \delta l$  et  $y_1 = j \cdot \delta l$ . Dès lors (3.10) s'écrit à nouveau comme l'équation (3.15).

L'équation maîtresse régissant le mouvement suivant l'équation (3.15) d'une particule libre à la surface d'un réseau hexagonal, devra prévoir en plus de l'éventualité pour cette particule de rester sur place, les six déplacements qu'elle pourrait opérer, représentés sur la (Fig.3.4) par les six flèches vertes. Ce qui implique que cette équation sera de la forme :

$$\begin{aligned} \forall (i, j, s) \in \llbracket 0, n_l \rrbracket^2 \times \mathbb{N}, \quad P_{i,j}^{s+1} = & \left( (w_{210^\circ})_{i+1,j+1} \right) \cdot P_{i+1,j+1}^s + \left( (w_{270^\circ})_{i,j+1} \right) \cdot P_{i,j+1}^s \\ & + \left( (w_{330^\circ})_{i-1,j} \right) \cdot P_{i-1,j}^s + \left( (w_{30^\circ})_{i-1,j-1} \right) \cdot P_{i-1,j-1}^s \\ & + \left( (w_{90^\circ})_{i,j-1} \right) \cdot P_{i,j-1}^s + \left( (w_{150^\circ})_{i+1,j} \right) \cdot P_{i+1,j}^s \\ & + \left( 1 - (w_{sum})_{i,j} \right) \cdot P_{i,j}^s \end{aligned} \quad (3.25)$$

Or  $\forall f \in C^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$  une fonction, le développement de Taylor à l'ordre deux autour de la position  $(x, y)$  de la somme :

$$\sum_{\theta \in Hexa} f(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l, t) = 6f(x, y, t) + \frac{3}{2}(\Delta f(x, y, t) \cdot \delta l^2) \quad (3.26)$$

tandis que celui de la somme :

$$\sum_{\theta \in Hexa} (\cos(\theta) + \sin(\theta)) f(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l, t) = 3(\nabla f(x, y, t) \cdot \delta l) \quad (3.27)$$

tels que  $Hexa = \{\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{2}, \frac{5\pi}{6}, \frac{-5\pi}{6}, \frac{-\pi}{2}, \frac{-\pi}{6}\}$  correspond aux angles  $\theta$  qui dans un nouveau repère  $\mathcal{R}_{(x,y)}$  dont l'origine est repéré elle dans le repère ordinaire  $\mathcal{R}$  par la position  $(x, y)$ , définissent avec  $\delta l$  les coordonnées polaires des six positions illustrées sur la (Fig.3.4) entourant la position  $(x, y)$ .

Ainsi connaissant la forme de l'équation maîtresse (3.25) et en utilisant le résultat de (3.26) et (3.27) respectivement pour  $D(x, y)P(x, y, t)$  et  $\mu \mathbf{F}(x, y)P(x, y, t)$ ,  $\forall (x, y) \in [0, L]^2$

on pourra identifier les six taux de transition dont les expressions sont :

$$w_{30^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( + \frac{\sqrt{3}}{2} \beta_x(x, y) + \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.28)$$

$$w_{90^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \quad (3.29)$$

$$w_{150^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( - \frac{\sqrt{3}}{2} \beta_x(x, y) + \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.30)$$

$$w_{210^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( - \frac{\sqrt{3}}{2} \beta_x(x, y) - \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.31)$$

$$w_{270^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) - \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \quad (3.32)$$

$$w_{330^\circ}(x, y) = \frac{2}{3} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( + \frac{\sqrt{3}}{2} \beta_x(x, y) - \frac{1}{2} \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.33)$$

telles que :

$$w_{sum}(x, y) = w_{30^\circ}(x, y) + w_{90^\circ}(x, y) + w_{150^\circ}(x, y) + w_{210^\circ}(x, y) + w_{270^\circ}(x, y) + w_{330^\circ}(x, y) = 4\alpha(x, y) \quad (3.34)$$

### ...dans le cas hors réseau

On ne subdivisera pas le domaine de simulation  $[0, L]^2$ . Cependant pour intégrer numériquement l'équation (3.10), il faudra tout de même définir un pas d'espace  $\delta l$  et de temps  $\delta t$ . A présent nous allons réaliser un raisonnement assez analogue à celui qui a été fait dans le cas de l'intégration numérique à la surface d'un réseau hexagonal. Pour être plus juste, ce serait plutôt le raisonnement précédent qui était basé sur celui plus général que nous allons présenter ici. En effet à l'instar de l'équation (3.25) en l'absence de réseau  $\forall (x, y, t) \in [0, L]^2 \times \mathbb{R}^+$  l'équation maîtresse prendra la forme suivante :

$$P(x, y, t + \delta t) = \int_0^{2\pi} d\theta w_{\theta+\pi} \left( x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l \right) \cdot P \left( x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l, t \right) + \left( 1 - \int_0^{2\pi} d\theta w_\theta(x, y) \right) \cdot P(x, y, t) \quad (3.35)$$

Et les développements de Taylor (3.26) et (3.27) s'écrivent à présent tels que :

$$\int_0^{2\pi} d\theta f(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l, t) = 2\pi f(x, y, t) + \frac{\pi}{2} \left( \Delta f(x, y, t) \cdot \delta l^2 \right) \quad (3.36)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta (\cos(\theta) + \sin(\theta)) f(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l, t) = \pi \left( \nabla f(x, y, t) \cdot \delta l \right) \quad (3.37)$$

Ainsi connaissant la forme de l'équation maîtresse (3.35) et en utilisant le résultat de (3.36) et (3.37) respectivement pour  $D(x, y)P(x, y, t)$  et  $\mu \mathbf{F}(x, y)P(x, y, t)$ ,  $\forall (x, y) \in [0, L]^2$  le taux de transition  $w_\theta(x, y)$ ,  $\forall \theta \in [0, 2\pi]$  aura pour expression :

$$w_\theta(x, y) = \frac{2}{\pi} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( \cos(\theta) \beta_x(x, y) + \sin(\theta) \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.38)$$

vérifiant bien que :

$$w_{sum}(x, y) = \int_0^{2\pi} d\theta w_\theta(x, y) = 4\alpha(x, y) \quad (3.39)$$

### Contrainte sur le pas de temps et d'espace lors de l'intégration

Quel que soit la nature du réseau ou non sur lequel on intégrerait numériquement l'équation (3.10), les taux de transition seraient toujours de la forme :

$$w_\theta(x, y) = C \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( \cos(\theta) \beta_x(x, y) + \sin(\theta) \beta_y(x, y) \right) \right) \quad (3.40)$$

Dès lors si l'on désire que  $\forall \theta \in [0, 2\pi]$  le taux transition reste positif sans quoi l'équation maîtresse dont il fait partie n'aurait plus aucun sens, il nous faut respecter la contrainte suivante :

$$\alpha(x, y) \geq \frac{1}{2} \sqrt{\beta_x^2(x, y) + \beta_y^2(x, y)} \iff \delta l \leq \frac{2D}{\mu \sqrt{F_x^2(x, y) + F_y^2(x, y)}} \quad (3.41)$$

Dans le cas où le champ de force  $\mathbf{F}(x, y)$  à l'origine du terme de dérive dans l'équation (3.10) n'est pas uniforme, on s'assure que le pas d'espace  $\delta l$  vérifie la contrainte supplémentaire suivante :

$$\exists \epsilon, \frac{\mathbf{F}(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l) - \mathbf{F}(x, y)}{\delta l} \leq \nabla(\mathbf{F}(x, y) \cdot \mathbf{u}_{\delta l}) \cdot (1 + \epsilon) \quad (3.42)$$

telle que  $\mathbf{u}_{\delta l} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta) \end{pmatrix}$  est le vecteur unitaire dirigé et orienté par l'angle  $\theta$  du saut. Ainsi en choisissant un  $\epsilon$  suffisamment petit, on s'assurera du fait que lors du déplacement d'une particule libre d'une position  $(x, y)$  à la surface du domaine de simulation, la variation du champ de force soit suffisamment faible pour ne pas occulter son effet localement en réalisant un pas trop large. Pour les mêmes raisons, si le coefficient de diffusion  $D(x, y)$  n'est pas uniforme à la surface du domaine de simulation, on vérifiera pour le pas d'espace  $\delta l$  que :

$$\exists \epsilon, \frac{D(x + \cos(\theta)\delta l, y + \sin(\theta)\delta l) - D(x, y)}{\delta l} \leq \nabla(D(x, y) \cdot \mathbf{u}_{\delta l}) \cdot (1 + \epsilon) \quad (3.43)$$

A présent si l'on désire maximiser le pas de temps  $\delta t$  connaissant le pas d'espace  $\delta l$ , il faudra minimiser le terme  $(1 - w_{sum}(x, y)) \cdot P(x, y, t)$  dans l'équation maîtresse, autrement dit choisir un pas de temps  $\delta t$  suffisamment grand pour que l'on ne puisse jamais observer la particule libre immobile durant sa marche aléatoire :

$$1 - w_{sum}(x, y) = 0 \iff 1 - 4\alpha(x, y) = 0 \iff \delta t = \frac{1}{4} \cdot \frac{\delta l^2}{D} \quad (3.44)$$

### 3.1.3 . Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions en présence d'un champ de force

#### Algorithme DLA hors d'un réseau et construit à partir de l'équation maîtresse (3.35)

Plusieurs groupes de recherche auront proposé des algorithmes basés sur le modèle DLA dont l'objectif était de biaiser la marche aléatoire des particules libres à priori isotrope et ainsi inclure une dérive dans leurs mouvements de diffusion. Dans [68] P. Meakin simule sur un réseau carré la croissance d'une arborescence dont les particules avant de s'y fixer auront effectué une marche aléatoire biaisée par une dérive. Dans son algorithme ce biais se matérialise au moment de choisir la direction de saut de la particule libre par le fait de tirer uniformément un nombre aléatoire  $X$  dans  $[0, 1]$  telle que si  $X < p$  la particule se déplacera suivant la direction définie par la dérive, sinon on choisit uniformément une des quatre directions cardinales comme cela aurait été fait dans [115] le modèle DLA classique. Ainsi  $p$  définit la probabilité pour une particule libre de dériver ou non durant sa marche aléatoire telle que si  $p = 0$  on retrouve le modèle DLA classique et si  $p = 1$  une accrétion balistique comme décrit dans [72].

Dans un style différent, mais toujours à la surface d'un domaine de simulation subdivisé en  $n^2$  mailles carrées, R. Jullien *et al.* proposent dans [49] une autre méthode pour choisir la direction suivant laquelle une particule libre effectuera un saut  $\forall (i, j, s) \in \llbracket 0, n \rrbracket^2 \times \mathbb{N}$  la position où elle se trouve à l'instant  $t$ , celle-ci basée sur l'équation maîtresse suivante :

$$P_{i,j}^{s+1} = qP_{i+1,j}^s + qP_{i-1,j}^s + (1 - (p + 2q))P_{i,j-1}^s + pP_{i,j+1}^s \quad | \quad (p, q) \in \left[0, \frac{1}{2}\right]^2 \quad (3.45)$$

Dès lors si les taux de transition vérifient la relation  $p = q = \frac{1}{4}$ , les marches aléatoires des particules libres seront assimilées à des diffusions isotropes à l'instar de ce que faisait l'algorithme DLA classique dans [115]. En revanche si  $p \neq q$  tel que  $p + 2q \leq 1$  soit vérifiée : dans le cas où  $p + q = \frac{1}{2}$  alors la diffusion des particules libres sera anisotrope, tandis que si  $p + q \neq \frac{1}{2}$  les marches aléatoires des particules libres seront biaisées par une dérive comme précédemment dans [68].

Cet algorithme cependant présente un défaut lié à sa simplicité, il ne peut concevoir le biais que pourrait avoir un champ de force non-uniforme sur le mouvement qu'adopterait une particule libre. Dans [12], toujours à la surface d'un réseau carré, F. Carlier *et al.* membres appartenant à notre groupe de recherche ont développé un algorithme dans lequel l'équation maîtresse avait été obtenue à partir de l'intégration de l'équation de Smoluchowski (3.10) et qui donc permet d'envisager ce cas. Dans leur travail ils cherchent à donner une explication aux différences morphologiques observées entre des structures dendritiques composées d'agrégats atomiques d'argent et d'autres de clusters d'antimoine. Pour cela ils présument que celles-ci seraient dues à l'importance des déformations locales causées par les agrégats atomiques eux-mêmes à la surface du substrat selon la loi de Hooke [58]. Ces déformations produiraient alors pour chacun de ces clusters, un champ de force  $\mathbf{f}_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}$  dont la somme  $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_i \mathbf{f}_i(\mathbf{r})$  serait à l'origine du terme de dérive  $\nabla(\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r}, t))$  dans (3.10). Cependant il est à noter que, la méthode d'intégration numérique à la surface d'un réseau carré de l'équation (3.10) développée dans la sous-section 3.1.2 n'est pas celle qui avait été choisie par F. Carlier *et*

al. dans [12]. En effet nous avons fait le choix de faire la distinction entre le couple des pas d'espace-temps  $(\delta l, \delta t)$  et celui du libre parcours moyen d'une particule libre et sa fréquence de saut moyenne  $(a, \tau)$  grâce auquel on peut définir entre autre le coefficient de diffusion selon (2.3). Ce n'est pas le cas dans [12]. Ce choix aura été motivé par le fait que sans cette distinction, lors du calcul des taux de transition définis suivant la formule (A.10) dans [12], pour que ces derniers restent positif (sans quoi l'équation maîtresse n'aurait plus de sens), l'intensité du champ de force devra être limitée par le couple  $(a, \tau)$  dont on ne peut pas modifier les valeurs à la différence de  $(\delta l, \delta t)$ .

Dès lors si on devait définir l'avantage qu'ont les algorithmes utilisés dans [49, 12] par rapport à celui qui a été choisi dans [68]; il faudrait insister sur le fait que dans [49, 12] les déplacements des particules libres sont régis par des équations maîtresses pouvant être bâties à partir d'une équation de Smoluchowski (3.10). Or cette équation décrit la physique d'une expérience réelle dont on suppose les particules libres être influencées, biaisées, lors de leurs mouvements de diffusion. Bien que plus facile à mettre en œuvre que les deux autres, l'algorithme présenté dans [68] et plus particulièrement sa probabilité de dérive  $p$  reste cependant difficile à relier à l'intensité d'un phénomène physique. Quoiqu'il en soit l'ensemble de ces algorithmes [68, 49, 12] nécessitent un réseau pour être mis en œuvre. **Ainsi dans ce travail nous proposons alors un algorithme s'appuyant sur l'équation maîtresse (3.35), en mesure de décrire une simulation hors réseau de type DLA en présence d'un champ de force.** En fonction de la nature du champ de force et de la précision que l'on cherche à atteindre, on choisira parmi l'une des deux méthodes ci-dessous :

Dans le cas où les particules libres subissent un champ de force indépendant de la structure dendritique et qui plus est dont on connaît la forme analytique, nous calculerons simplement, à la position  $(x, y)$  d'une particule libre la force qui lui ait donné de ressentir.

Maintenant si ce champ de force est induit par la structure dendritique elle même, il est recommandé de discrétiser son effet à la surface du domaine de simulation si l'on espère conserver quelque peu la rapidité de l'algorithme. En effet en choisissant la méthode "force brute" décrite au-dessus, il faudra calculer à chacune des positions  $(x, y)$  qu'une particule libre sera amené à visiter, l'ensemble des forces qui lui ont été donnée à ressentir par toutes les particules fixes constituant l'arborescence à cette étape de sa croissance. On préférera donc, quitte à perdre un peu en précision, enregistrer un bonne fois pour toutes les valeurs de l'ensemble de ces forces aux différentes position d'une grille  $\mathbf{F}$ . Cette grille pourra être mise à jour à l'instar de la grille  $\Psi$  présentée plus tôt dans la sous-section 3.1.1 par un masque nommé  $\mathbf{f}$  jouant le même rôle que le masque  $\Theta$  pour  $\Psi$  à la différence près que cette fois-ci il viendra simplement s'additionner à la grille  $\mathbf{F}$ . Ainsi la grille  $\mathbf{F}$  et le masque  $\mathbf{f}$  sont définis tels que :

- **Grille  $\mathbf{F} = (\mathbf{F}_x, \mathbf{F}_y)$**  : est un  $2 \times (2n + 1) \times (2n + 1)$  double réseau carré recouvrant le domaine de simulation dont les cellules renferment à leurs positions pour chacune d'entre elles la valeur de force  $\mathbf{F}_{i,j}$  induite par l'ensemble des particules fixes composant l'arborescence à une certaine étape de sa croissance.
- **Masque  $\mathbf{f} = (\mathbf{f}_x, \mathbf{f}_y)$**  : est un  $2 \times (4n + 1) \times (4n + 1)$  double réseau carré

dans lequel on retrouve dans chacune de ces cellules la force qui serait induite par une particule fixe si celle-ci se situait au centre de ce réseau. Nous avons choisi  $(4n + 1) \times (4n + 1)$  afin de s'assurer qu'à l'ensemble des cellules  $\mathbf{F}$  soit ajouté l'effet du champ de force généré par la nouvelle particule fixe située au centre du masque  $\mathbf{f}$ .

Ainsi dans les cas auxquels nous aurons à faire face, nous devons trouver le meilleur compromis entre la rapidité d'exécution et la précision de l'algorithme.

Dans notre algorithme en mesure de décrire une simulation hors réseau de type DLA en présence d'un champ de force, il nous faudra définir un nouveau masque  $\Theta_{\delta l}^*$  défini tel que :

**Masque  $\Theta_{\delta l}^*$**  : est un  $(4n + 1) \times (4n + 1)$  réseau carré pour lequel chacune de ces cellules contient la valeur du plus grand pas d'espace  $\delta l$  réalisé depuis la position  $(x, y)$  au-delà duquel les contraintes (3.41) et (3.42) ne seraient plus respectées, si la case centrale de ce masque contenait une nouvelle particule fixe.

De plus les valeurs contenues dans les cellules de la grille  $\Psi_{\delta l}$  devront satisfaire la contrainte (3.43) si le coefficient de diffusion  $D(x, y)$  s'avérait ne pas être uniforme à la surface du domaine de simulation. Enfin certaines étapes décrites dans la sous-section 3.1.1 seront quelques peu modifiées telles que :

- ★ **Lors de l'étape 2**, la probabilité pour une particule libre de sauter suivant un sens et une direction  $\theta$  depuis sa position  $(x, y)$  ne se résume plus à  $p_{iso} = \frac{1}{2\pi}$ , mais devient (3.38) le taux de transition calculé précédemment dans la sous-section 3.1.2 dans le cas hors réseau :

$$w_{\theta}(x, y) = \frac{2}{\pi} \left( \alpha(x, y) + \frac{1}{2} \left( \cos(\theta) \beta_x(x, y) + \sin(\theta) \beta_y(x, y) \right) \right)$$

Il faudra cependant définir les valeurs du couple de pas d'espace-temps  $(\delta l, \delta t)$ , au moyen duquel les paramètres  $\alpha(x, y)$  et  $\beta(x, y)$  sont adimensionnés. Ainsi le pas d'espace  $\delta l$  maximal est obtenu grâce à la grille  $\Psi_{\delta l}$ , tandis que d'après (3.44) la valeur maximale du pas de temps  $\delta t$  vaut :

$$\delta t = \frac{1}{4} \cdot \frac{\delta l^2}{D}$$

- ★ **Lors de l'étape 4**,
  - on ajoute  $\mathbf{f}$  à  $\mathbf{F}$
  - on met à jour  $\Psi_{\delta l}$ , cette fois-ci pas seulement avec le masque  $\Theta_{\delta l}$  mais aussi avec  $\Theta_{\delta l}^*$ .

T. R. Ní Mhíocháin *et al.* dans [80, 79] auront proposé un modèle DLA en présence d'un champ magnétique à la surface d'un réseau carré; afin de produire une simulation de leurs électro-dépôts de cristallites de zinc. Notre algorithme, en fixant la valeur du pas d'espace  $\delta l$  avec celle du libre parcours moyen des cristallites de zinc et en évaluant l'angle  $\theta_{vel}$  décrit sur la (Fig.7 de [80]) correctement, serait à même de réaliser ces simulations et cela tout en restant libre de l'influence d'un quelconque réseau.

En conclusion modifier l'équation maîtresse de l'algorithme de type DLA optimisé par K.R. Kuijpers *et al.* dans [55] par l'équation (3.35), nous permet de modéliser l'auto-organisation en arborescences de particules libres ayant subi des champs de force non-uniformes durant leurs diffusions et cela sans que la morphologie de ces structures dendritiques ait pu être influencée par un réseau quelconque. A cela on peut ajouter que dans notre algorithme, en ne confondant pas le libre parcours moyen d'une particule libre et sa fréquence de saut moyenne avec respectivement le pas d'espace et le pas de temps utilisé pour l'intégration numérique de l'équation de diffusion de Smoluchowski (3.10), la contrainte<sup>6</sup> sur la valeur de l'intensité du champ de force  $F$  dans l'expression du taux de transition défini suivant (A.10) dans [12], n'existe plus.

### Exemples de structures dendritiques simulées hors d'un réseau en présence d'un champ de force : mesures de leurs dimensions de Bouligand-Minkowski

Au moyen de cet algorithme hors-réseau construit à partir de l'équation maîtresse (3.35), on aura simulé des milliers d'arborescences fruit de l'auto-organisation de particules initialement libres de diffuser sous l'influence ou non de champs de force. Les (Fig.3.7), (Fig.3.8) et (Fig.3.6) illustrent ces résultats pour différents types de champs de force présents à la surface du domaine de simulation.

A l'instar du travail réalisé dans [12], on a aussi mesuré la dimension de Bouligand-Minkowski de ces structures dendritiques au moyen de la méthode des boîtes décrites dans la sous-section 1.3.1. Sur la (Fig.3.5) on trace l'évolution de cette dimension en fonction de l'intensité du champ de force radial uniforme ressenti par les particules libres durant les simulations. La mesure de la dimension de Bouligand-Minkowski pour des arborescences n'ayant subi l'influence d'aucun champ de force durant leurs simulations est  $D_B = 1.66$ . Celle-ci est en accord avec celle obtenue pour la première fois en 1983 par T.A. Witten et L.M. Sander, répertorié dans le (Tab.1 de [116]). Puis à mesure que d'une série de simulations à une autre, on augmente l'intensité du champ de force radial uniforme ; la dimension de Bouligand-Minkowski mesurée pour ces structures dendritiques tendra vers 2,  $D_B \xrightarrow{\|F\| \rightarrow +\infty} 2$ , comme on peut le constater sur la (Fig.3.5 à droite). Ceci exprime la tendance des arborescences à adopter la morphologie très compacte en forme de disque ou presque, illustrée en bas de la (Fig.3.7) dans le cas où  $\mathbf{F} = -10.0 \cdot \mathbf{u}_r$  en tous points du domaine de simulation. Une morphologie que l'on trouvait déjà pour les structures dendritiques obtenues dans [69] par le modèle d'accrétion balistique de Vold-Sutherland [109, 104], dans lequel avant de rencontrer et se fixer à l'arborescence, les particules libres suivront des trajectoires balistiques en ligne droite. Or dans le modèle DLA en présence d'un champ de force, si l'intensité de celui-ci est suffisamment grande pour que le coefficient de dérive (3.17) finisse par largement dominer le coefficient de diffusion (3.16), les mouvements des particules libres seront quasiment balistiques en l'occurrence les particules suivront la direction inverse de celle du gradient de potentiel.

Il est à noter que dans ce même (Tab.1 de [116]) et le reste de la littérature, on retrouve aussi  $D_g \simeq 1.70$  comme étant la mesure de la dimension fractale des structures dendritiques

---

6. Une contrainte permettant de conserver la valeur de ce taux toujours positive.

obtenues par la DLA en l'absence de champ de force. Cette mesure de la dimension fractale correspond à celle réalisée par le biais du rayon de giration  $R_g$  de ces arborescences d'après l'équation (3.2). Cette méthode de mesure nécessite que la forme globale de l'objet à mesurer soit relativement circulaire, ce qui est le cas pour des structures dendritiques ayant été simulées sans la présence d'un champ de force. Or dans le cas où les particules subissent l'influence d'un champ de force uniforme suivant une direction, ces dernières s'organisent à l'image de l'arborescence représentée au milieu de la (Fig.3.7), il est donc préférable d'utiliser la dimension de Bouligand-Minkowski.

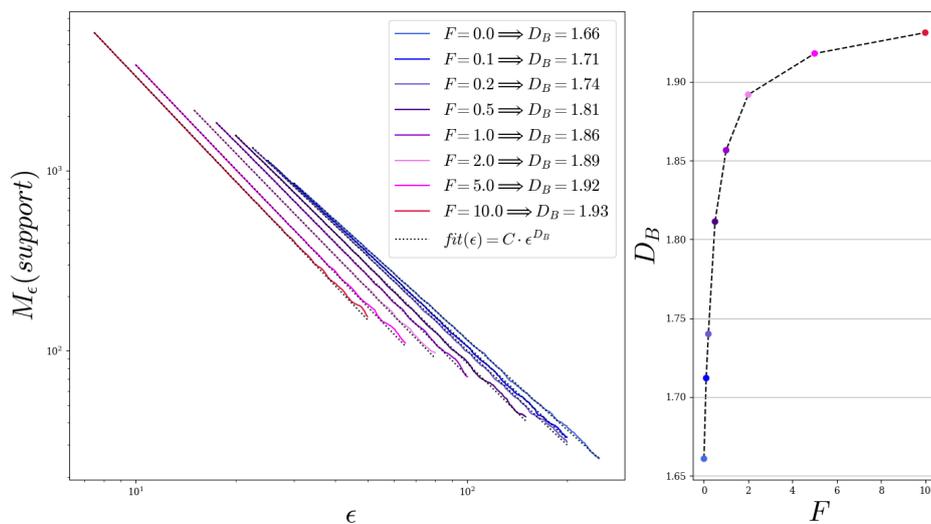


Figure 3.5 – Évolution de la dimension de Bouligand-Minkowski mesurée au moyen de la méthode des boîtes, de structures dendritiques simulées hors d'un réseau et en présence ou non d'un champ de force radial uniforme d'intensité  $F \in [0, 10]$ . Lorsque cette intensité  $F$  augmente, la dimension de Bouligand-Minkowski des structures dendritiques  $D_B \xrightarrow{\|F\| \rightarrow +\infty} 2$ , définissant ainsi la tendance pour ces arborescences à adopter des morphologies de plus en plus compactes en forme de disque.

### 3.2 . Chronologies de processus irréversibles

#### 3.2.1 . Fractales Laplaciennes

#### **Alternative à l'algorithme classique développé dans la section 3.1, permettant la construction de structures dendritiques de type DLA**

Précédemment dans la sous-section 3.1.2, nous avons vu qu'au sein d'une simulation de type DLA en présence d'un champ de force, la dynamique d'une particule libre pouvait être décrite par l'équation de Fokker-Planck (3.10). Or durant la croissance d'une structure dendritique, la diffusion d'une nouvelle particule libre est conditionnée par l'accrétion de la précédente. Ce

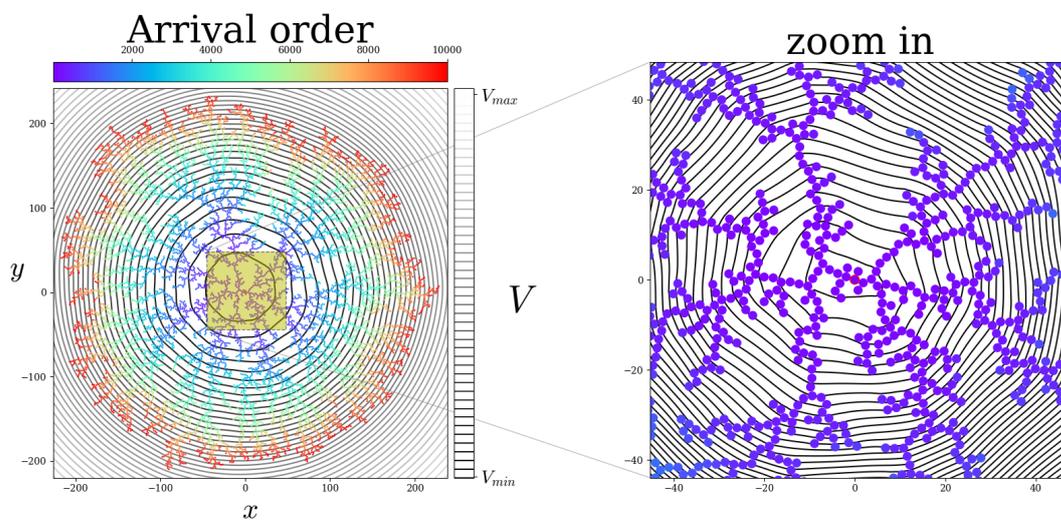


Figure 3.6 – Structures dendritiques composées de 10000 particules construites hors-réseau sous l'influence des champs de force dérivant d'un potentiel de la forme  $0.25 \cdot v(r) = \log(r)$  généré par chacune des particules dès lors qu'elle se fixe. L'échelle des couleurs représente l'ordre avec lequel chacune de ces sphères dures seront venues se fixer les unes aux autres durant de la simulation, tandis que l'on trace les isopotentiels de la somme des potentiels  $V = \sum_{i=1}^N v_i$  suivant un échelle de nuance de gris. A titre indicatif la sphère dure dont le contour aura été coloré en rouge correspond à la graine, particule initialement déposée au centre du domaine de simulation.

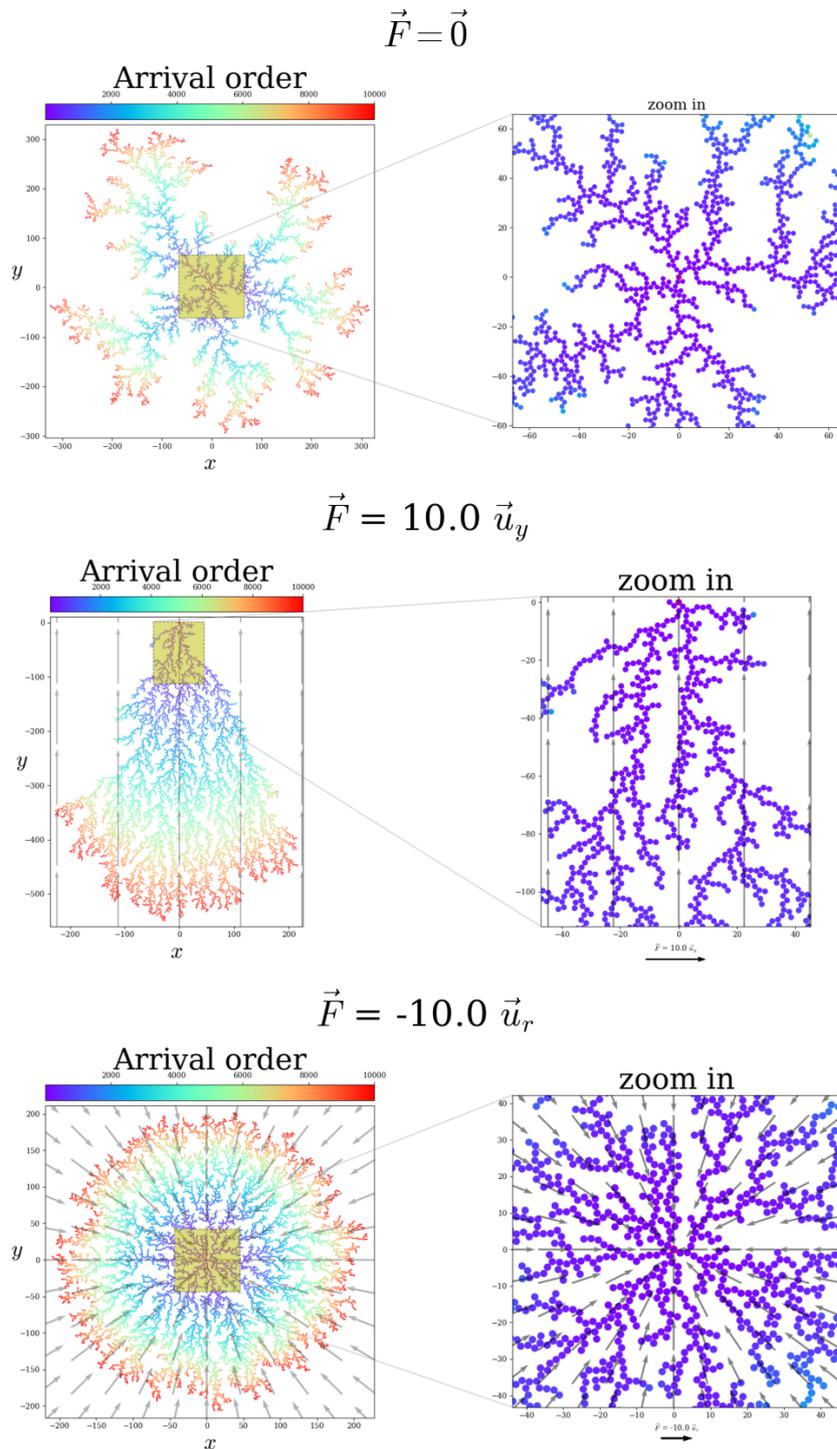


Figure 3.7 – Structures dendritiques composées de 10000 particules construites hors-réseau en l'absence de champ de force (en haut) et sous l'influence respectivement d'un champ de force uniforme  $F = +10.0 \cdot \vec{u}_y$  (au milieu) et d'un champ de force radial uniforme  $F = -10.0 \cdot \vec{u}_r$  (en bas). L'échelle des couleurs représente l'ordre avec lequel chacune de ces sphères dures seront venues se fixer les unes aux autres durant de la simulation. A titre indicatif la sphère dure dont le contour aura été coloré en rouge correspond à la graine, particule initialement déposée au centre du domaine de simulation.

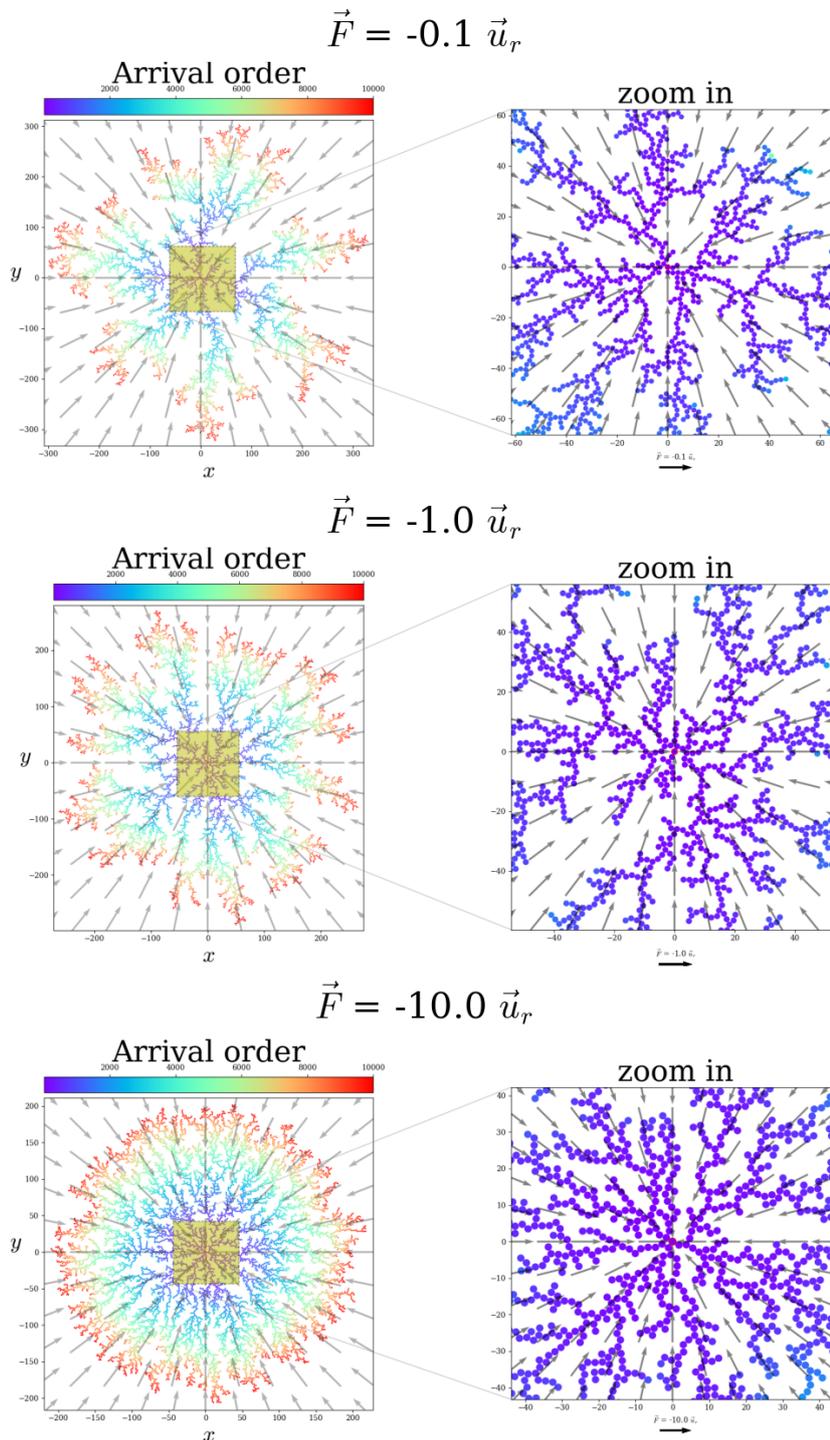


Figure 3.8 – Structures dendritiques composées de 10000 particules construites hors-réseau sous l'influence d'un champ de force radial uniforme dont l'intensité vaut respectivement  $F = 0.1 \cdot \mathbf{u}_r$  (en haut),  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_r$  (au milieu) et  $F = 10.0 \cdot \mathbf{u}_r$  (en bas). L'échelle des couleurs représente l'ordre avec lequel chacune de ces sphères dures seront venues se fixer les unes aux autres durant de la simulation. A titre indicatif la sphère dure dont le contour aura été coloré en rouge correspond à la graine, particule initialement déposée au centre du domaine de simulation.

qui a pour conséquence à tout instant de cette simulation, d'artificiallement<sup>7</sup> fixer à un le nombre de particule libre diffusant à la surface de son domaine. Dès lors si le coefficient de diffusion  $D$  ainsi que le champ de force  $\mathbf{F}$  sont tous deux indépendants du temps, compte tenu de la remarque précédente, la densité de probabilité de présence  $P(\mathbf{r})$  des particules libres supposées diffuser au voisinage d'une arborescence suivant l'équation (3.10) pourra être définie par l'équation stationnaire<sup>8</sup> suivante :

$$\Delta(D(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r})) - \nabla(\mu \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r})) = 0 \quad (3.46)$$

A laquelle il faudra ajouter les conditions aux limites de Dirichlet suivantes :

**Condition aux limites à l'infini :** Les particules libres dans le modèle DLA sont supposées diffuser depuis une origine située à l'infini par rapport à la position de la graine. Or dans la description détaillée que l'on a fait de l'algorithme DLA hors d'un réseau (voir sous-section 3.1.1), pour des raisons évidentes de temps de simulation, on choisit une distance  $R_{drop}$  qui n'est pas infinie mais qui reste suffisamment grande devant  $R_{max}$  le rayon maximal de la structure dendritique mesuré à partir de sa graine. A cette distance de l'arborescence on peut raisonnablement considérer la densité de probabilité de présence d'une particule libre comme étant homogène et égale à une valeur donnée  $P_0$ .

$$\forall A \in [0, 2\pi[, P(R_{drop}, A) = P_0 \quad (3.47)$$

avec  $\{\mathbf{r} \in \mathbb{R}^2 \mid \forall A \in [0, 2\pi[, \mathbf{r} = (R_{drop}, A)\}$  l'ensemble des points définis par leurs coordonnées polaires dans un repère ayant pour origine la position de la graine, formant un cercle de rayon  $R_{drop}$ .

**Condition aux limites défini par le tracé de la structure dendritique :** Dans le modèle DLA, lorsqu'une particule libre rencontre une particule fixée au reste de la structure dendritique, elle se fixe à son tour. Dès lors le tracé de cette arborescence définit une condition aux limites absorbante telle que :

$$\forall \mathbf{r} \in \mathbf{S}, P(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.48)$$

avec  $\mathbf{S} \subset \mathbb{R}^2$  l'ensemble des points appartenant au tracé de la structure dendritique.

Afin de connaître la densité de probabilité de présence  $P(\mathbf{r})$  en tout point de l'espace, on pourra utiliser la méthode de Jacobi. Pour cela on choisit<sup>9</sup> de subdiviser le domaine de simulation  $[0, L]^2$  en  $(n_l + 1)^2$  petits losanges d'aire  $\delta l^2 = (\frac{L}{n_l + 1})^2$  tel que  $P(x_1, y_1)$  sera notée  $P_{i,j}$  avec  $x_1 = i \cdot \delta l$  et  $y_1 = j \cdot \delta l$ , coordonnées définies dans la base  $\mathcal{B}_1$  décrite dans la sous-section 3.1.2. Ce qui nous permettra d'intégrer numériquement l'équation (3.46) grâce à

7. Artifice justifié par l'argument de la faible densité d'agrégats atomiques à la surface du substrat des expériences de LECBD que l'on cherche à simuler par ces simulations de type DLA. (voir sous-section 3.1.1)

8. En l'absence de champ de force celle-ci se résume à une équation de Laplace  $\Delta(D(\mathbf{r}) \cdot P(\mathbf{r})) = 0$ .

9. On choisit une grille hexagonale pour son arrangement de compacité maximale.

l'équation maîtresse suivante :

$$\begin{aligned}
\forall (i, j) \in \llbracket 0, n_l \rrbracket^2, & \left( (w_{210^\circ})_{i+1, j+1} \right) \cdot P_{i+1, j+1} + \left( (w_{270^\circ})_{i, j+1} \right) \cdot P_{i, j+1} \\
& + \left( (w_{330^\circ})_{i-1, j} \right) \cdot P_{i-1, j} + \left( (w_{30^\circ})_{i-1, j-1} \right) \cdot P_{i-1, j-1} \\
& + \left( (w_{90^\circ})_{i, j-1} \right) \cdot P_{i, j-1} + \left( (w_{150^\circ})_{i+1, j} \right) \cdot P_{i+1, j} \\
& - \left( (w_{sum})_{i, j} \right) \cdot P_{i, j} = 0
\end{aligned} \tag{3.49}$$

qui n'est autre que l'équation (3.25) rendue indépendante du temps. On choisit alors un seuil de tolérance  $(\Delta P)^* = o(P)$  suffisamment faible pour considérer qu'en dessous de cette valeur, les variations de la densité de probabilité de présence  $\Delta P(\mathbf{r})$  en tout point de l'espace sont négligeables devant  $P(\mathbf{r})$  et que dès lors au bout d'un certain nombre d'itérations du calcul de l'équation (3.49), l'état stationnaire de  $P(\mathbf{r})$ ,  $\forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^2$  est atteint.

Ainsi à partir de cette carte de densité de probabilité de présence de particules libres aux voisinages d'une structure dendritique comptant  $N$  particules fixées. Nous sommes en mesure pour l'étape de croissance  $N + 1$  de choisir le site d'accrétion en fonction de la distribution de probabilité  $P_{stuck}$  :

$$\forall \mathbf{r} \in \mathbf{C}, P_{stuck}(\mathbf{r}) = \frac{P(\mathbf{r})}{\sum_{\mathbf{r}' \in \mathbf{C}} P(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'} \tag{3.50}$$

avec  $\mathbf{C} \subset \mathbb{R}^2$  l'ensemble des points appartenant au contour de la structure dendritique. L'algorithme que nous venons de décrire est une évolution de celui proposé en 1986 par Lyklema *et al.* dans [63] pour modéliser à la surface d'un réseau des structures dendritiques de type DLA s'étant auto-organisées sans subir l'influence d'un champ de force.

Dans leur travail ils commencent par présenter les marches aléatoires Laplaciennes LRW pour "laplacian random walk" en anglais, comme étant une généralisation des marches aléatoires auto-évitant croissant à l'infini IGSAW pour "indefinitely growing self-avoiding walk". Les LRW ne sont pas des marches isotropes. La direction choisie d'une itération à l'autre dépend de la probabilité :

$$\forall \eta \in \mathbb{R}^+, \forall \mathbf{r} \in \mathbf{V}_{r_{last}}, w_{r_{last} \rightarrow \mathbf{r}} = \frac{P(\mathbf{r})^\eta}{\sum_{\mathbf{r}' \in \mathbf{V}_{r_{last}}} P(\mathbf{r}')^\eta d\mathbf{r}'} \tag{3.51}$$

avec  $\mathbf{V}_{r_{last}} \subset \mathbb{R}^2$  l'ensemble des cases plus proches voisines du dernier site  $r_{last}$  visité par la LRW. Dans l'équation (3.51) actualisée entre chaque mouvement de la LRW,  $P(\mathbf{r})$  définit la densité de probabilité obtenue par l'intégration numérique de l'équation de Laplace en prenant comme conditions aux limites (3.47) et (3.48) telle que cette fois-ci  $\mathbf{S}$  représente l'ensemble des points appartenant au tracé de la LRW avant son prochain déplacement. Sur la (Fig.1 de [63]) où est représentée une LRW à la surface d'un réseau carré, étant donné que les sites 2 et 6 sont cernés par le tracé de la LRW, on comprend aisément qu'à l'issue de l'intégration de l'équation de Laplace, la valeur de la densité de probabilité  $P$  restera nulle à ces endroits. Cela a pour conséquence d'empêcher mécaniquement la LRW de choisir une direction qui l'amènerait à emprunter une impasse<sup>10</sup>. Ainsi pour  $\eta = 0$  dans (3.51),  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{V}_{r_{last}}, w_{r_{last} \rightarrow \mathbf{r}}$

10. Impasse dans laquelle elle finirait par être dans l'obligation de rejoindre un site déjà visité si cette marche voulait se poursuivre à l'infini.

les probabilités de se déplacer suivant les directions autorisées seront équiprobables et de ce fait la marche, elle, sera isotrope et auto-évitante, autrement dit une IGSAW.

Par la suite Lyklema *et al.* appellent alors fractales laplaciennes, toutes arborescences dont la construction est basée sur un algorithme semblable à celui développé pour les marches aléatoires laplaciennes et pour lequel les sites susceptibles de prolonger un tracé ne se résument plus aux seuls proches voisins du dernier site visité  $\mathbf{V}_{r_{last}}$ , mais à  $\mathbf{C}$  l'ensemble de ceux situés sur le contour du tracé tout entier. Ainsi les structures dendritiques de type DLA obtenues sans l'influence d'un champ de force sont donc des fractales laplaciennes dont la valeur de  $\eta = 1$ . Pour  $\eta = 0$  on retrouve des structures bien connues construites à partir d'un modèle appelé modèle d'Eden [112] tel que : à chaque étape de sa construction, à un agglomérat de sphères dures, on fixe une nouvelle particule suivant une position choisie uniformément parmi l'ensemble de celles où insérer une nouvelle sphère dure n'impliquerait pas que cette dernière chevauche les autres composant cette structure. Les agglomérats obtenus au moyen du modèle d'Eden sont donc pour les arborescences de type DLA ce que les tracés d'une IGSAW sont pour les tracés d'une LRW.

A ce stade il est intéressant de revenir sur [77] présenté dans la sous-section 3.1.1. Dans ce travail, à un algorithme basé sur le modèle DLA, A.Y. Menshutin et L.N. Shchur ont ajouté lors de l'étape de fixation d'une particule libre, une condition supplémentaire ; ayant pour objectif de rejeter les événements d'accrétion les moins probables et ainsi favoriser l'obtention d'arborescences dont les tracés tendent à se rapprocher le plus possible d'une morphologie moyenne. Or pour un nombre de rejets  $n \rightarrow +\infty$ , à un instant donné de la croissance d'une structure dendritique, le site sur lequel une particule libre ira s'attacher, sera identique à celui qui aurait été choisi par l'algorithme de Lyklema *et al.* ; autrement dit asymptotiquement ces deux algorithmes sont analogues. Dès lors les arborescences obtenues grâce à l'algorithme de Lyklema *et al.*, suivent des tracés qui s'approchent eux aussi assez fortement de la morphologie moyenne d'une arborescence de type DLA.

## Décharge diélectrique

Coûteux en temps de calcul et sensible aux effets du réseau permettant l'intégration numérique de (3.46), on est en droit de se demander à quoi peut bien servir l'algorithme précédemment décrit ? En l'occurrence à modéliser un certain nombre de phénomènes physiques comme la digitation visqueuse d'un fluide dans un autre [95], ou bien les claquages diélectriques [86]. Deux phénomènes pour lesquels la morphologie des arborescences qu'ils produisent, est semblable à celle obtenue par le modèle DLA ; mais qui pour autant ne sont pas les résultats de la croissance de structures dendritiques par accrétions de nouvelles particules libres. En appliquant un champ électrique entre une anode centrale et une cathode circulaire toutes deux séparées par un milieu isolant, pour une différence de potentiel  $U_0$  donnée appelée tension de claquage, on peut observer une soudaine décharge diélectrique comme sur la (Fig.1 de [85]) formant une arborescence se déployant de l'anode vers la cathode. Le mécanisme de claquage peut être vu comme un avalanche d'électrons venant ioniser localement le milieu diélectrique et donc augmenter considérablement sa conductivité, ce qui a pour conséquence d'égaliser le potentiel électrique le long du tracé de cette décharge avec celui de l'anode. Les électrons continueront

alors de remonter les gradients de potentiel en direction de la cathode. Ce mécanisme est schématisé à un instant donné d'une décharge sur la (Fig.3.9). Ainsi l'algorithme de Lyklema *et al.* [63] est tout indiqué pour modéliser ce phénomène, et Niemeyer *et al.* dans [85] l'auront utilisé pour simuler les arborescences qui résultent des claquages diélectriques se produisant dans 3 atmosphères d'hexafluorure de soufre ( $SF_6$ ) gazeux, à la surface d'une plaque de verre de 2 mm.

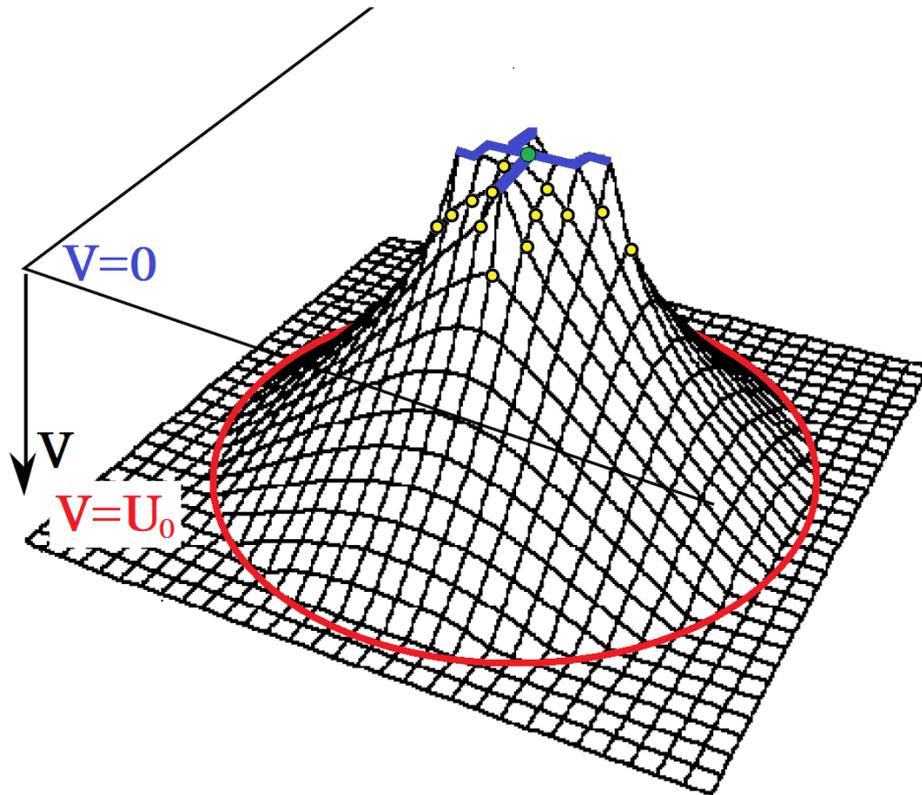


Figure 3.9 – Cartographie du potentiel électrique  $V(\mathbf{r})$  mesuré entre une cathode circulaire (en rouge) maintenue au potentiel  $V_{cathode} = U_0$  et la décharge électrique (en bleu) au même potentiel que l'anode (en vert)  $V_{anode} = 0$ . Cette carte est obtenue en intégrant l'équation de Laplace  $\Delta V = 0$  avec comme conditions aux limites  $V_{cathode} = U_0$  et  $V_{dcharge} = 0$ . Les points jaunes représentent les sites par lesquels est susceptible de se déployer la décharge, selon l'algorithme décrit par Lyklema *et al.* dans [63] (From Gouyet & al [30]).

### 3.2.2 . Chronologie des évènements ayant abouti à la construction d'une structure dendritique de type DLA

#### DLA un processus stochastique irréversible

Les structures dendritiques obtenues par le biais du modèle DLA, l'ont été au moyen d'un processus stochastique irréversible. Par définition, il est donc impossible, à partir de la seule

information du tracé d'une arborescence à un instant  $T$  donné, de reconstituer exactement la suite des événements séparant cet état de croissance avec un autre antérieur. Cependant en adaptant notre évolution de l'algorithme de Lyklema *et al.* développé plus haut dans la sous-section 3.2.1; il est possible d'approcher un scénario qui colle assez fidèlement avec la véritable chronologie des événements.

D'ores et déjà on peut être sûr que parmi l'assemblée des  $N$  particules composant une arborescence de type DLA, la seule ayant pu s'être fixée la dernière, est forcément connectée à une seule autre particule fixe (par la suite  $N_i$  correspondra au nombre de particules fixes comptabilisant  $i$  connexions). Cette condition triviale portant sur le nombre de proches voisins connectés à une particule fixe, nous permet d'éliminer avec certitude  $N - N_1$  des candidates potentielles. Cependant il nous faut trouver une ou des conditions supplémentaires, afin de réduire ce choix à une seule.

Or précédemment dans la sous-section 3.2.1, à tout instant de la croissance d'une structure dendritique, nous étions capables en fonction de la distribution de probabilité  $P_{stuck}$ , de choisir parmi  $\mathbf{C}$  l'ensemble des sites d'accrétion, celui sur lequel une particule libre diffusant aux abords de son voisinage viendrait se fixer. Pour calculer cette distribution de probabilité  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{C}$  d'après l'équation (3.50), il fallait intégrer numériquement l'équation (3.46) suivant les conditions aux limites décrites par (3.47) et (3.48). Dès lors si pour chaque particule fixe comptabilisant une seule connexion, on évalue sa probabilité  $P_{stuck}$  telle que le contour  $\mathbf{C}$  est défini à chaque fois comme étant celui du tracé de l'arborescence privée de cette particule; on est en mesure de déterminer laquelle d'entre elles est la plus susceptible de s'agréger la dernière.

Pour une arborescence constituée de  $N$  particules la méthode que nous venons de décrire, est tout à fait satisfaisante lorsqu'il s'agit de choisir l'événement d'accrétion le plus susceptible de se réaliser lors de l'étape finale  $N$ . On peut alors retirer la particule que l'on présume s'être agrégée au reste de la structure dendritique lors de l'étape  $N$ , et ainsi obtenir le tracé le plus probable de cette arborescence à l'étape  $N - 1$  de sa croissance. Dès lors si la particule fixe connectée à celle que l'on vient de retirer, appelons la "A", comptabilise une seule connexion sur ce tracé à l'étape  $N - 1$ ; celle-ci devient alors une candidate pour les événements d'accrétion s'étant déroulés au plus tard lors de l'étape  $N - 1$  et sa position sera définie par  $\mathbf{r}_A \in \mathbf{F}_{N-1} \setminus \mathbf{F}_N$ . Par la suite  $\forall T \in \llbracket 1, N + 1 \rrbracket$ , on note  $\mathbf{F}_T$  l'ensemble des positions  $\mathbf{r}$  à la surface du domaine de simulation repérant les particules candidates à l'événement d'accrétion ayant eu lieu lors de l'étape  $T$ , avec  $\mathbf{F}_{N+1} = \emptyset$ . Or à l'exception de la particule "A"<sup>11</sup>, l'ensemble des autres particules candidates de l'étape  $N - 1$  le sont aussi lors de l'étape  $N$ , autrement dit  $\mathbf{F}_{N-1} \cap \mathbf{F}_N = \mathbf{F}_{N-1} \setminus \{\mathbf{r}_A\}$ . Pour ces dernières, leurs probabilités de se coller au reste de la structure dendritique au plus tôt lors de l'étape  $N - 1$  valent  $P_{cand}(\mathbf{r}, N - 1) = \frac{P_{stuck}(\mathbf{r}, N) + P_{stuck}(\mathbf{r}, N - 1)}{P_{stuck}(\mathbf{r}_A, N - 1) + \sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{F}_{N-1} \setminus \{\mathbf{r}_A\}} P_{stuck}(\mathbf{r}, N) + P_{stuck}(\mathbf{r}, N - 1)}$ , tandis que pour la particule "A" cette probabilité vaut  $P_{cand}(\mathbf{r}_A, N - 1) = \frac{P_{stuck}(\mathbf{r}_A, N - 1)}{P_{stuck}(\mathbf{r}_A, N - 1) + \sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{F}_{N-1} \setminus \{\mathbf{r}_A\}} P_{stuck}(\mathbf{r}, N) + P_{stuck}(\mathbf{r}, N - 1)}$ . On peut généraliser ce résultat pour n'importe quelle étape  $T \in \llbracket 1, N \rrbracket$  de la croissance d'une

11. Le singleton contenant la position  $\mathbf{r}_A$  à la surface du domaine de simulation repérant la particule candidate "A" satisfait l'égalité  $\{\mathbf{r}_A\} = \mathbf{F}_{N-1} \setminus \mathbf{F}_N$ .

arborescence telle que :

$$\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T, P_{cand}(\mathbf{r}, T) = \frac{S(\mathbf{r}, T)}{\sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{F}_T} S(\mathbf{r}, T)} \quad (3.52)$$

avec  $\forall M \in \llbracket T, N \rrbracket$ , la fonction  $S$  définie pour une particule repérée à la position  $\mathbf{r} \in \mathbf{F}_M \setminus \mathbf{F}_{M+1}$  telle que :

$$S(\mathbf{r}, T) = \sum_{t=T}^M P_{stuck}(\mathbf{r}, t) \quad (3.53)$$

Ainsi  $\forall T \in \llbracket 1, N \rrbracket$ , d'après (3.52) on est en mesure de choisir la particule fixe la plus susceptible d'avoir rejoint au plus tôt le reste de la structure dendritique lors de l'étape  $T$ .

### **Algorithme permettant d'approcher le plus fidèlement possible la chronologie des évènements ayant abouti à l'auto-organisation d'une structure dendritique de type DLA**

D'après les équations (3.52) et (3.53), il est nécessaire de calculer au préalable  $P_{stuck}(\mathbf{r}, T)$ , si l'on veut obtenir la valeur de  $P_{cand}(\mathbf{r}, T)$ ,  $\forall T \in \llbracket 1, N \rrbracket$  et  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T$ . On sera donc amené à intégrer numériquement l'équation (3.46) et cela en choisissant comme précédemment pour l'algorithme présenté dans la sous-section 3.2.1 de subdiviser le domaine de simulation au moyen d'un réseau hexagonal. On construit alors une grille  $\Gamma$  à l'instar de celle représentée à gauche de la (Fig.3.3) plus tôt dans la sous-section 3.1.1, mais cette fois-ci hexagonale. Cette grille  $\Gamma$  nous permettra d'identifier les cases de coordonnées  $(i, j)$  à la surface du domaine de simulation dans lesquelles on retrouve les positions des particules fixes d'une arborescence à l'étape  $T$  de sa croissance et ainsi d'appliquer, lors de l'intégration numérique, les conditions aux limites (3.48).

Pendant afin d'évaluer parmi l'ensemble des particules candidates  $\mathbf{F}_T$  laquelle sera la plus susceptible d'être arrivée au plus tôt lors de l'étape  $T$ , on devra intégrer numériquement l'équation (3.46) sur l'ensemble du domaine de simulation et cela pour les  $Card(\mathbf{F}_T)$  tracés potentiels de l'arborescence à l'étape  $T - 1$ , définissant des conditions aux limites (3.48) différentes à chaque fois. Or ces intégrations représentent l'essentiel de la complexité<sup>12</sup> en temps et en espace de notre algorithme qui on le rappelle a pour but d'approcher la chronologie des accrétions ayant abouti à l'auto-organisation de n'importe quelle structure dendritique de type DLA.

Afin de réduire la complexité en temps de notre algorithme, à chaque étape  $T \in \llbracket 1, N \rrbracket$  de la croissance d'une arborescence, lors de l'évaluation de l'évènement d'accrétion le plus susceptible d'avoir eu lieu, on réalisera l'intégration numérique de l'équation (3.46) sur l'ensemble du domaine de simulation  $[0, L]^2$  et cela pour le seul tracé de l'arborescence à cette étape  $T$  de sa croissance. On obtient donc à l'instar de celle représenté sur la (Fig.3.10), la cartographie  $\forall \mathbf{r} \in [0, L]^2$ ,  $P(\mathbf{r}, T)$  de la densité de probabilité de présence d'une particule libre au voisinage

---

12. Les notions de complexités en temps et en espace d'un algorithme mesurent respectivement le nombre d'étapes et l'espace mémoire qui lui seront nécessaires pour aller au bout de son calcul, voir [13] pour plus de détails à ce sujet

du tracé estimé de la structure dendritique au moment où celle-ci était composée de  $T$  particules fixes. Ainsi à partir de cette distribution, on pourra ensuite évaluer  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T$ ,  $P_{stuck}(\mathbf{r}, T)$  de la manière suivante :

$$\begin{aligned}
P_{stuck}(\mathbf{r}, T) \simeq & \left( (w_{210^\circ})_{i+1,j+1} \right) \cdot P_{i+1,j+1} + \left( (w_{270^\circ})_{i,j+1} \right) \cdot P_{i,j+1} \\
& + \left( (w_{330^\circ})_{i-1,j} \right) \cdot P_{i-1,j} + \left( (w_{30^\circ})_{i-1,j-1} \right) \cdot P_{i-1,j-1} \\
& + \left( (w_{90^\circ})_{i,j-1} \right) \cdot P_{i,j-1} + \left( (w_{150^\circ})_{i+1,j} \right) \cdot P_{i+1,j}
\end{aligned} \tag{3.54}$$

telle que  $(i, j) \in \llbracket 0, n_l \rrbracket^2$  correspondent aux coordonnées sur la grille hexagonale  $\mathbf{\Gamma}$  les plus proches de la position  $\mathbf{r}$  d'une particule candidate de l'arborescence. Ainsi à chaque étape  $T$  de la construction d'une structure dendritique, on perd un petit peu sur la précision de  $P_{stuck}(\mathbf{r}, T)$ , mais on réduit considérablement la complexité en temps de notre algorithme par  $Card(\mathbf{F}_T)$ .

En résumé, notre algorithme se décompose suivant les étapes ci-dessous :

1. Tout d'abord initialement :
  - (a) On définit le domaine de simulation  $[0, L]^2$  de sorte à ce que : ce dernier soit centré sur la position  $r_G$  du centre de gravité de la structure dendritique dont on cherche à évaluer la chronologie de sa construction et que la surface de ce domaine comprenne l'aire d'un disque de rayon  $L = 6(R_{max} + r_p)$ , avec  $R_{max}$  la distance maximale mesurée entre une particule fixe et le centre de gravité de cette arborescence. On subdivise alors ce domaine en une grille hexagonale et on construit la grille  $\mathbf{\Gamma}$  à l'aide de laquelle on repérera par la suite le tracé de l'arborescence à la surface de ce réseau et nous permettra d'appliquer les conditions aux limites (3.48) lors de l'intégration numérique de l'étape 2a.
  - (b) A partir du tracé de l'arborescence on identifie  $\mathbf{F}_N$  l'ensemble des particules fixes connectées chacune seulement à une autre particule, autrement dit l'ensemble des particules potentiellement candidates pour s'être agrégées au reste de cette structure dendritique, lors de l'étape  $N$  de sa croissance.
2. Puis, à chaque étape  $T \in \llbracket 1, N - 1 \rrbracket$  de la croissance de l'arborescence, afin d'évaluer laquelle parmi ses particules fixes, était la plus susceptible de s'être agrégée au plus tôt lors de cette étape, l'algorithme suivra la routine suivante :
  - (a) On intègre numériquement l'équation (3.46) à la surface du domaine de simulation  $[0, L]^2$ , suivant les conditions aux limites décrites par (3.47) et par (3.48) et on obtient  $\forall \mathbf{r} \in [0, L]^2$ ,  $P(\mathbf{r}, T)$  et donc d'après l'équation (3.54)  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T$ ,  $P_{stuck}(\mathbf{r}, T)$ .
  - (b) On évalue alors d'après les équations (3.52) et (3.53), la distribution de probabilité  $P_{cand}(\mathbf{r}, T)$ ,  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T$  à une étape  $T \in \llbracket 1, N \rrbracket$  de la croissance de cette structure dendritique.
  - (c) On supprime ensuite du tracé de l'arborescence, la particule fixe la plus susceptible de s'être agrégée au plus tôt lors de cette étape  $T$ , c'est à dire celle pour laquelle

$P_{cand}(\mathbf{r}, T)$  est maximum. Ainsi on obtient le tracé le plus probable de la structure dendritique à l'étape  $T - 1$  de sa croissance

- (d) Enfin on met à jour la grille  $\mathbf{\Gamma}$  en fonction du tracé de l'arborescence à l'étape  $T - 1$  et on définit l'ensemble  $\mathbf{F}_{T-1}$  exactement comme nous l'avons fait lors de l'étape 1b. On peut désormais revenir à l'étape 2a et déterminer l'évènement d'accrétion le plus susceptible d'avoir eu lieu cette fois-ci lors de l'étape  $T - 1$  de la croissance de cette structure dendritique.

### Correspondance entre la chronologie réelle et celle estimée par notre algorithme des évènements d'accrétions à l'origine de la construction d'une structure dendritique de type DLA

Désormais nous allons mesurer à quel point la chronologie estimée par notre algorithme est fidèle ou non à la suite des évènements d'accrétion de particules libres ayant conduit à l'auto-organisation d'une structure dendritique de type DLA donnée. Afin de réaliser une telle comparaison,  $\forall T \in \llbracket 0, N \rrbracket$  l'étape de croissance d'une arborescence, nous allons avoir besoin d'identifier à la surface du domaine de simulation, une région particulière définie telle que :

$$\mathbf{G}_T = \left\{ \mathbf{r} \in \mathbb{R}^2 \mid P(\mathbf{r}, T) \leq \max(\{P_{stuck}(\mathbf{r}, T) \mid \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T\}) \right\} \quad (3.55)$$

Autrement dit pour chaque étape  $T$ , la région dont le contour est décrit par la ligne de niveau  $\rho^*$  pour laquelle la densité de probabilité de présence d'une particule libre vaut la valeur maximale de  $P_{stuck}(\mathbf{r}, T)$ ,  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_T$ . Sur la (Fig.3.10) est représentée cette ligne de niveau pour l'étape finale  $N$  de la croissance d'une arborescence dont la construction avait été simulée en présence d'un champ de force uniforme et cela par l'algorithme DLA hors réseau présenté dans la sous-section 3.1.1.

Dès lors en superposant les lignes de niveau obtenues en suivant la chronologie réelle avec celles calculées à partir du scénario estimé par notre algorithme comme ce qui a été fait sur la (Fig.3.11), on observe que la correspondance entre ces dernières est très bonne. Au delà de cette simple analyse qualitative, si il fallait pondérer cette observation :  $\forall T \in \llbracket 0, N \rrbracket$  on pourrait compter parmi les particules fixes contenues dans la région  $\mathbf{G}_T$  calculée suivant la véritable chronologie, le nombre de particules  $T^*$  pour lesquelles leurs étapes d'arrivée suivant la chronologie estimée par notre algorithme sont antérieures ou contemporaines à l'étape  $T$ . Ainsi en bas à gauche des (Fig.3.12) et (Fig.3.13), nous avons tracé en bleu l'erreur relative  $1 - \frac{T^*}{T}$  respectivement dans le cas d'une arborescence dont l'auto-organisation avait été simulée en l'absence de champ de force et une autre où cette fois-ci un champ de force uniforme  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_y$  était présent tout au long de sa construction. Il apparaît alors que ces deux chronologies estimées ici par notre algorithme et représentées en bas à droite des (Fig.3.12) et (Fig.3.13) sont très proches de se calquer l'une et l'autre sur les véritables chronologies. En effet pour les étapes de croissance  $T \geq 50$ , l'erreur relative ne dépasse pas les 10% pour ces deux chronologies.

Notre algorithme semble donc en capacité de produire des résultats très satisfaisants et cela indépendamment de l'intensité ou bien de la nature des champs de force qui pourraient être

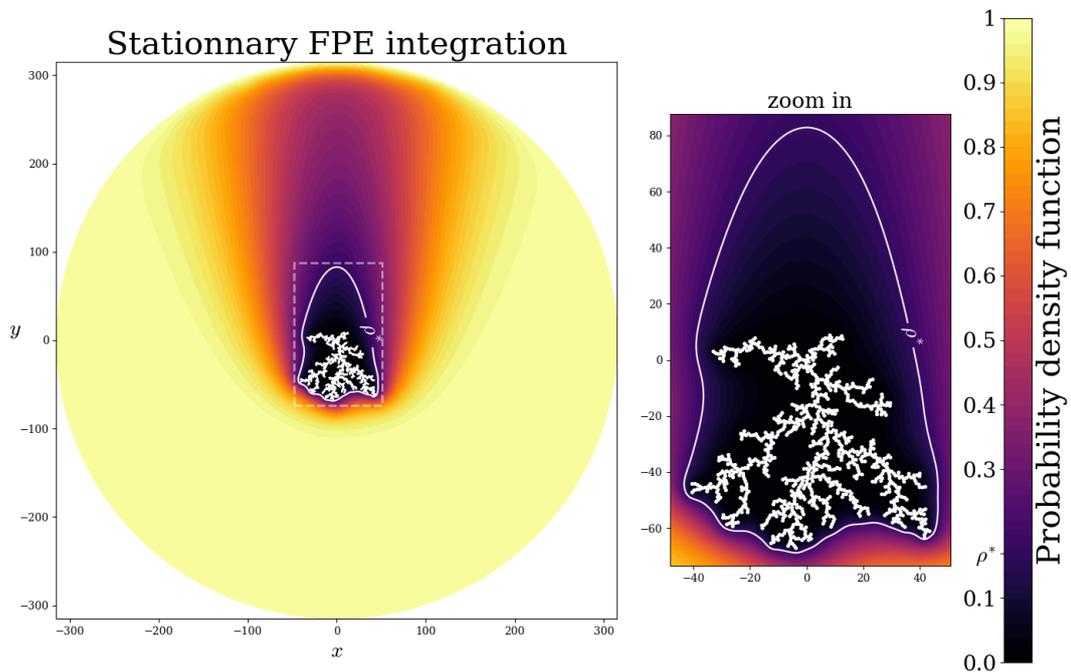


Figure 3.10 – Densité de probabilité de présence des particules libres au voisinage d'une structure dendritique composée de  $N = 1000$  particules sous l'influence d'un champ de force uniforme  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_y$ .  $\rho^*$  est la ligne de niveau pour laquelle  $P(\mathbf{r}, N)$  vaut la valeur maximale de  $P_{stuck}(\mathbf{r}, N)$ ,  $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{F}_N$ .

appliqués durant l'auto-organisation d'une arborescence de type DLA dont on chercherait par la suite à estimer la chronologie. Pour définitivement s'en assurer on a tracé sur les (Fig.3.14) et (Fig.3.15), à chacune des étapes  $T$  de la croissance d'arborescences construites respectivement en la présence ou pas d'un champ de force, l'erreur relative et cela pour un échantillon de mille arborescences.  $\forall T \in \llbracket 0, N \rrbracket$  on constate alors que l'écart entre la médiane et le premier quartile ainsi que celui entre la médiane et le troisième quartile sont très resserrés. Autrement dit que la distribution des mesures de l'erreur relative à une étape  $T$  de la croissance de chacune des 1000 arborescences composant notre échantillon est très piquée autour de la valeur de la médiane. Cette observation est confirmée par la mesure  $\forall T \in \llbracket 0, N \rrbracket$  des écarts existant entre le 5<sup>me</sup> et le 95<sup>me</sup> centile de ces distributions. Ainsi 90% des ces mesures se situent dans un fine bande autour de la courbe d'évolution de la médiane ce qui en somme signifie que d'une arborescence à l'autre l'erreur relative s'éloigne peu autour de la valeur médiane. En conclusion ces derniers résultats finissent de confirmer la robustesse de notre algorithme ainsi que sa précision d'ores et déjà mise en évidence un peu plus tôt.

A titre d'exemple afin de mieux se rendre compte de la précision de notre algorithme, nous avons décidé de mesurer l'erreur relative mais cette fois-ci pour une chronologie ayant été estimée de la manière suivante :  $\forall T \in \llbracket 0, N \rrbracket$  l'étape de croissance dont on cherche à estimer parmi les candidates  $\mathbf{F}_T$  la particule fixe la plus susceptible de s'être fixée à cette étape de la

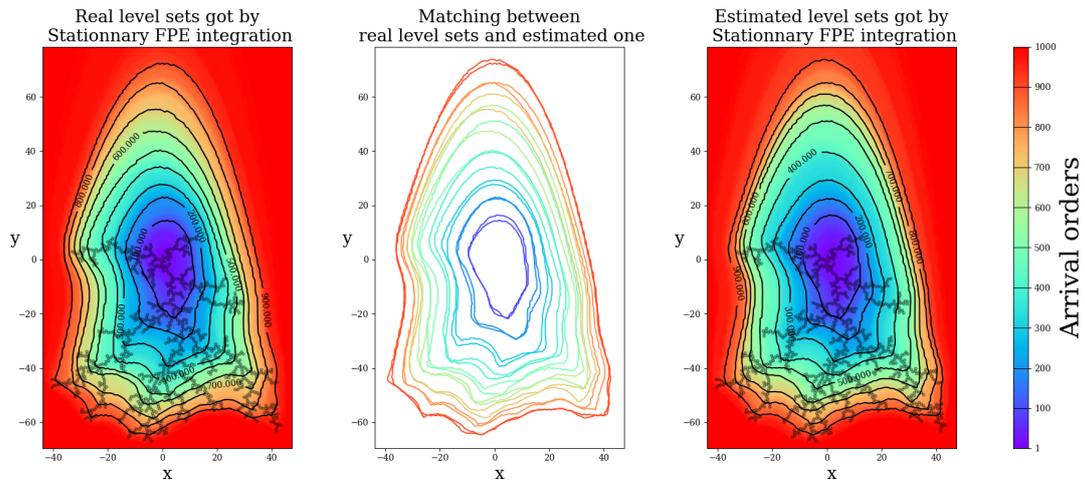


Figure 3.11 – Comparaison entre les lignes de niveau réelles et celles estimées lors de la construction de la chronologie d’une structure dendritique composée de 1000 particules sous l’influence d’un champ de force uniforme  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_y$ .

construction d’une arborescence, on choisira celle dont la position est la plus éloignée du centre de gravité de cette structure dendritique. Cette méthode fonctionne très mal lorsqu’il s’agit d’estimer la chronologie des évènements ayant abouti à la construction d’une arborescence en la présence d’un champ de force uniforme, mais semble d’après la courbe de l’erreur relative tracée en rouge en bas à gauche de la (Fig.3.12) être satisfaisante lorsque celle-ci s’était auto-organisée sous l’influence d’aucun champ de force. Cependant si on y regarde de plus près, on observe notamment sur les zooms représentés sur la (Fig.3.16) que localement cette méthode ne nous permet pas d’approcher aussi bien que le ferait notre algorithme.

En conclusion la véritable chronologie des évènements ayant abouti à la construction d’une arborescence, bien qu’à l’origine produit d’un processus stochastique irréversible, pourra être très fidèlement approchée par notre méthode. En effet passé les 100 premières étapes de construction d’une arborescence composée de  $N = 1000$  sphères dures, l’erreur relative, mesurée entre la véritable chronologie et celle estimée par notre méthode, se maintient à des valeurs inférieures à 10% (voir (Fig.3.14), (Fig.3.15)). L’analyse par cette méthode d’images expérimentales reste à faire. Nous reviendrons dans les perspectives sur une amélioration à apporter à cette méthode; afin d’analyser la construction de dendrites expérimentales et cela même si le flux d’agrégats atomiques lors du dépôt était important.

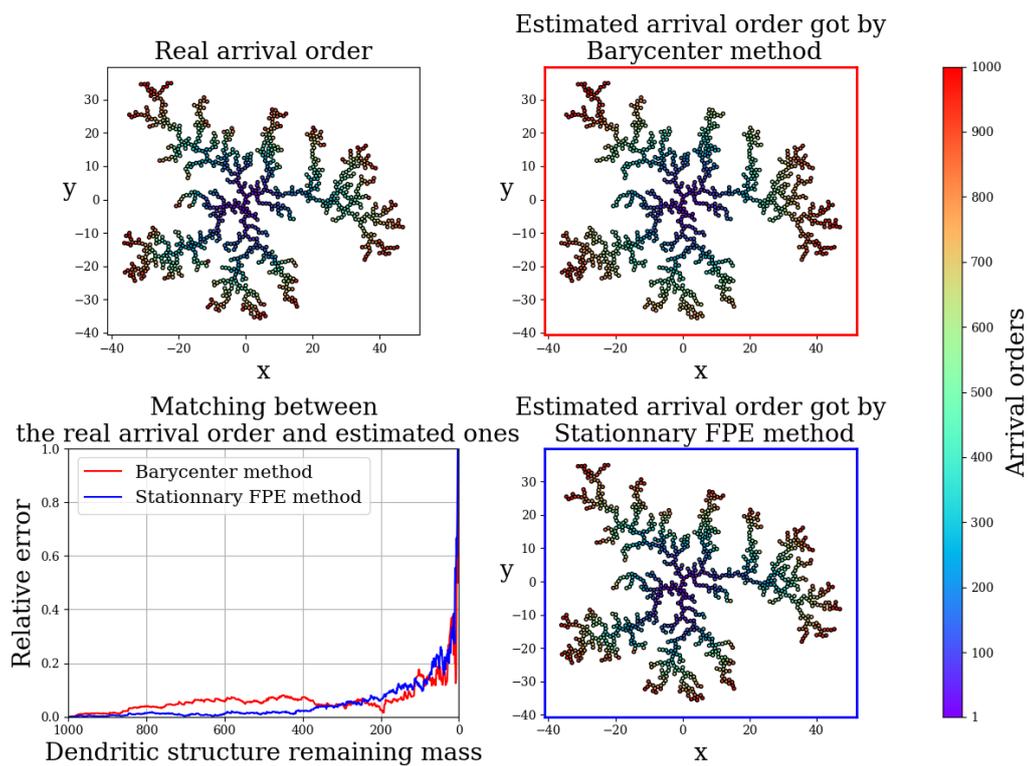


Figure 3.12 – Deux méthodes (droite haut et bas), permettant chacune d'estimer la chronologie suivant laquelle les particules une à une viennent s'agréger, sont comparées (gauche bas) ici sur la base de leurs erreurs de correspondance avec l'ordre d'arrivée réel (gauche haut) des particules lors de la simulation d'une structure dendritique composée de 1000 particules sous l'influence d'un champ de force uniforme  $F = 0$

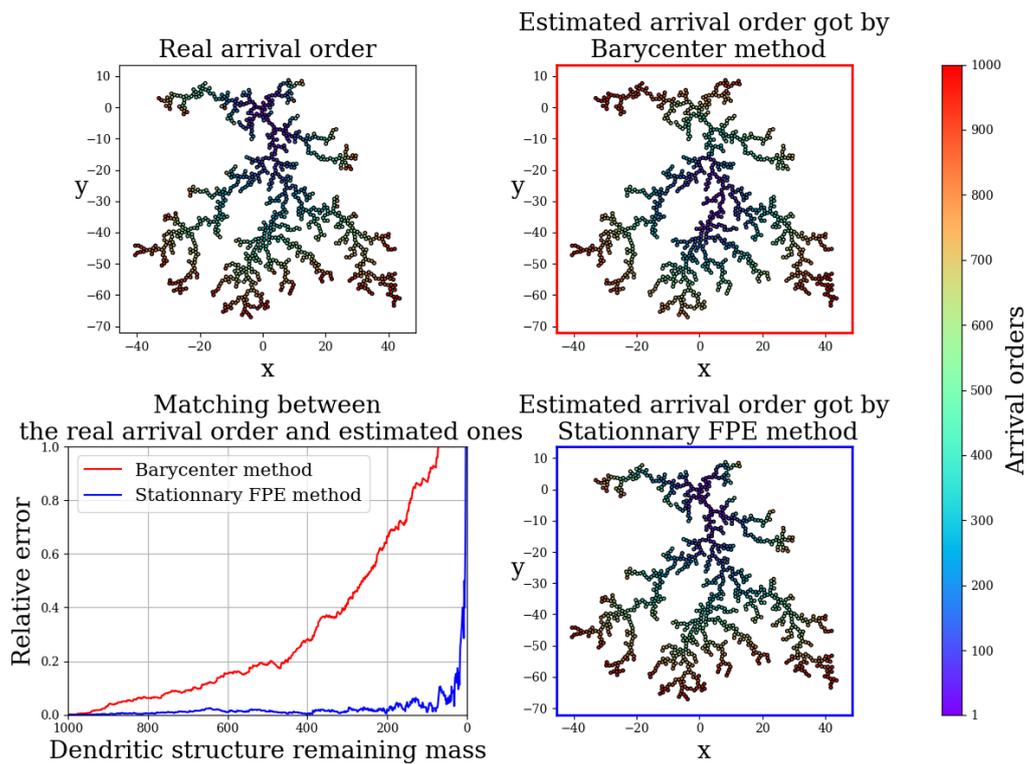


Figure 3.13 – Deux méthodes (droite haut et bas), permettant chacune d’estimer la chronologie suivant laquelle les particules une à une viennent s’agréger, sont comparées (gauche bas) ici sur la base de leurs erreurs de correspondance avec l’ordre d’arrivée réel (gauche haut) des particules lors de la simulation d’une structure dendritique composée de 1000 particules sous l’influence d’un champ de force uniforme  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_y$

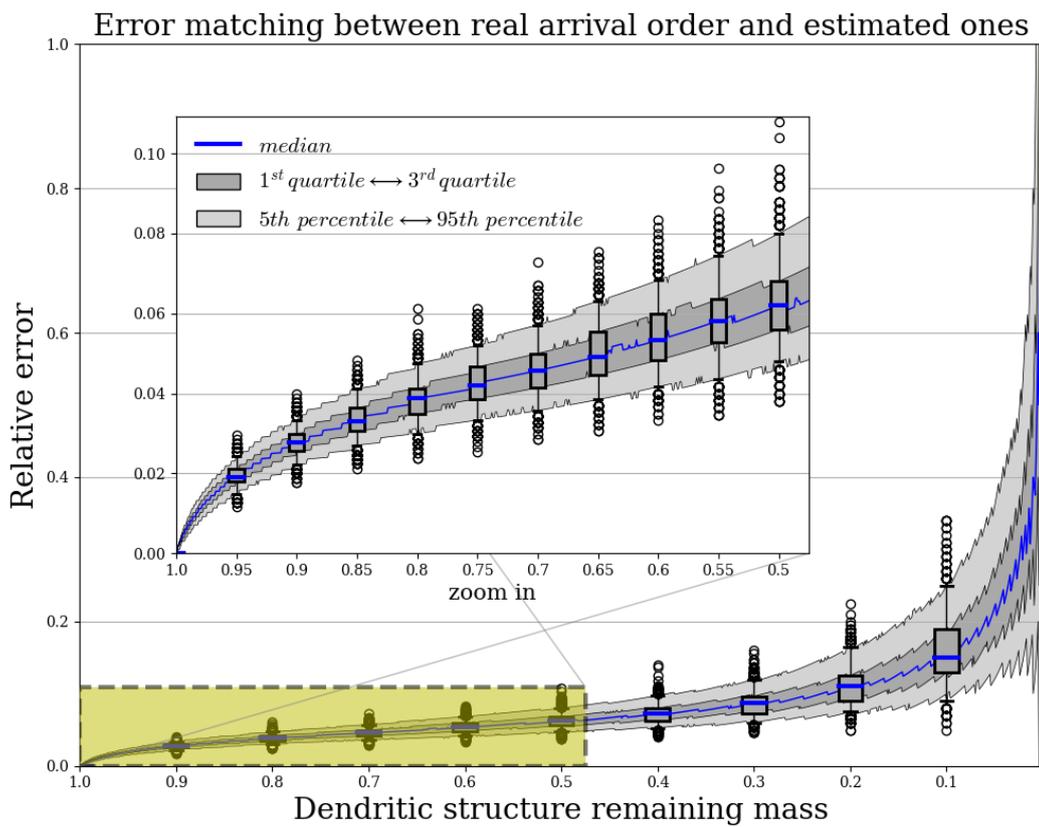


Figure 3.14 – Erreur relative sur le nombre total de particules restantes simulé par notre algorithme pour 1000 structures dendritiques DLA composées de 1000 particules et ne subissant aucun champ de force externe.

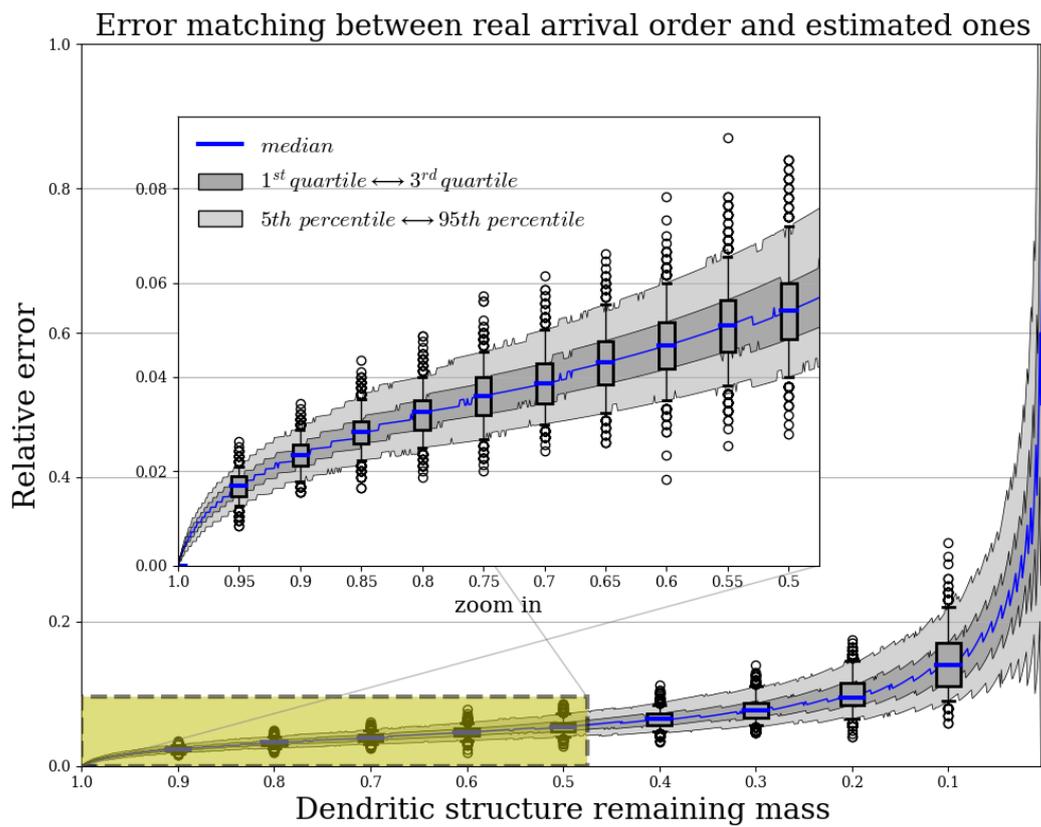


Figure 3.15 – Erreur relative sur le nombre total de particules restantes simulé par notre algorithme pour 1000 structures dendritiques DLA composées de 1000 particules et subissant un champ de force externe uniforme d'intensité  $F = 1.0 \cdot \mathbf{u}_y$  en unité de force arbitraire.

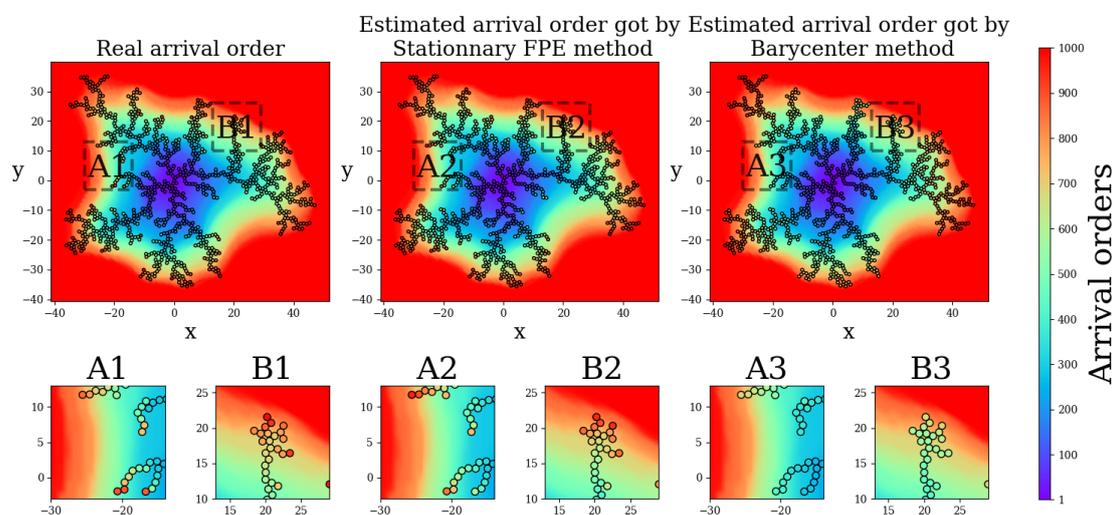


Figure 3.16 – Illustration de la précision locale des chronologies obtenues suivant deux méthodes différentes, pour une structure dendritique composée de 1000 particules s'étant auto-organisée sous l'influence d'aucun champ de force.



## 4 - Outils de la théorie des graphes

Afin de décrire l'ensemble des concepts exposés dans ce chapitre, nous nous sommes librement inspirés des ouvrages suivant : "Graphs and hypergraphs" de Claude Berge [4], "Graph theory" de Reinhard Diestel [17] et "Random Trees : An Interplay between Combinatorics and Probability" de Michael Drmota [19].

### 4.1 . Graphes

#### 4.1.1 . Généralités à propos des graphes

##### Définition d'un graphe

Un graphe est la représentation mathématique de nœuds reliés les uns avec les autres par le biais de liens. En des termes plus formels cela donne :

Soient  $G(V, E)$  un graphe défini par le couple composé d'un ensemble  $V$  et de la collection  $E$  tels que :

$$V = \{v_i\}, \text{ avec } \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, v_i \text{ les } n \text{ nœuds (sommets) du graphe } G \quad (4.1)$$

$$E = \{e_i\} \subseteq V^2, \text{ avec } \forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket, e_i \text{ les } m \text{ liens (arrêtes) du graphe } G \quad (4.2)$$

La collection  $E$  est donc composée de liens qui mathématiquement se définissent comme des paires ou des singletons de nœuds. Autrement dit  $E$  en plus d'être une collection, est un ensemble des parties de  $V$  (voir sous-section 1.1.1).

On définit l'ordre du graphe  $G(V, E)$  par le nombre de nœuds que compte l'ensemble  $V$  ou dit autrement :

$$Card(V) = \text{la cardinalité de l'ensemble } V \quad (4.3)$$

La position des nœuds ainsi que la forme des liens sur un graphe ne représente à priori aucune information du point de vue de la théorie des graphes. Ce qui importe c'est la manière avec laquelle les nœuds sont reliés les uns avec les autres. Ainsi sur la (Fig.4.1) ces deux graphes sont en fait isomorphes l'un de l'autre.

##### Sous-graphe et graphe partiel

A partir d'un graphe  $G(V, E)$ , on pourra engendrer une multitude de graphes appartenant aux deux sous-catégories que l'on va décrire :

Si  $G'(V', E_{V'})$  est un sous-graphe de  $G(V, E)$  engendré par  $V' \subset V$  alors cela signifie que  $E_{V'}$  la collection de ces liens correspond à un sous ensemble de  $E$  tel que ses éléments  $e_i$  soient tous des liens faisant intervenir exclusivement les nœuds de  $V'$ , dit de manière formelle :

$$G'(V', E_{V'}) \quad | \quad V' \subset V \ \& \ E_{V'} = \{e \in E \mid \forall e = (v_j, v_i) \in E, (v_j, v_i) \in V'^2\} \quad (4.4)$$

**exemple :** Le graphe  $G(\{a, b, c, d\}, \{1, 2, 3, 4, 8\})$  est un sous graphe engendré par le sous ensemble de nœuds  $\{a, b, c, d\}$  du graphe de la (Fig.4.2).

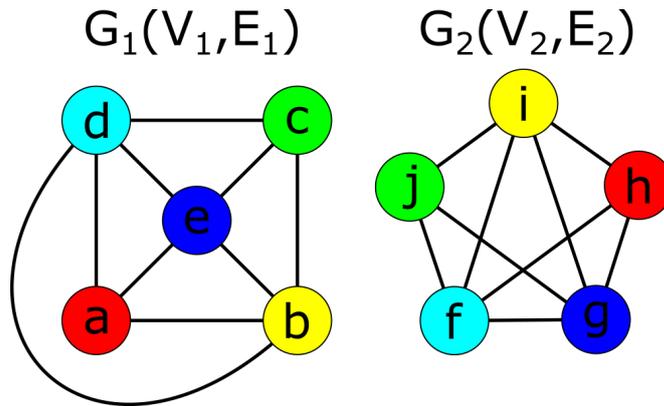


Figure 4.1 – Illustration d’une paire de graphes isomorphes. Soit  $f_{iso}$  l’isomorphisme, une application bijective associant les sommets du graphe  $G_1(V_1, E_1)$  avec les sommets du graphe  $G_2(V_2, E_2)$  telle que :  $f_{iso}(a) = h$ ,  $f_{iso}(b) = i$ ,  $f_{iso}(c) = j$ ,  $f_{iso}(d) = f$  et  $f_{iso}(e) = g$ .

Si  $G'(V, E')$  est graphe partiel de  $G(V, E)$  engendré par  $E'$  alors cela signifie que  $E' \subset E$ , dit de manière formelle :

$$G'(V, E') \quad | \quad E' \subset E \quad (4.5)$$

**exemple :** Le graphe  $G(\{a, b, c, d, e, f, g, h\}, \{1, 3, 5, 6, 7, 8, 10\})$  est un sous graphe engendré par le sous ensemble de liens  $\{1, 3, 5, 6, 7, 8, 10\}$  du graphe de la (Fig.4.2).

Ainsi un sous graphe partiel  $G'(V', E'_{V'})$  de  $G(V, E)$  engendré par  $V'$  et  $E'_{V'}$ , est la réunion des définitions précédentes ce qui donne :

$$G'(V', E'_{V'}) \quad | \quad V' \subset V \ \& \ E'_{V'} \subset E_{V'} = \{e \mid \forall e = (v_j, v_i) \in E, (v_j, v_i) \in V'^2\} \quad (4.6)$$

**exemple :** Le graphe  $G(\{a, b, c, d\}, \{1, 2, 3, 8\})$  est un sous graphe partiel engendré par le sous ensemble de nœuds  $\{a, b, c, d\}$  et par le sous ensemble de liens  $\{1, 2, 3, 8\}$  du graphe de la (Fig.4.2).

### Graphe orienté ou non orienté

Dans un graphe orienté  $G(V, E)$ , les liens sont des flèches et pour une flèche donnée  $e = (v_i, v_j)$ ,  $\forall (v_i, v_j) \in V^2$ , on dit que son incidence est orientée de  $v_i$  vers  $v_j$ .  $v_i$  constitue ce l’on appelle la queue de la flèche tandis que  $v_j$  définit sa tête.  $(v_j, v_i)$  serait la flèche inverse et mathématiquement  $(v_i, v_j)$  est un couple. Dans un graphe non orienté  $G(V, E)$ , les liens sont des arcs et on dit qu’un arc donné  $e = \{v_i, v_j\}$ ,  $\forall (v_i, v_j) \in V^2$  est incident sur  $v_i$  et  $v_j$ . L’ordre des nœuds ne définissant aucune orientation,  $\{v_i, v_j\}$  est une paire.

$$G(V, E) \text{ orienté, } \forall e \in E, e = (v_i, v_j), \text{ avec } (v_i, v_j) \in V^2 \quad (4.7)$$

$$G(V, E) \text{ non orienté, } \forall e \in E, e = \{v_i, v_j\}, \text{ avec } (v_i, v_j) \in V^2 \quad (4.8)$$

Ainsi on compte  $n + 2\binom{n}{2} = n + n(n - 1)$  flèches différentes possibles pour un graphe orienté d’ordre  $n$  (4.3); tandis que pour un graphe non orienté du même ordre, on comptera

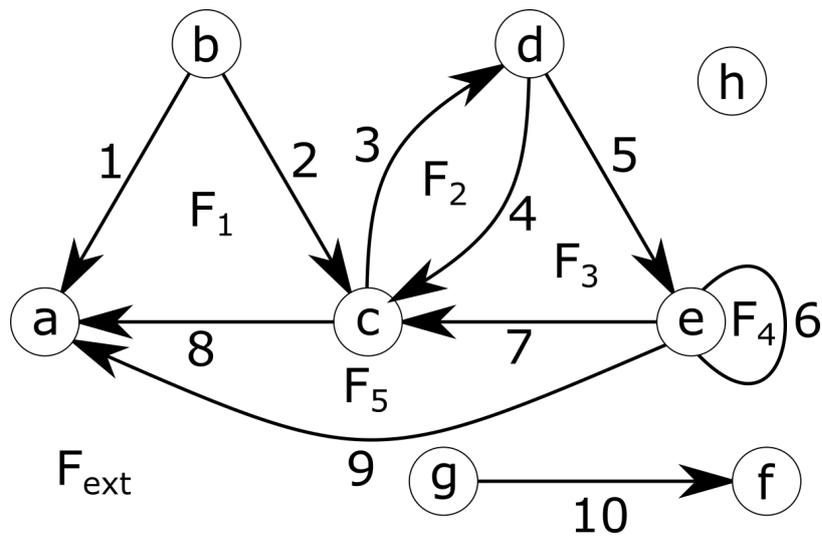


Figure 4.2 – Graphe quelconque servant d'exemple aux différents concepts exposés dans la section 4.1

seulement  $n + \binom{n}{2} = n + \frac{n(n-1)}{2}$  arcs différents possibles. Parmi l'ensemble de ces liens, dans les deux cas,  $n$  correspondra à l'ensemble des boucles possibles (une boucle est un lien qui lie un nœud à lui même, sur la (Fig.4.2) le lien 6 est une boucle), tandis que les  $2\binom{n}{2}$  liens restants dans le cas où le graphe est orienté et les  $\binom{n}{2}$  dans l'autre, correspondent respectivement aux 2-arrangements et aux 2-combinaisons dans l'ensemble  $V$  des nœuds.

### Graphe simple ou multigraphe

Les graphes simples ainsi que les multigraphes ne possèdent pas de boucles, à la différence des pseudographes (Nous n'étudierons pas de pseudographes dans ce travail).

Les graphes simples se différencient des multigraphes par le fait que leur collection  $E$  est en fait un ensemble dénombrable. En d'autres termes  $E$  est une  $m$ -combinaison de flèches (cas orienté) parmi les  $n(n-1)$  possibles, respectivement d'arcs (cas non orienté) parmi les  $\frac{n(n-1)}{2}$  possibles. Pour un multigraphe  $m$  n'est pas limité, ainsi  $E$  peut contenir plusieurs fois le même lien, on parle alors ici de liens dont la multiplicité est supérieure à 1. Du fait de cette possible multiplicité,  $E$  est une collection dans le cas des multigraphes et pas un ensemble dénombrable.

#### 4.1.2 . Outils et méthodes de base pour l'étude des graphes

##### Adjacences et degrés des nœuds d'un graphe

Pour décrire un graphe et notamment les relations qui pourraient exister entre ses nœuds ou entre ses nœuds et les liens qui les connectent, il existe un certain nombre de définitions et d'observables assez pertinentes. Nous ne ferons qu'en effleurer la surface, ne citant que celles dont nous aurons besoin par la suite.

On dit que deux nœuds sont voisins si ils sont reliés par un lien et qu'un nœud est pendant

si il ne possède qu'un seul voisin. Dans le cas d'un graphe  $G(V, E)$  orienté, une flèche donnée  $e = (v_i, v_j)$  dont l'incidence est orientée de  $v_i$  vers  $v_j$  définit  $v_i$  comme étant le prédécesseur de  $v_j$  et donc  $v_j$  comme étant le successeur de  $v_i$ .

De façon plus générale lorsque l'on décrit le voisinage d'un nœud avec un ensemble de nœuds, on parle de son adjacence. Soit  $G(V, E)$  un graphe, un ensemble de nœuds  $U \subset V$  et un nœud  $v \in V$  alors :

$$\text{Si } \forall v_j \in U, v \text{ est un voisin de } v_j \text{ alors } v \text{ est un nœud adjacent à } U. \quad (4.9)$$

**exemple :** Sur la (Fig.4.2), le graphe  $G(V, E)$  est d'ordre  $Card(V) = 8$ , le nœud  $c$  est adjacent au sous-ensemble de nœuds  $U = \{a, b, d, e\} \subset V$ .

On définit alors  $deg(v)$  le degré d'un nœud  $v \in V$  du graphe  $G(V, E)$  comme étant le nombre de nœuds que compte son voisinage ou en d'autres termes :

$$deg(v) = Card(U) = \text{la cardinalité de l'ensemble } U \text{ dont } v \text{ est adjacent} \quad (4.10)$$

Dans le cas d'un graphe  $G(V, E)$  orienté, suivant les orientations de l'incidence des flèches entre un nœud  $v \in V$  et ses nœuds voisins  $v_j \in U$  on définit  $deg_+(v)$  le demi-degré extérieur et  $deg_-(v)$  intérieur de  $v$  tels que :

$$deg_+(v) = Card(U_+), \text{ avec } U_+ \text{ l'ensembles des noeuds } v_j \mid \exists (v, v_j) \in E \quad (4.11)$$

$$deg_-(v) = Card(U_-), \text{ avec } U_- \text{ l'ensembles des noeuds } v_j \mid \exists (v_j, v) \in E \quad (4.12)$$

$$deg(v) = deg_+(v) + deg_-(v), \text{ en effet } U_+ = U \setminus U_- \quad (4.13)$$

**exemple :** Sur la (Fig.4.2), le nœud  $c$  est adjacent au sous-ensemble de nœuds  $U = \{a, b, d, e\} \subset V$ , duquel il est la queue de 2 flèches et à la tête de 3 autres. Ainsi  $deg_+(v) = 2$  et  $deg_-(v) = 3$  et bien sûr  $deg(v) = 5$

Ainsi on dit d'un graphe  $G(V, E)$  qu'il est  $d$ -régulier si :

$$\forall v \in V, deg(v) = d \quad (4.14)$$

Il est à noter que la somme des degrés des nœuds d'un graphe  $G(V, E)$  est donné par la relation suivante :

$$\sum_{v \in V} deg(v) = 2 \cdot Card(E) \quad (4.15)$$

et que l'on note la valeur maximale du degré des nœuds composant un graphe  $G(V, E)$  :

$$\Delta(G) = \max_{v \in V} \{deg(v)\} \quad (4.16)$$

## Chaîne, cycle et chemin de liens

Soit  $G(V, E)$  un graphe, on définit une chaîne comme la suite  $(\underbrace{e_1, \dots, e_q}_q)$  de  $q \in \mathbb{N}^*$  liens  $\forall k \in [1, q], e_k \in E$  tel que n'importe quel lien  $e_{k+1}$  qui succède donc au lien  $e_k$  dans la suite, partage un nœud  $v \in V$  avec le lien  $e_k$ , peu importe sont orientation, dit plus formellement :

$$\forall k \in [1, q - 1], \exists v \in V \mid v \in e_k \cap e_{k+1} \quad (4.17)$$

Une chaîne  $(e_1, \dots, e_q)$  est dite simple, si elle ne parcourt pas deux fois le même lien  $e$  sur son trajet :

$$\forall (i, j) \in \llbracket 1, q \rrbracket^2, i \neq j, e_i \neq e_j \quad (4.18)$$

Une chaîne  $(e_1, \dots, e_q)$  est dite élémentaire, si elle ne rencontre pas deux fois le même nœud  $v$  sur son trajet :

$$\forall (i, j, k) \in \llbracket 1, q \rrbracket^3, i \neq j \neq k \neq i, \nexists v \in V \mid v \in e_i \cap e_j \cap e_k \quad (4.19)$$

La définition d'un cycle correspond à celle d'une chaîne simple (4.18) à l'exception faite que dans la suite  $(e_1, \dots, e_q)$  les liens  $e_1$  et  $e_q$  doivent partager un nœud commun  $v_f$  pour que la chaîne se referme sur elle-même. Aussi un cycle élémentaire est une chaîne élémentaire qui se referme sur un nœud  $v_f$  qui sera le seul des nœuds visité par la chaîne à l'être deux fois.

$$\text{cycle} \iff \text{chaîne simple} \mid \exists v_f \in V, v_f \in e_1 \cap e_q \quad (4.20)$$

$$\text{cycle élémentaire} \iff \text{chaîne élémentaire} \mid \exists! v_f \in V, v_f \in e_1 \cap e_q \quad (4.21)$$

**exemple :** Sur la (Fig.4.2) la suite de liens  $(1, 2, 3, 4, 7, 6, 9, 8)$  et  $(1, 2, 4, 5)$  pourraient constituer des chaînes simples du graphe tandis que seulement  $(1, 2, 4, 5)$  serait une chaîne élémentaire. De même la suite de liens  $(1, 2, 4, 5, 6, 7, 8)$  et  $(1, 2, 4, 5, 9)$  pourraient constituer des chaînes simples du graphe alors que seulement  $(1, 2, 4, 5, 9)$  serait un cycle élémentaire.

Soit  $G(V, E)$  un graphe orienté, on définit un chemin comme la suite  $\underbrace{(e_1, \dots, e_q)}_q$  de  $q \in \mathbb{N}^*$

flèches  $\forall k \in \llbracket 1, q \rrbracket, e_k \in E$  tel que n'importe quelle flèche  $e_{k+1}$  qui succède à la flèche  $e_k$  dans la suite, partage un nœud  $v \in V$  avec la flèche  $e_k$  de telle sorte que  $v$  soit la tête de la flèche  $e_k$  et la queue de la flèche  $e_{k+1}$ , dit plus formellement :

$$\forall k \in \llbracket 1, q - 1 \rrbracket, \exists v \in V \mid e_k = (u, v) \ \& \ e_{k+1} = (v, w), \text{ avec } (v, w) \in V^2 \quad (4.22)$$

**exemple :** Sur la (Fig.4.2) la suite de liens  $(2, 3, 5, 6, 7, 8)$  pourrait constituer un chemin simple du graphe.

On définit la longueur d'une chaîne ou d'un chemin comme étant le nombre de liens qui la ou le constituent.

$$\text{Card}(\underbrace{(e_1, \dots, e_q)}_q) = q = \text{la cardinalité de la séquence } \underbrace{(e_1, \dots, e_q)}_q \quad (4.23)$$

## Matrices associées à un graphe

Les graphes et notamment ce que l'on va étudier par la suite, développent des arborescences bien plus complexes que l'exemple d'illustration (Fig.4.2). Afin de répertorier facilement la complexité des différentes connexions qui composent un graphe, il existe 4 matrices dépendante les unes des autres :  $B$  la matrice d'incidence,  $A$  la matrice d'adjacence,  $L$  la matrice laplacienne et  $D$  la matrice des degrés.

Soient  $G(V, E)$  un graphe,  $n = \text{Card}(V)$  l'ordre du graphe et  $m = \text{Card}(E)$  la cardinalité de l'ensemble des liens on définit :

Sa matrice d'incidence  $B$  comme une matrice  $n \times m$  telle que :

$$B_{i,j} = \begin{cases} -1 & \text{si le nœud } v_i \text{ est la queue de la flèche } e_j \\ +1 & \text{si le nœud } v_i \text{ est la tête de la flèche } e_j \\ +1 & \text{si le nœud } v_i \text{ est relié à l'arc } e_j \\ \sqrt{2} & \text{si le lien } e_j \text{ est une boucle sur le nœud } v_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.24)$$

**exemple :** Soit le graphe de la (Fig.4.2) sa matrice incidente est la suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \sqrt{2} & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sa matrice d'adjacence  $A$  comme une matrice carrée symétrique  $n \times n$  telle que :

$$A_{i,j} = m_{i,j}, \text{ la multiplicité des liens entre le nœud } v_i \text{ et le nœud } v_j \quad (4.25)$$

**exemple :** Soit le graphe de la (Fig.4.2) sa matrice d'adjacence est la suivante :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sa matrice des degrés  $D$  comme une matrice carrée diagonale  $n \times n$  telle que :

$$D_{i,j} = \begin{cases} deg(v_i) & \text{si } i=j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.26)$$

**exemple :** Soit le graphe de la (Fig.4.2) sa matrice des degrés est la suivante :

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sa matrice laplacienne  $L$  comme une matrice carrée symétrique  $n \times n$  telle que :

$$\text{Si } G(V,E) \text{ est orienté alors : } L = D - A = B \cdot B^t \quad (4.27)$$

$$\text{Si } G(V,E) \text{ est non orienté alors : } L = D + A = B \cdot B^t \quad (4.28)$$

**exemple :** Soit le graphe de la (Fig.4.2) sa matrice laplacienne est la suivante :

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 5 & -2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

#### 4.1.3 . Liste non exhaustive de classes de graphes

##### Graphe complet

Soit  $G(V, E)$  un graphe, on dit de ce graphe qu'il est complet si pour toute paire de nœuds différents l'un de l'autre on est en mesure de trouver au moins un lien entre eux :

$$\forall (v_i, v_j) \in V^2 \mid v_i \neq v_j, \exists \{v_i, v_j\} \in E \quad (4.29)$$

**exemple :** Le sous graphe  $G(\{a, b, c\}, \{1, 2, 8\})$  engendré par le sous ensemble de nœuds  $\{a, b, c\}$  du graphe de la (Fig.4.2) est un sous graphe complet.

A présent on peut définir ce qu'est une clique. Une clique est un sous graphe complet  $G'(V', E_{V'})$  d'un graphe  $G(V, E)$  engendré par  $V'$ . D'ailleurs on nomme un graphe simple complet d'ordre  $Card(V) = n$  une  $n$ -clique, que l'on note  $K_n$  en hommage à Kazimierz Kuratowski. Il est important de ne pas confondre une clique avec un cycle définit plus haut dans la sous-section 4.1.2, seule les 3-clique sont aussi des cycles.

##### Graphe biparti

Soit  $G(V, E)$  un graphe, on dit de ce graphe qu'il est biparti si on peut définir deux sous ensembles  $(V_1, V_2) \subset V^2$  tels que  $V_1$  et  $V_2$  soient complémentaires l'un de l'autre dans  $V$  et que deux nœuds du même sous ensemble ne soient jamais voisins :

$$E = \{e_i\} \subseteq V_1 \times V_2 \mid V_2 = V \setminus V_1 \quad (4.30)$$

Un graphe biparti  $G(V, E)$  tel que  $Card(V_1) = p$  et  $Card(V_2) = q$  est dit complet si  $\forall (v_i, v_j) \in V_1 \times V_2, \exists e = (v_i, v_j)$ . On peut aussi appeler ce graphe biparti complet une  $pq$ -biclique, que l'on note  $K_{pq}$ .

## Graphe connexe

Soit  $G(V, E)$  un graphe, on dit de ce graphe qu'il est connexe si on peut définir pour n'importe quelle paire de nœuds une chaîne de liens entre eux, autrement dit :

$$\forall (v_i, v_j) \in V^2, \exists \underbrace{(e_1, \dots, e_q)}_q \in E^q \mid v_i \in e_1 \ \& \ v_j \in e_q \quad (4.31)$$

On définit le nombre de connexité d'un graphe comme étant le nombre minimum de sous graphes connexes (appelés aussi composantes connexes) nécessaires pour le couvrir. Par exemple sur la (Fig.4.2) le graphe n'est pas connexe et son nombre de connexité est 3.

## Graphe planaire

Soit  $G(V, E)$  un graphe, on dit de ce graphe qu'il est planaire si on peut le représenter à la surface d'un plan 2D de tel sorte que ses sommets puissent être des points distincts les uns des autres et que ses liens ne se croisent jamais entre eux à l'exception de là où ils s'attachent au nœuds. Par exemple le graphe représenté par la (Fig.4.2) est planaire.

Du plan 2D sur lequel repose le graphe planaire  $G(V, E)$ , on peut définir une face comme un sous ensemble ouvert, borné par des liens de  $G(V, E)$  de sorte que deux points appartenant à la face définissent un segment ne rencontrant ni nœud ni liens de  $G(V, E)$ . En somme les frontières d'une face sont toujours décrites par un cycle élémentaire (4.21). A ces faces se rajoute toujours une face externe qui dans le plan 2D est le sous ensemble complémentaire à l'union des autres faces. On dit de deux faces qu'elles sont adjacentes, si elles ont un lien en commun. En revanche on dit que celles-ci sont opposées, si elles ont seulement un nœud commun. Par exemple sur le graphe représenté sur la (Fig.4.2), ce dernier est composé de 6 faces en comptant la face externe  $F_{ext}$  et pour ne citer que la face  $F_1$ , celle-ci est opposée à  $F_2$  et  $F_3$  et adjacente à  $F_5$ .

Un théorème très important lorsque l'on traite un graphe planaire est le théorème d'Euler qui nous dit que si un graphe planaire connexe comporte  $n$  nœuds,  $m$  liens et  $f$  faces, alors :

$$n - m + f = 2 \quad (4.32)$$

**démonstration** : Nous pouvons démontrer ce théorème par récurrence. Prenons  $G(V, E_0)$  un graphe planaire connexe quelconque, comportant  $n$  nœuds,  $m_0$  liens et  $f_0$  faces, puis posons  $x = n - m_0 + f_0$  avec  $x$ , la valeur que nous chercherons à déterminer. A partir de  $G(V, E_0)$  on construit un graphe partiel  $G_1(V, E_1)$  tel que  $E_1 \subset E_0$  correspond à l'ensemble des liens  $E_0$  auquel on aurait retiré n'importe quel lien  $e$  sans que  $G_1(V, E_1)$  ne soit plus connexe. Cela aura pour conséquence de réduire d'une unité le nombre de liens et de faces, cependant  $x = n - m_1 + f_1$  reste invariant. On pourra répéter autant de fois cette opération jusqu'à obtenir un graphe partiel  $G_p(V, E_p)$  qui se résumera à un cycle élémentaire,  $x = n - m_{cycle} + f_{cycle}$  reste toujours invariant. Or un cycle d'ordre  $n$  est composé de  $m = n$  liens et de 2 face en comptant la face externe, d'où  $x = f = 2$ .

## 4.2 . Arbres et forêts

### 4.2.1 . Généralités sur les arbres et les forêts

#### Définitions d'un arbre et d'une forêt

Il existe plusieurs définitions équivalentes pour définir un arbre. La plus intuitive pourrait être qu'un arbre est un  $T(V, E)$  graphe simple connexe (4.31) dont l'ensemble de ses sous graphes auraient la particularité de ne pas être des cycles (4.20). Une forêt peut se définir comme un graphe simple non connexe  $T(V, E)$  dont chaque composante connexe (4.1.3) est un arbre ou alors un graphe simple non connexe  $T(V, E)$  dont l'ensemble de ces sous graphes auraient la particularité de ne pas être des cycles.

Ci-dessous les différentes définitions équivalentes d'un arbre.

$$T(V, E) \text{ est connexe \& l'ensemble de ces sous graphes ne sont pas des cycles} \quad (4.33)$$

$$\iff \text{l'ensemble de ces sous graphes ne sont pas des cycles \& } Card(E) = Card(V) - 1 \quad (4.34)$$

$$\iff T(V, E) \text{ est connexe \& } Card(E) = Card(V) - 1 \quad (4.35)$$

$$\iff \forall (v_i, v_j) \in V^2, \text{ il existe une unique chaîne reliant ces deux nœuds} \quad (4.36)$$

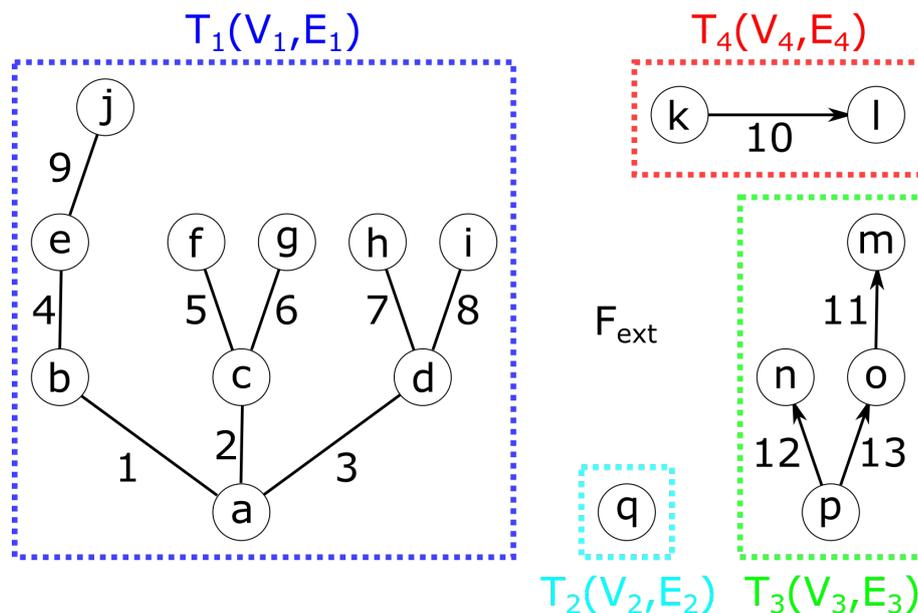


Figure 4.3 - Forêt quelconque composée des arbres  $T_1(V_1, E_1)$ ,  $T_2(V_2, E_2)$ ,  $T_3(V_3, E_3)$  et  $T_4(V_4, E_4)$  servant d'exemple aux différents concepts exposés dans la section 4.2

#### Quelques propriétés d'un arbre

Une propriété non triviale des arbres a déjà été citée plus haut. Soit un arbre  $T(V, E)$  d'ordre  $n = Card(V)$ , alors cet arbre est composé de  $Card(E) = n - 1$  liens. cette propriété

est une conséquence directe du théorème d'Euler (4.32). En effet tous les arbres sont une sous catégorie de graphe planaire composé d'une seule et unique face, la face externe d'où  $Card(E) = n - 1$ .

$$Card(E) = Card(V) - 1 \quad (4.37)$$

Une autre est que la somme des degrés des nœuds d'un arbre  $T(V, E)$  d'ordre  $n = Card(V)$  et donc par extension la moyenne sera d'après (4.15) :

$$\sum_{v \in V} deg(v) = 2(Card(V) - 1) \quad (4.38)$$

$$\langle deg(v) \rangle_{v \in V} = \frac{2(Card(V) - 1)}{Card(V)} \quad (4.39)$$

Ainsi le calcul du degré moyen d'un arbre importe peu ce qui compte c'est la distribution de ses degrés ce qui nous amène à une troisième propriété intéressante en ce qui concerne les degrés des nœuds d'un arbres. Soient un arbre  $T(V, E)$  d'ordre  $n = Card(V) \geq 2$  et de degré maximum  $K = \Delta(T)$  et  $\forall i \in \llbracket 1, K \rrbracket$ ,  $n_i$  correspond à la population des nœuds  $v \in V$  telle que  $deg(v) = k_i$ , on a alors la relation suivante liant ensemble les  $n_i$  :

$$n_1 = \sum_{i=3}^K (i - 2)n_i + 2 \quad (4.40)$$

**démonstration** : D'après (4.38) on peut écrire :

$$\begin{aligned} 2(Card(V) - 1) &= \sum_{v \in V} deg(v) = \sum_{i=1}^K i \cdot n_i \iff 2\left(\sum_{i=1}^K n_i - 1\right) = \sum_{i=1}^K i \cdot n_i \\ \iff \sum_{i=1}^K (i - 2)n_i + 2 &= 0 \iff n_1 - 0 = \sum_{i=3}^K (i - 2)n_i + 2 \end{aligned}$$

## Terminologies propres aux arbres

Les arbres sont donc des graphes particuliers et il existe un certain nombre de termes qui s'emploient exclusivement lorsque l'on veut décrire un arbre.

Soit  $T(V, E)$  un arbre, lorsque l'on choisit parmi l'ensemble de ces nœuds, un nœud  $v_r \in V$  comme racine de cet arbre, on dit que cet arbre est enraciné. Ce choix peut être arbitraire ou, ce qui est souvent le cas, pertinent pour le système que l'on tente de schématiser à travers ce graphe. Un arbre peut très bien ne pas être enraciné, cependant définir une racine permet de décrire plus aisément un arbre notamment (voir tableau ci-après) la hauteur de ses nœuds ainsi que la génération à laquelle ils appartiennent.

| Soit un arbre $T(V, E)$          |   |
|----------------------------------|---|
| Feuilles/Terminaisons            | Nœuds pendants (de degré 1).  |
| Nœuds internes                   | Nœuds de degré strictement supérieur à 1.   |
| Multifurcations                  | Nœuds de degré strictement supérieur à 2.   |
| Distance                         | La distance $\ v_i - v_j\ $ entre deux nœuds $v_i$ et $v_j$ , est la longueur de l'unique chaîne (4.36) qui les relie.  |
| Soit un arbre $T(V, E)$ enraciné |   |
| Hauteur                          | La distance $h(v) = \ v - v_r\ $ qui relie un nœud $v \in V$ à la racine $v_r$ de l'arbre.  |
| Génération                       | L'ensemble des nœuds $G_V(h) \subset V$ ayant la même hauteur $h$ . Autrement dit $G_V(h) = \{v \in V \mid h(v) = h\}$ .  |
| Fratrie                          | Ensemble de nœuds $V_f \subset G_V(h) \subset V$ ayant la même hauteur $h$ et tous adjacents aux mêmes nœuds $v_f \in V$ .  |
| Ancêtre                          | Nœud $v_a$ tel que $\exists V_a = \{v \in V \mid h(v) = h(v_a) + \ v - v_a\ \}$ . (Une génération $G_V(h)$ possède un unique ancêtre et donc la racine est l'ancêtre de tous les autres nœuds de l'arbre).                  |
| Père                             | Nœud $v_f$ adjacent à une fratrie, un sous ensemble de nœuds $V_f \subset G_V(h(v_f) + 1)$ . On peut le voir aussi comme l'ancêtre du sous ensemble de nœuds $V_f$ tel que $\ v - v_f\  = 1$ . (la racine n'a pas de père). |
| Descendant                       | Nœud $v_s \in V_a$ le sous-ensemble dont un nœud $v_a$ est l'ancêtre (la racine n'est la descendante d'aucun nœud).   |
| Fils                             | Nœud $v_s \in V_f$ le sous-ensemble dont un père $v_f$ est adjacent   |
| Branche                          | La chaîne simple (4.18) reliant un nœud $v \in V$ à un de ses descendant $v_d$ tel que $deg(v_d) = 1$ .   |
| Profondeur                       | La longueur d'une branche.  |

A ce stade il est intéressant de faire remarquer qu'à l'exception de la racine  $v_r \in V$  pour laquelle il n'existe pas d'ancêtre, le demi-degré intérieur (4.12) de l'ensemble des nœuds  $v \in V$  d'un arbre respecte la propriété suivante :

$$deg_-(v) = \begin{cases} 1 & \forall v \in V \setminus \{v_r\} \\ 0 & v = v_r \end{cases} \quad (4.41)$$

et donc directement d'après (4.41) et (4.13) :

$$deg(v) = \begin{cases} deg_+(v) + 1 & \forall v \in V \setminus \{v_r\} \\ deg_+(v) & v = v_r \end{cases} \quad (4.42)$$

Dit autrement à l'exception de la racine  $v_r \in V$  pour laquelle il n'existe pas d'ancêtre, un nœud  $v \in V \setminus \{v_r\}$  possède  $deg_-(v) = 1$  ancêtre et  $deg_+(v) \in \mathbb{N}$  fils.

## Représentation planaire d'un arbre

La représentation planaire d'un arbre dans le plan 2D est celle pour laquelle les liens de ce dernier ne se croisent jamais entre eux. On rappelle que par définition quelle que soit la nature d'un arbre, celui-ci pourra toujours être représenté dans le plan 2D et donc sera de fait

un "graphe planaire". Dès lors quel que soit l'arbre que nous serons amenés à représenter, il existera toujours au moins une représentation planaire de ce dernier dans le plan 2D.

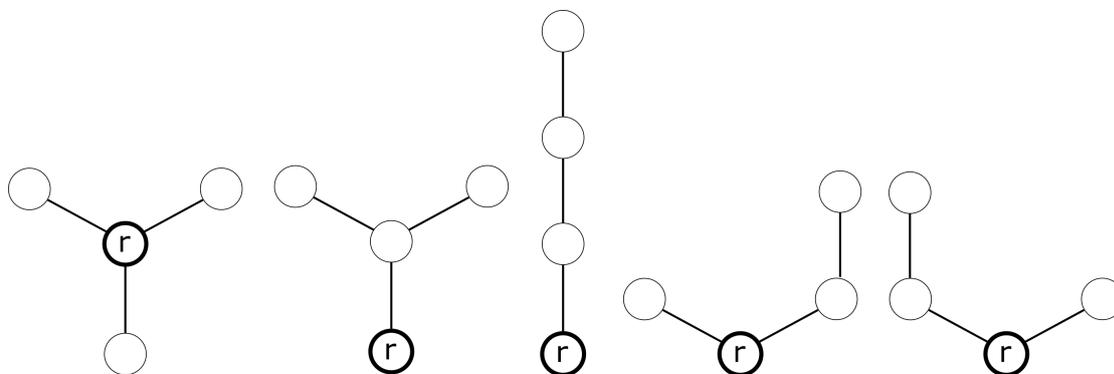


Figure 4.4 – Les cinq configurations possibles pour la représentation planaire des arbres enracinés comptant quatre nœuds au total. La racine de chacun de ces arbres est identifiée par l'étiquette  $r$ .

Soient  $C$  l'ensemble dénombrable regroupant l'infinité des représentations planaires possibles des arbres enracinés et  $C_{n+1}$  l'ensemble fini des représentations planaires des arbres enracinés composées de  $n + 1$  nœuds. Dès lors l'ensemble  $C_{n+1}$  compte un nombre fini d'arbres planaires égal au  $n^{me}$  nombre de Catalan, nommé en l'honneur du mathématicien Eugène Charles Catalan et définit tel que :

$$c_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n} = Card(C_{n+1}) \quad (4.43)$$

Sur la (Fig.4.4) ont été tracées les cinq configurations possibles pour la représentation planaire des arbres enracinés d'ordre quatre.

### Arbre ordonné

Précédemment lorsque l'on a défini ce qu'était un graphe dans la sous-section 4.1.1, nous avons dit que ce qui importait, était la manière avec laquelle les nœuds étaient reliés les uns avec les autres et ainsi sur la (Fig.4.1) on disait de ces deux graphes qu'ils étaient isomorphes. Dans le cas des arbres, cette assertion reste vraie, cependant il existe une catégorie d'arbres enracinés, les arbres ordonnés, pour lesquels les ordres choisis pour parcourir leurs nœuds en partant de leurs racines seront imposés. Ainsi arrivé aux abords d'une multifurcation, on sera en mesure de distinguer suivant l'ordre des nœuds choisi au préalable pour un arbre, quel est le  $i^{me}$  fils d'un père. Sur la (Fig.4.5), a été représenté un arbre  $T(V, E)$  ordonné suivant deux parcours différents, dans les deux cas ces ordres suivent la numérotation des liens  $E$ . Par la suite dans la sous-section 4.2.2, nous serons amenés à définir des conventions afin d'ordonner un arbre enraciné et nous verrons que cela aura des conséquences non négligeables au moment d'analyser un graphe. Or sur la (Fig.4.5) ces deux parcours sont ce que l'on appellera des parcours en largeur de l'arbre  $T(V, E)$ .

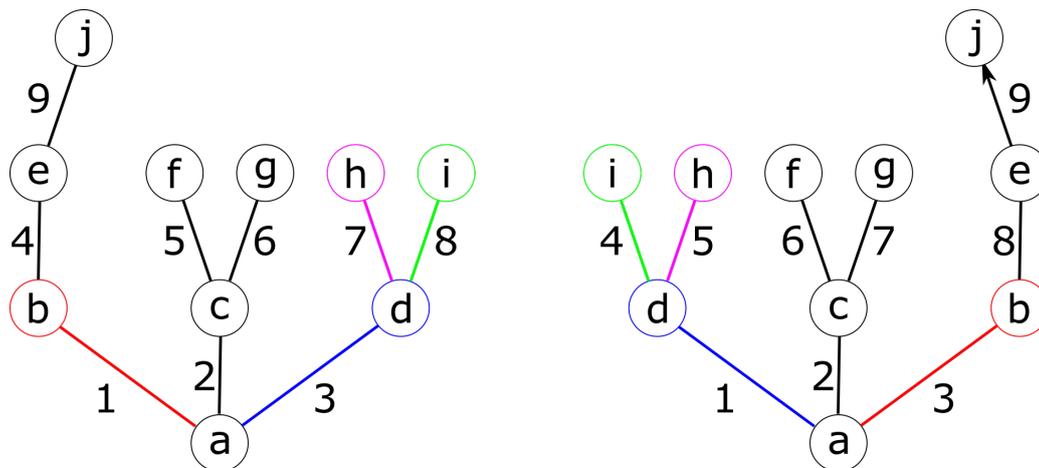


Figure 4.5 – Illustration d’un arbre qui aura été ordonné de deux manières différentes. Pour chacune des deux, l’ordre suit la numérotation de ses liens.

### Arbre binaire

Un arbre binaire est un arbre enraciné pour lequel chacun de ses nœuds est soit une feuille soit un nœud interne père d’exactement deux fils.

Soient  $T(V, E)$  un arbre binaire,  $V_{int} \subset V$  l’ensemble de ses nœuds internes et  $V_{ext} \subset V$  l’ensemble de ses feuilles. Des propriétés remarquables de cette arbre sont que :

$$Card(V_{ext}) = Card(V_{int}) + 1 \quad (4.44)$$

et donc directement d’après (4.44) :

$$Card(V) \text{ est toujours impaire} \quad (4.45)$$

**démonstration** : Ces deux propriétés sont elles mêmes la conséquence de la propriété (4.40) dans le cas d’un arbre binaire où  $K = \Delta(T) = 3$ . Ainsi on obtient donc d’après (4.40)  $n_1 = n_3 + 2$ . Or  $V_{int} = \{v \mid deg_+(v) = 2\}$  et  $V_{ext} = \{v \mid deg_+(v) = 0\}$ ; ainsi d’après (4.42)  $Card(V_{int}) = n_3 + Card(\{v_r\}) = n_3 + 1$  et  $Card(V_{ext}) = n_1$  et donc  $n_1 = n_3 + 2 \iff Card(V_{ext}) = Card(V_{int}) + 1$

On définit  $B$  comme étant l’ensemble des arbres binaires existant, soit une infinité et  $B_k$  l’ensemble des arbres binaires comptant  $k$  nœuds internes qui lui est composé d’un nombre fini d’arbres. Ce nombre de nouveau est un nombre de Catalan, en l’occurrence le  $k^{me}$  :

$$c_k = \frac{1}{k+1} \binom{2k}{k} = Card(B_k) \quad (4.46)$$

#### 4.2.2 . Outils et méthodes de base pour l’étude des arbres et des forêts

##### Notation de Neveu

Il existe une notation, appelée notation de Neveu [84], qui permet de décrire de façon univoque l’agencement des nœuds d’un arbre enraciné. Ainsi  $\forall v \in V \setminus \{v_r\}$  un nœud d’une

hauteur donné  $h(v) > 0$  d'un arbre  $T(V, E)$ ; sa notation de Neveu est définie par une suite d'entiers, pour laquelle chacun de ses  $h(v) - 1$  premiers termes correspond à la position de l'un des  $h(v) - 1$  ancêtres de ce nœud au sein de sa fratrie, tandis que le dernier lui renvoie à la position dans sa fratrie du nœud lui-même. Lorsque le nœud que l'on cherche à indexer est  $v_r$  la racine de l'arbre alors sa notation de Neveu se résume à  $\emptyset$ .

$$\forall v \in V, v := \begin{cases} \underbrace{(i, j, \dots, k, l)}_{h(v)} \in (\mathbb{N}^*)^{h(v)} & \text{si } v \in V \setminus \{v_r\} \\ \emptyset & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.47)$$

**exemple :** Sur l'arbre  $T_1(V_1, E_1)$  de la (Fig.4.3), si on indexe la position des fils dans chaque fratrie de la gauche vers la droite, le nœud  $j$  aura pour notation  $(1, 1, 1)$  tandis que  $i$  lui aura pour notation  $(3, 2)$ .

Grâce à cette notation il sera donc très facile d'identifier qui est le plus proche ancêtre commun entre deux nœuds d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ . Ainsi  $\forall (v_1, v_2, v_a) \in V^3$  indexés  $v_a := \underbrace{(i, j, \dots, k)}_{h(v_a)}$ ,  $v_1 := \underbrace{(i_1, j_1, \dots, k_1, l_1, \dots)}_{h(v_1)}$ ,  $v_2 := \underbrace{(i_2, j_2, \dots, k_2, l_2, \dots)}_{h(v_2)}$  tels que  $h(v) < h(v_1) \leq h(v_2)$  et  $l_1 \neq 2$  :

Si  $(i_1, j_1, \dots, k_1) = (i_2, j_2, \dots, k_2) = (i, j, \dots, k)$  alors  $v_a$  sera le plus proche ancêtre commun des nœuds  $v_1$  et  $v_2$ .

Sinon si  $(i_1, j_1, \dots, k_1) \neq (i_2, j_2, \dots, k_2)$  alors la racine de l'arbre  $T(V, E)$  constituera le plus proche ancêtre commun des nœuds  $v_1$  et  $v_2$ .

## Parcours en profondeur et en largeur d'un arbre enraciné

L'ensemble de ses suites ou notation de Neveu pour chacun des nœuds d'un arbre  $T(V, E)$  forment alors aussi une suite dont l'ordre définira un certain type de parcours de l'arbre.

L'ordre lexicographique, c'est à dire celui que l'on choisit pour ranger les mots dans un dictionnaire, ici les mots étant une suite de nombres finis, permet de parcourir n'importe quel arbre enraciné en profondeur. Sur l'arbre  $T_1(V_1, E_1)$  de la (Fig.4.3), cela donnerait la suite de mot dans l'ordre suivant  $(\emptyset, (1), (1,1), (1,1,1), (2), (2,1), (2,2), (3), (3,1), (3,2))$  qui correspond à ordonner les étiquettes alphanumériques des nœuds de l'ensemble  $V_1$  telles que  $(a, b, e, j, c, f, g, d, h, i)$ .

On peut aussi choisir de visiter les mots par ordre croissant du nombre de lettres qui les composent. On parle ici de parcours en largeur. Sur l'arbre  $T_1(V_1, E_1)$  de la (Fig.4.3), cela donnerait la suite de mots dans l'ordre suivant  $(\emptyset, (1), (2), (3), (1,1), (2,1), (2,2), (3,1), (3,2), (1,1,1))$  qui correspond à  $(a, b, c, d, e, f, g, h, i, j)$ .

## Marche de Harris

Soit un arbre enraciné  $T(V, E)$  orienté à partir de son nœud racine  $r$  en direction de ses feuilles. On appelle marche de Harris  $C(v)$  associée à l'arbre  $T(V, E)$ , le processus de contour

qui consiste à suivre un parcours en profondeur des branches de l'arbre  $T(V, E)$  et ainsi tracer la hauteur  $h(v_i)$  de chacun des nœuds  $v_i \in V$  rencontrés [37]. Durant cette marche lorsque l'on atteint une feuille de l'arbre  $T(V, E)$ , on ne retourne pas directement à la multifurcation qui est son ancêtre mais on parcourt un à un les nœuds de la branche de ces ancêtres jusqu'à la multifurcation. Ainsi un nœud  $v$  sera visité autant de fois que la valeur  $deg_+(v) + 1$  (4.11). Une valeur qui à l'exception de la racine  $v_r \in V$ , n'est autre que la valeur du degré d'un nœud  $v \in V$  d'un arbre d'après (4.42).

La longueur de ce processus de contour  $C(v)$  vaut donc d'après (4.38)  $\sum_{v \in V} deg(v) = 2(Card(V) - 1)$  et s'annule  $deg_+(v_r) + 1$  fois. De plus entre deux pas d'une marche de Harris, la valeur  $C(v)$  peut évoluer de  $\pm 1$  et  $v \in V$ ,  $C(v) \geq 0$ .

Il existe au moins une marche de Harris pour un arbre cependant celle-ci n'est pas forcément unique voire rarement. En effet selon la convention qui sera choisie au moment de franchir les multifurcations de l'arbre  $T(V, E)$  tout au long de son parcours en profondeur, la marche pourra avoir un aspect différent. Par exemple dans la (Fig.4.6) si on avait choisi d'emprunter le lien 2 avant le lien 1 lors du parcours en profondeur, on aurait obtenu une marche symétriquement identique à celle que l'on a représenté. Pour autant ce défaut d'unicité peut être facilement évacué si l'on décide qu'un arbre est ordonné. En effet nous avons commencé à l'évoquer au moment de définir ce qu'était un arbre ordonné dans la sous-section 4.2.1. En choisissant par exemple la convention selon laquelle pour une représentation planaire donnée d'un arbre ordonné, l'ordre d'une fratrie suit le sens horaire en fonction de leur position par rapport au nœud père; alors il existera une seule et unique marche dont le parcours respectera cet ordre. En l'occurrence c'est cette convention que nous avons choisi dans la Fig.4.6 et qui en général sera choisie la majeure partie du temps. Pour une convention donnée il existe donc une bijection entre une marche de Harris et l'arbre qui lui est associé. Dans l'ouvrage "Combinatorial stochastic processes" de Jim Pitman [90] une démonstration est donnée dans § 6.3.

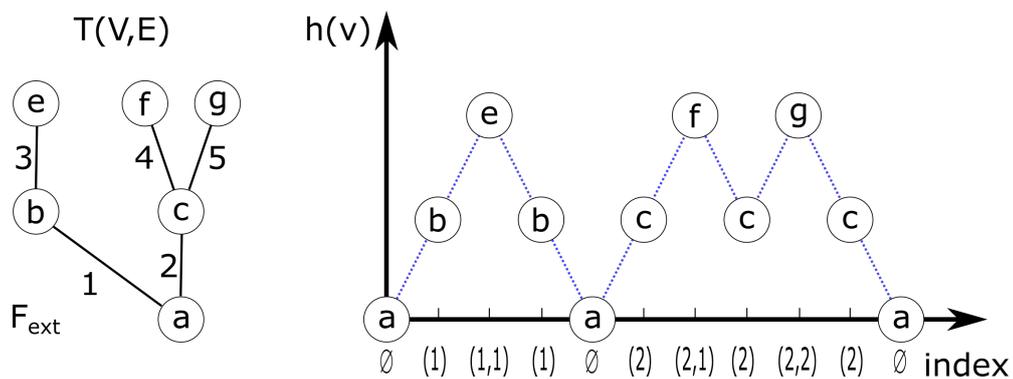


Figure 4.6 – Illustration d'une marche de Harris (droite) de l'arbre  $T(V, E)$  (gauche)

#### 4.2.3 . Arbres aléatoires

##### Définition

Soit  $\mathcal{T}$  un ensemble d'arbres donné défini comme l'univers de l'espace probabilisable  $(\mathcal{T}, \mathcal{A})$  formant l'espace probabilisé  $(\mathcal{T}, \mathcal{A}, \mathbb{P})$  mesuré par la loi de probabilité  $\mathbb{P}$ . Soit un arbre

$T(V, E) \in \mathcal{T}$ , cet arbre est un arbre aléatoire défini par l'espace probabilisé  $(\mathcal{T}, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ . Dans le cas où la loi de probabilité  $\mathbb{P}$  est uniforme alors on dit que  $\mathcal{T}$  est un ensemble d'arbres uniformes de cet espace probabilisé.

L'ensemble  $\mathcal{T}$  peut être l'ensemble des arbres ordonnés composé de  $n$  nœuds ou encore l'ensemble des arbres binaires comptant  $k$  nœuds internes. Mais avant cela définissons un cas assez particulier d'arbres aléatoires qui aura souvent un rôle à jouer lorsque l'on aura à en définir d'autres.

## Arbre de Galton-Watson

Un arbre de Galton-Watson [84] est un arbre enraciné  $T(V, E)$  pour lequel durant sa construction, chacun de ses nœuds  $v_i \in V$  aura donné naissance à un nombre de fils  $deg_+(v_i)$  (4.42) défini par une variable aléatoire  $A_i$  suivant une loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  et tel que l'ensemble de ces variables aléatoires  $A_i$  soient indépendantes et identiquement distribuées (iid). On définit  $\forall k \in \mathbb{N}$ ,  $p(k)$  la fonction de masse de la loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$ . Ainsi le processus de Galton-Watson est donc une chaîne de Markov, nous reviendrons sur cette particularité par la suite.

Une manière de représenter ces arbres particuliers est de réaliser une marche de Harris représentée sur la (Fig.4.6). Or dans le cas où  $\mathbb{P}_A$  est une loi géométrique, il existe une propriété remarquable telle que :

$$\begin{aligned} \text{Un processus de Galton-Watson suit une loi géométrique } \mathbb{P}_A \text{ de paramètre } p \\ \iff \end{aligned} \tag{4.48}$$

La marche de Harris associé à cet arbre de Galton-Watson est une  
marche aléatoire simple à 1D de paramètre  $p$

Or il serait plus juste de parler d'une "excursion aléatoire" qui à l'instar des excursions browniennes diffuse dans  $\mathbb{R}^+$ , en l'occurrence ici  $\mathbb{N}$

### démonstration :

On démontrera la condition nécessaire étant donné que par la suite nous travaillerons toujours à partir d'un arbre aléatoire existant.

On définit une variable aléatoire  $x_j$  suivant une loi de Bernoulli  $\mathbb{P}_x$  de paramètre  $p \in ]0, 1[$  (c'est à dire de probabilité de succès  $p$ ) telle que  $x_j = \begin{cases} +1 & \text{si succès} \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$ . On rappelle que l'on peut définir une variable aléatoire  $A_i = \sum_j \frac{x_j+1}{2}$  suivant une loi géométrique  $\mathbb{P}_A$  de paramètre  $p \in ]0, 1[$  comme étant le nombre d'épreuves de Bernoulli indépendantes de paramètre  $p$  nécessaire avant d'obtenir le premier échec; et une variable aléatoire  $B(n) = \sum_{j=1}^n \frac{x_j+1}{2}$  suivant une loi binomiale  $\mathbb{P}_B$  de paramètre  $(n, p)$  comme étant le nombre d'épreuves de Bernoulli indépendantes de paramètre  $p \in ]0, 1[$  ayant obtenu un succès parmi  $n$  tentatives.

On rappelle aussi qu'une marche aléatoire  $X(n)$  de pas  $\pm 1$  peut être vue comme le processus markovien défini tel que  $X(j+1) = X(j) + x_{j+1}$  avec  $x_j$  des variables aléatoires iid suivant une loi de Bernoulli  $\mathbb{P}_x$  de paramètre  $p \in ]0, 1[$ . Ainsi la position  $X(n)$  à l'instant  $n$  d'une marche aléatoire de pas  $\pm 1$  est une variable aléatoire définie telle que  $X(n) = B(n) - (n - B(n)) = 2B(n) - n$  avec  $B(n)$  une variable aléatoire suivant une loi binomiale de paramètre  $p \in ]0, 1[$ .

Dans le cas d'un processus de Galton-Watson les variables aléatoires  $A_i$  iid suivant une loi géométrique  $\mathbb{P}_A$  de paramètre  $p \in ]0, 1[$ , définissent la taille des fratries dont chacun des nœuds  $v_i$  de l'arbre  $T(V, E)$  sont pères. Ainsi la probabilité de succès  $p$  correspond à la probabilité pour un père  $v_i$  à un instant  $n$  donné de compter un fils supplémentaire, alors que  $q = 1 - p$  renvoie à la probabilité de ne plus avoir de fils. Or un instant  $n$  peut être défini comme une étape de la marche de Harris associée à l'arbre  $T(V, E)$  (voir sous-section 4.2.2). Ainsi  $J_i \subset \llbracket 1, n \rrbracket$  correspond au sous-ensemble d'instant  $j$  pour lesquels le nœud  $v_i$  a été visité et donc  $A_i = \sum_{j \in J_i} \frac{x_j + 1}{2}$ .

Étant donné que les  $A_i$  sont iid suivant la loi géométrique  $\mathbb{P}_A$  de paramètre  $p$ , alors  $\forall j \in \llbracket 1, n \rrbracket$ , les  $x_j$  sont iid suivant la loi de Bernoulli  $\mathbb{P}_x$  et donc la marche de Harris est la marche aléatoire  $X(n)$  de pas  $\pm 1$  définie telle que  $X(j + 1) = X(j) + x_{j+1}$

### Arbre ordonné aléatoire

Un arbre ordonné aléatoire d'ordre  $n$  est un arbre ordonné  $T(V, E) \in \mathcal{T}$  avec  $\mathcal{T}$  l'ensemble des arbres ordonnés d'ordre  $n$  défini comme l'univers de l'espace probabilisé  $(\mathcal{T}, \mathcal{A}, \mathbb{P})$ .

Or si  $\mathbb{P}$  est une loi uniforme alors ces arbres sont équivalents aux mêmes arbres qui seraient construits à partir d'un processus de Galton-Watson conditionné à atteindre  $n$  nœuds et pour lequel la loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  est une loi géométrique de paramètre  $p = \frac{1}{2}$ . Dans l'ouvrage "Random Trees : An Interplay between Combinatorics and Probability" de Michael Drmota [19] une démonstration est donnée dans § 1.2.7. On parle alors d'arbre ordonné uniforme.

### Arbre binaire aléatoire

Un arbre binaire aléatoire d'ordre  $n = 2k + 1$  est un arbre binaire  $T(V, E) \in \mathcal{T}$  avec  $\mathcal{T}$  l'ensemble des arbres binaires d'ordre  $n$  défini comme l'univers de l'espace probabilisé  $(\mathcal{T}, \mathcal{A}, \mathbb{P})$

Or si  $\mathbb{P}$  est une loi uniforme alors ces arbres sont équivalents aux mêmes arbres qui seraient construits à partir d'un processus de Galton-Watson conditionné à atteindre  $k$  nœuds et pour lequel la loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  est une loi binomiale de paramètre  $p = \frac{1}{2}$  et  $n = 2$ . Dans l'ouvrage "Random Trees : An Interplay between Combinatorics and Probability" de Michael Drmota [19] une démonstration est donnée dans § 1.2.7. On parle alors d'arbre binaire uniforme.

### Processus de branchements markoviens

Précédemment nous avons dit que les arbres de Galton-Watson étaient le fruit d'un processus qui était une chaîne de Markov. En effet ces arbres sont décrits par un processus de branchement discret soumis à une loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  gouvernant des variables aléatoires  $A_i$  iid par cette loi définissant le nombre d'embranchements qui composent ces multifurcations. Ainsi l'appellation processus de Galton-Watson est homologue à celle de processus de branchement markovien discret.

Un propriété intéressante de ces processus de branchements discrets est que quelle que soit la loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  définissant le nombre aléatoire d'embranchement d'une multifurcation, la fréquence avec laquelle ces multifurcations apparaissent suit toujours une loi géométrique.

**démonstration** : Soient  $p = \mathbb{P}_A(A_i \neq 1)$  la probabilité qu'il y ait l'apparition d'une multifurcation ou d'une terminaison à cet instant du processus et  $q = \mathbb{P}_A(1)$  la probabilité qu'il n'y en ait pas définissant l'évènement complémentaire ( $p + q = 1$ ). Ainsi automatiquement d'après la définition d'une loi géométrique, quelle que puisse être la nature de  $\mathbb{P}_A$ , la loi de probabilité gouvernant l'apparition d'une multifurcation ou d'une terminaison que l'on pourrait baptiser  $\mathbb{P}_l$ , est une loi géométrique de paramètre  $p = \mathbb{P}_A(A_i \neq 1)$ .

Il existe aussi des processus de branchements continus pour lesquels cette fois-ci la fréquence des multifurcations dépend d'une loi  $\mathbb{P}_l$ , tandis que la loi  $\mathbb{P}_A$ , elle, gouverne le nombre de divisions d'une multifurcation. Dans le cas où la loi  $\mathbb{P}_l$  est une loi exponentielle indépendante de la loi  $\mathbb{P}_A$  ce processus de branchements continus est markovien. En effet on rappelle que la loi exponentielle est une version continue de la loi géométrique qui, elle, est discrète, cette loi permet de conserver donc le caractère markovien du processus de branchements continus. Dans le cas où  $\mathbb{P}_l$  est une loi quelconque différente d'une loi exponentielle on parle de processus de branchement de Bellman-Harris et ce processus n'est évidemment plus de Markov.

On note  $Z_h = \text{Card}(G_V(h))$  la taille de la génération  $G_V(h)$  d'une hauteur  $h$  donnée telle que  $Z_0 = 1$ .  $Z_0$  correspond au nombre de racine, autrement dit au nombre d'arbres composant la forêt fruit du processus de branchement, ici un. Si la loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  est iid alors le nombre moyen de fils  $m_i$  pour chacun des nœuds père  $v_i \in V$  est identique et vaut :

$$\forall v_i \in V, m_i = m = \sum_{k=1}^{+\infty} \mathbb{P}_A(k)k \quad (4.49)$$

Ainsi d'après la formule de Wald quelle que soit la génération  $G_V(h)$  sa taille moyenne  $\langle Z_h \rangle$  par la relation de récurrence :

$$\forall h \in \mathbb{N}^*, \langle Z_{h+1} \rangle = m \langle Z_h \rangle \quad (4.50)$$

et donc :

$$\forall h \in \mathbb{N}^*, \langle Z_h \rangle = m^h \quad (4.51)$$

Les processus de branchement peuvent alors être classifiés suivant trois régimes différents : sous-critique pour  $m < 1$ , critique pour  $m = 1$  et sur-critique pour  $m > 1$ . Dans ce travail nous ne rentrerons pas plus dans le détail pour ce qui est de ces processus.

### 4.3 . Hypergraphes

Les hypergraphes généralisent la notion de graphe non orienté. Ils ont été conceptualisés pour la première fois en 1961 par Claude Berge un mathématicien français.

#### 4.3.1 . Généralités sur les hypergraphes

##### Définition d'un hypergraphe

Précédemment, on avait défini les liens d'un graphe comme un singleton, une paire ou un couple d'au plus 2 nœuds (4.8-4.7). Un hypergraphe  $H(V, E)$  à l'instar d'un graphe est composé de nœuds et de liens, cependant ses liens sont des hyperliens et peuvent relier à présent

non plus seulement 2 nœuds, mais un sous-ensemble de  $p_i \in \llbracket 1, \text{Card}(V) \rrbracket$  nœuds  $V_i \subset V$  entre eux. Ainsi les graphes peuvent être vus comme une sous catégorie d'hypergraphes définis par une contrainte supplémentaire sur la nature des hyperliens qui composent leurs collections de liens  $E$ .

Soient  $H(V, E)$  un hypergraphe défini par le couple composé d'un ensemble de nœuds  $V$  et de la collection d'hyperliens  $E$  tels que :

$$V = \{v_i\}, \text{ avec } \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, v_i \text{ les } n \text{ nœuds de l'hypergraphe } H \quad (4.52)$$

$$E = \{e_i\}, \text{ avec } \forall i \in \llbracket 1, m \rrbracket, e_i \subset V^{\text{Card}(e_i)}, e_i \text{ les } m \text{ hyperliens de l'hypergraphe } H \quad (4.53)$$

**exemple :** Sur la (Fig.4.7) est représenté l'hypergraphe  $H(\{a, b, c, d, e, f, g, h\}, \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, \underbrace{\{a, b, c\}}_{11}, \underbrace{\{d, e, h\}}_{12}, \underbrace{\{c, e, f, g\}}_{13}\})$ . Nous avons délibérément choisi de reprendre le graphe cette fois ci non orienté de la (Fig.4.2) auquel on a rajouté les 3 hyperliens  $\{11, 12, 13\}$  afin de rappeler qu'un graphe est un hypergraphe. Ainsi ces hyperliens s'expriment comme des sous ensembles de  $\{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$

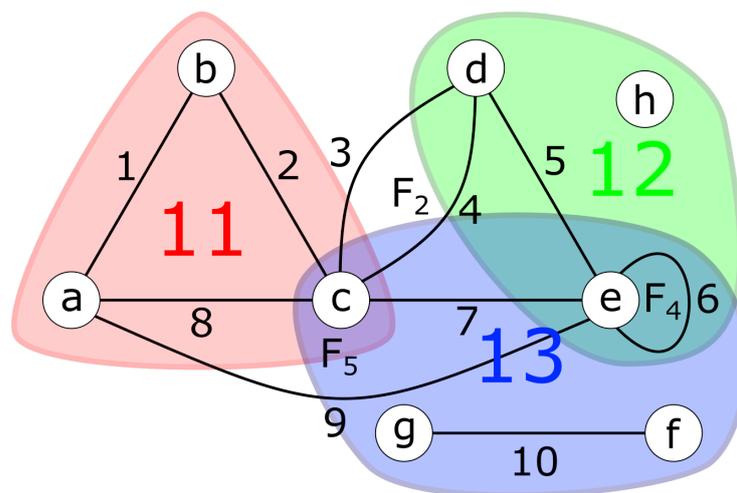


Figure 4.7 – Hypergraphe quelconque servant d'illustration pour les différents concepts exposés dans la section 4.3

L'ensemble des concepts cités dans les sections précédentes trouvent des définitions analogues dans le cas des hypergraphes, moyennant un certain travail. Dans le cadre de notre travail, nous nous concentrerons uniquement sur ceux dont nous aurons besoin par la suite.

### Hypergraphe orienté ou non orienté

Dans un hypergraphe orienté  $G(V, E)$ , les hyperliens sont des hyperflèches et pour une hyperflèche donnée  $e = (V_i, V_j), \forall (V_i, V_j) \subset V^2$  on dit que son incidence est orientée du sous-ensemble de nœuds  $V_i$  vers le sous-ensemble de nœuds  $V_j$ .  $V_i$  est la queue de l'hyperflèche alors que  $V_j$  correspond à sa tête.  $(V_j, V_i)$  serait l'hyperflèche inverse et mathématiquement

$(V_i, V_j)$  est un couple de sous-ensemble de  $V$ .

$$H(V, E) \text{ orienté, } \forall e \in E, e = (V_1, V_2), \text{ avec } (V_1, V_2) \subset V^2 \quad (4.54)$$

### 4.3.2 . Outils et méthodes de base pour l'étude des hypergraphes

#### Degrés et matrices associés à un hypergraphe

Le degré d'un nœud  $v$  dans un hypergraphe correspond désormais au nombre d'hyperliens dans lesquels on le retrouve. Dans le cas d'un graphe cette définition est bien sûr équivalente à celle définissant le degré d'un nœud comme étant le nombre de nœuds appartenant à son voisinage (4.10). Dans le cas d'un hypergraphe il n'y a plus d'équivalence entre ces deux définitions, ainsi on a choisi celle pour laquelle on peut conserver la propriété sur la valeur de la somme des degrés de l'ensemble des nœuds (4.15).

Les matrices d'incidence  $B$ , d'adjacence  $A$ , laplacienne  $L$  et de degrés  $D$  restent inchangées. La relation qui les relie (4.28) aussi seulement dans le cas où l'hypergraphe est non orienté

#### Rang d'un hypergraphe et de ses hyperliens

Le rang d'un hypergraphe  $H(V, E)$  ou d'un de ses hyperliens  $e \in E$  est un nouvel outil absent précédemment pour la description d'un graphe.

Le rang d'un hyperlien  $e \in E$  est défini comme le nombre de nœuds qu'il relie entre eux et donc :

$$\forall e \in E, \text{rank}(e) = \text{Card}(e) \quad (4.55)$$

Le rang d'un hypergraphe  $H(V, E)$  est égal au rang de l'hyperlien reliant le plus de nœuds de  $H(V, E)$  :

$$\forall e \in E, \text{rank}(H) = \max_{e \in E} \{\text{rank}(e)\} \quad (4.56)$$

Ainsi pour le rang de n'importe quel graphe  $G(V, E)$  vaut plus  $\text{rank}(G) = 2$

#### Graphe d'incidence d'un hypergraphe

Les hypergraphes peuvent devenir très difficiles à représenter à partir d'un certain niveau de complexité, à minima la représentation de l'orientation des hyperflèches l'est. Or il existe une bijection entre un hypergraphe  $H(V, E)$  et son graphe d'incidence ou graphe de Lévi  $L_H(V \cup E, E')$  ([91] § 1.9) qui est le graphe biparti (4.30) défini tel que :

Si  $H(V, E)$  est orienté alors :

$$E' = \{e'_k\} \subseteq V \times E, \text{ avec } e'_k = \begin{cases} (v_i, e_j) & \text{si } v_i \text{ est une queue de l'hyperlien } e_j \\ (e_j, v_i) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.57)$$

Si  $H(V, E)$  est non orienté alors :

$$E' = \{e'_k\} \subseteq V \times E, \text{ avec } e'_k = \{v_i, e_j\} \mid v_i \in e_j \quad (4.58)$$

En d'autres termes le graphe d'incidence d'un hypergraphe  $H(V, E)$  est le graphe biparti qui relie par les liens  $e'_k \in E'$  les nœuds  $v_i \in V$  aux hyperliens  $e_j \in E$  auxquels ils appartiennent.

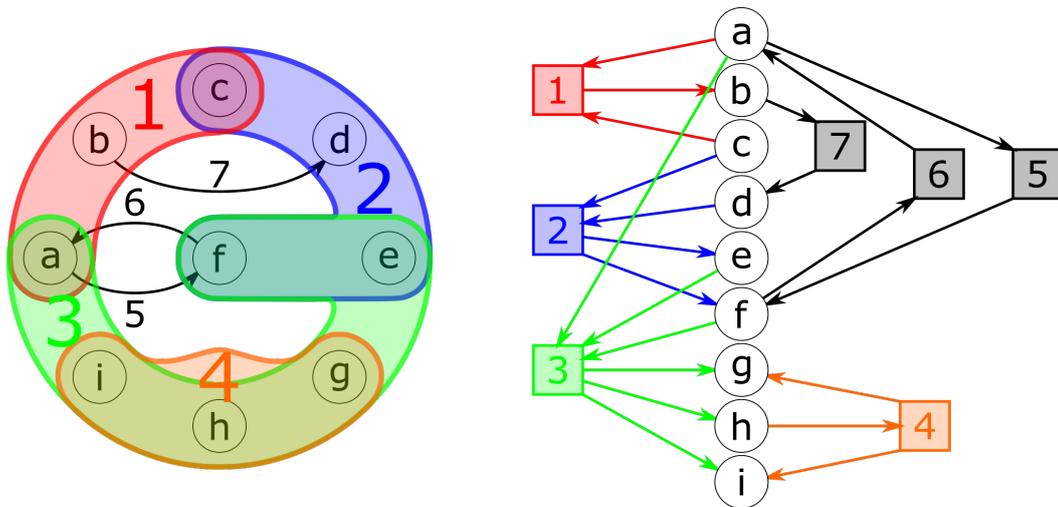


Figure 4.8 – Illustration d'un hypergraphe quelconque (gauche) et son graphe d'incidence (droite)

Ce qui rend d'autant plus remarquable ce graphe d'incidence, au delà d'être simplement un graphe qui caractérise complètement un hypergraphe donné, est qu'il partage un certain nombre de propriétés avec l'hypergraphe  $H(V, E)$  auquel il est associé :

$$H(V, E) \text{ est connexe} \iff L_H(V \cup E, E') \text{ est connexe} \quad (4.59)$$

$$H(V, E) \text{ est acyclique au sens de Berge} \iff L_H(V \cup E, E') \text{ est acyclique} \quad (4.60)$$

Ici on précise acyclique au sens de Berge car il existe dans la littérature d'autres définitions de l'acyclicité nous avons choisi celle définie par Claude Berge.

**exemple :** Sur la (Fig.4.8) à gauche est représenté l'hypergraphe  $H(\{a, b, c, d, e, f, g, h, i\}, \{\underbrace{\{a, c\}, \{b\}}_1, \underbrace{\{c, d\}, \{e, f\}}_2, \underbrace{\{a, e, f\}, \{g, h, i\}}_3, \underbrace{\{h\}, \{g, i\}}_4, \underbrace{(a, f)}_5, \underbrace{(f, a)}_6, \underbrace{(b, d)}_7\})$  et à droite son graphe d'incidence  $L_H(\{a, b, c, d, e, f, g, h, i, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}, \{(a, 1), (1, b), (c, 1), (c, 2), (d, 2), (2, e), (2, f), (2, e), (a, 3), (e, 3), (f, 3), (3, g), (3, i), (h, 3), (a, 5), (5, f), (f, 6), (6, a), (b, 7), (7, d), \})$ . Ainsi on remarque tout de suite que l'on peut obtenir très facilement l'orientation des hyperflèches grâce à l'orientation des flèches du graphe d'incidence. Il est à noter aussi que ce graphe d'incidence est connexe et comporte de nombreux cycles que l'on visualise assez aisément ; prenons par exemple le cycle  $((a, 5), (5, f), (2, f), (c, 2), (c, 1), (a, 1))$  cycle associé à "l'hypercycle"  $(5, 2, 1)$ , ou encore  $((b, 7), (7, d), (d, 2), (c, 2), (c, 1), (1, b))$  cycle associé à "l'hypercycle"  $(7, 2, 1)$ . Et donc d'après (4.59-4.60) cet hypergraphe est lui aussi connexe et comporte des cycles.

### Graphe hôte d'un hypergraphe

Un graphe hôte  $G_H(V, E')$  d'un hypergraphe  $H(V, E)$  est un graphe partageant le même ensemble de nœuds  $V$  et ayant aussi pour contrainte que pour chaque hyperlien  $e_k \in E$  correspond une composante connexe (4.1.3) dans le graphe hôte, reliant les nœuds  $v_i \in e_k$ .

Un exemple de graphe hôte est donné à travers la (Fig.4.9) pour cet hypergraphe. On aurait pu choisir de remplacer  $\{f, g\}$  par  $\{e, g\}$  dans l'ensemble des liens de ce graphe hôte qui nous aurait donné un autre graphe hôte tout à fait satisfaisant. Cependant supprimer  $\{b, d\}$  aurait eu pour conséquence de ne pas satisfaire l'obligation d'associer à chaque hyperlien, en l'occurrence ici l'hyperlien 7, une composante connexe.

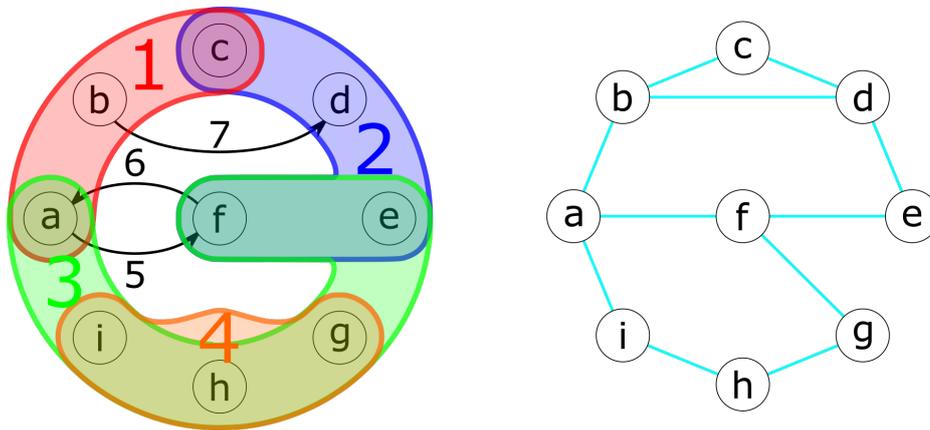


Figure 4.9 - Illustration d'un hypergraphe quelconque (gauche) et un de ses graphes hôtes (droite)

### Hyperarbre

Un hyperarbre est un hypergraphe pour lequel on peut trouver un graphe hôte qui soit un arbre. Ainsi d'après cette définition, un hyperarbre peut ne pas être acyclique au sens de Berge, cependant tout hypergraphe acyclique au sens de Berge est un hyperarbre.

## 5 - DLA : un processus de branchement fractale auto-affine

### 5.1 . DLA : modèle à l'origine de la création d'arbres aléatoires particuliers

#### 5.1.1 . DLA un processus générant des arbres enracinés du point de vue de la théorie des graphes

Nous allons constater dans la suite de notre travail que les structures dendritiques obtenues par la DLA [115] sont des cas particuliers d'arbres aléatoires vus dans la sous-section 4.2.3. Cependant attachons nous à montrer qu'en premier lieu ces structures dendritiques sont bel et bien des arbres enracinés du point de vue de la théorie des graphes. Comme cela a pu être détaillé dans la sous-section 3.1.1, lors d'un processus d'accrétion de type DLA, des particules libres diffusent dans un espace infini jusqu'à ce que chacune à leurs tours, ces dernières rencontrent et s'agrègent à d'autres particules d'ores et déjà fixées à la structure dendritique. Ainsi chaque particule fixée peut être assimilée à un nœud  $v \in V$  d'un graphe  $G(V, E)$  d'ordre  $N = \text{Card}(V)$  dont l'ensemble des liens  $E$  symboliserait toutes les accrétions entre les particules ayant eu lieu durant le processus. Or dans le cas d'un processus d'accrétion de type DLA hors réseau [55], chaque accrétion définit toujours la liaison d'une particule libre à une seule particule fixée au reste de la structure dendritique et donc  $\text{Card}(E) = \text{Card}(V) - 1$  (cette assertion devient fausse lorsque l'on utilise un algorithme DLA sur réseau ; on pourra alors choisir de désigner une particule fixée comme étant le siège de l'accrétion et ignorer les autres possibilités). Or d'après (4.35) étant donné que le graphe  $G(V, E)$  est évidemment connexe et que  $\text{Card}(E) = \text{Card}(V) - 1$ , alors c'est un arbre. De plus si on désigne la graine du processus d'accrétion de type DLA comme étant la racine de cet arbre (un choix plutôt cohérent au regard de la nature de la croissance de nos arborescences et que nous adopterons dans toute la suite de notre travail), alors  $G(V, E)$  est un arbre enraciné.

#### 5.1.2 . DLA un processus sans vieillissement

On rappelle la définition donnée dans la sous-section 4.2.3 pour décrire un processus de Galton-Watson. "Un arbre de Galton-Watson [84] est un arbre enraciné  $T(V, E)$  pour lequel durant sa construction, chacun de ses nœuds  $v_i \in V$  aura donné naissance à un nombre de fils  $\text{deg}_+(v_i)$  (4.42) défini par une variable aléatoire  $A_i$  suivant une loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  et telle que l'ensemble de ces variables aléatoires  $A_i$  soient indépendantes et identiquement distribuées (iid)." Dans le cas du processus d'accrétion de type DLA hors réseau, c'est une particule libre qui diffuse jusqu'à rencontrer et s'agréger à un nœud  $v_i \in V$  de la structure dendritique pouvant être décrite par un arbre enraciné  $T(V, E)$ . Cette particule libre devient ainsi à son tour un nœud  $v_j \in V$  de cet arbre enraciné  $T(V, E)$  lié au nœud  $v_i \in V$  par le lien  $e = (v_i, v_j) \in E$ .

Lors d'un processus d'accrétion de type DLA, la croissance de l'arbre se fait à l'instar d'un processus de Galton-Watson via une procédure itérative. Cependant à la différence de ce dernier qui à chaque itération définit via  $\mathbb{P}_A$  les nombres aléatoires  $A_i$  de fils que posséderont les pères

$v_i \in G_V(h)$  d'une génération donnée; le processus d'accrétion de type DLA, d'une itération à l'autre, peut venir faire croître la génération  $G_V(x)$  puis la génération  $G_V(y)$  pour revenir quelques itérations plus tard faire croître de nouveau la génération  $G_V(x)$ . Il n'y a aucune raison, voire cela est peu probable, qu'une génération  $G_V(x)$  soit complètement peuplée lors d'itérations successives.

Nous discuterons de l'existence ou non d'une loi de probabilité  $\mathbb{P}_A$  gouvernant les variables aléatoires  $A_i$  définissant les nombres de fils  $deg_+(v_i)$  des nœuds  $v_i \in V$  d'un arbre  $T(V, E)$  de type DLA. Mais à ce stade il est intéressant de définir  $\mathbb{P}_S$  la loi de probabilité pour une particule libre d'être lors de son accrétion sur un nœud, son 1<sup>er</sup>, son 2<sup>me</sup>, son 3<sup>me</sup> ou son 4<sup>me</sup> fils.

Sur la (Fig.5.3), la fonction de masse de la loi de probabilité  $\mathbb{P}_S$  est identique quelle que puisse être l'itération  $n$  durant laquelle aura lieu une accrétion. Qui plus est d'après la figure en bas à gauche de la (Fig.5.3) superposant les fonctions de masse de la probabilité  $\mathbb{P}_S$  pour différentes intensités  $F$  du champs de force; la loi de probabilité  $\mathbb{P}_S$  ne varie pas en fonction de l'intensité  $F$  du champ de force appliqué. En définitive  $\mathbb{P}_S$  est iid pour chacune des particules libres aux abords d'un arbre  $T(V, E)$  de type DLA. Ainsi le processus d'accrétion de type DLA est sans vieillissement, c'est à dire sans mémoire. Dès lors quelle que soit la taille de la structure dendritique, ou du point de vue des graphes quel que soit l'ordre de l'arbre enraciné qui lui est associé, une particule libre aux abords de cette arborescence observera toujours le même motif aléatoire localement là où aura lieu son accrétion. Ceci est constitutif de son caractère fractal.

### 5.1.3 . L'arbre de type DLA n'est pas un arbre de Galton-Watson

Sur la (Fig.5.1) lors d'un processus d'accrétion de type DLA pour un champ de force d'une intensité  $F$  donnée, la hauteur moyenne  $\langle h \rangle$  des particules en fonction de l'itération  $n$  croît selon une loi de puissance. Sur la (Fig.5 de [82]) est représenté un schéma sur lequel Nagatani illustre l'effet qu'a un champ de force radial uniforme sur la courbe faisant état de la distance moyenne à la graine pour des particules s'agrégeant aux différentes itérations  $n$  du processus d'accrétion de type DLA. Il nous explique par le biais de cette figure qu'aux premières itérations du processus d'accrétion quel que soit le sens et l'importance du champ de force radial, les courbes suivent toutes la même fonction de puissance et ainsi se superposent sur celle obtenue pour des structures dendritiques ayant crû en l'absence de champ de force. Puis progressivement une transition de phase apparaît et les courbes finissent par accrocher suivant que le champ de force radial uniforme soit centrifuge ou centripète respectivement avec la pente n°1 ou la pente n°2 sur un graphique aux échelles loglog. Les courbes s'alignent donc avec la pente n°1 ou la pente n°2 et cela quelle que fusse l'importance du champ de force radial. Ainsi on retrouve exactement le même phénomène de transition de phase sur la (Fig.5.1) alors qu'ici on étudie, du point de vue de la théorie des graphes, la hauteur moyenne  $\langle h \rangle$  des particules en fonction de l'itération  $n$  du processus d'accrétion de type DLA.

Pour différentes intensités  $F$  du champ de force appliqué à la surface du domaine de simulation, sur les figures (Fig.5.4), (Fig.5.5), (Fig.5.6),  $\forall n \in \mathbb{N}$  l'itération que l'on choisit d'observer, on constate que la hauteur moyenne à laquelle la  $n^{me}$  particule vient s'agréger à une structure dendritique composée de  $n - 1$  nœuds, ne dépend pas du fait que cette particule

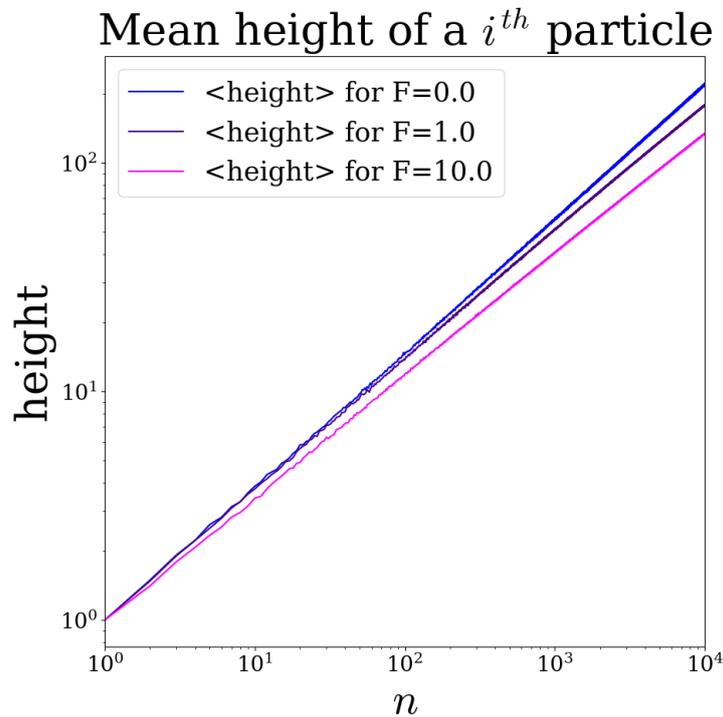


Figure 5.1 – Les hauteurs moyennes auxquelles les particules viennent s’agréger à la structure dendritique pour différentes intensités  $F$  du champ de force, évoluent suivant des lois de puissance. Ici pour chacune des intensités, on évalue les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

soit par ordre d’arrivée : le 1<sup>er</sup>, le 2<sup>me</sup> ou même le 3<sup>me</sup> fils<sup>1</sup> du nœud sur lequel a eu lieu son accréation. Si à cette observation on ajoute le fait que  $\mathbb{P}_S$  est iid, il en ressort que quelle que soit la chaîne que l’on choisira d’observer au sein d’un arbre  $T(V, E)$  de type DLA, la distribution des degrés des nœuds le long de celle-ci sera identique à celle de n’importe quelle autre chaîne composant cette arbre. Pour autant existe-t’il une loi de probabilité  $P_A$  gouvernant les variables aléatoires  $A_i$  définissant les nombres de fils  $deg_+(v_i)$  de l’ensemble des nœuds  $V$  d’un arbre  $T(V, E)$  de type DLA ? Autrement dit la DLA est-elle un processus de branchement identique à celui de Galton-Watson ?

Sur la (Fig.5.7), pour un champ de force d’une intensité  $F$  donnée, on observe  $\forall h$  une hauteur donnée que les nombres de fils  $deg_+(v_j) > 0$  pour des pères  $v_j \in G_V(h)$  sont identiquement distribués quelle que soit la génération  $G_V(h)$  observée. Ici nous avons délibérément exclu les évènements pour lesquels  $deg_+(v) = 0$ , c’est à dire les évènements pour lesquels  $v \in V$  était une terminaison. On verra par la suite que la distribution des terminaisons pourrait

1. Il est à noter qu’une particule peut être au plus le 4<sup>me</sup> fils du nœud qu’il agrège au reste de la structure ; mais que cet évènement est extrêmement rare et donc statistiquement très peu significatif, nous limitons donc nos observation aux 1<sup>er</sup>, 2<sup>me</sup> et 3<sup>me</sup> fils.

répondre à une contrainte globale liée à l'encombrement stérique de la structure dendritique. Désormais intéressons nous à la dépendance qui pourrait exister entre le nombre de fils d'un père et la taille de la fratrie dont ce père lui même fait partie. Pour un champ de force d'une intensité  $F$  donnée, les probabilités de transitions  $\forall(a, b) \in \llbracket 1, 4 \rrbracket^2, P(A'_k = a | A'_j = b)$ , avec  $A'_k = \text{deg}_+(v_k)$  et  $A'_j = \text{deg}_+(v_j)$  telles que  $\forall h, v_k \in G_V(h+1)$  est un fils de  $v_j \in G_V(h)$ , sont comme précédemment identiquement distribués quelle que soit la génération  $G_V(h)$  observée. Cependant on constate (voir matrices ci-dessous) que  $\forall(a, b) \in \llbracket 1, 4 \rrbracket^2, P(A'_k = a, A'_j = b) = P(A'_k = a | A'_j = b) \cdot P(A'_j = b) \neq P(A'_k = a) \cdot P(A'_j = b)$ . Le nombre de fils d'un père dépend donc de la taille de la fratrie dont ce père lui même fait partie. A ce stade on peut affirmer que le processus de branchement de type DLA ne peut être décrit d'un nœud à l'autre par un processus de Galton-Watson. Pour autant pourrait-il l'être par une chaîne de Markov ? Il le serait, si l'équation de Chapman-Kolmogorov  $U_F = T_F^2$  était vérifiée, or ce ce n'est pas le cas d'après (voir matrices ci-dessous).

| $F = 0.0$  | $F = 1.0$  | $F = 10.0$  |
|--|--|---|
| $T_{0.0} = \begin{pmatrix} 0.67 & 0.78 & 0.87 \\ 0.31 & 0.21 & 0.13 \\ 0.02 & 0.01 & 0.00 \end{pmatrix}$   | $T_{1.0} = \begin{pmatrix} 0.67 & 0.78 & 0.87 \\ 0.31 & 0.21 & 0.13 \\ 0.02 & 0.01 & 0.00 \end{pmatrix}$   | $T_{10.0} = \begin{pmatrix} 0.70 & 0.80 & 0.87 \\ 0.29 & 0.19 & 0.13 \\ 0.01 & 0.01 & 0.00 \end{pmatrix}$   |
| $T_{0.0}^2 = \begin{pmatrix} 0.70 & 0.69 & 0.68 \\ 0.28 & 0.29 & 0.30 \\ 0.02 & 0.02 & 0.02 \end{pmatrix}$ | $T_{1.0}^2 = \begin{pmatrix} 0.70 & 0.69 & 0.68 \\ 0.28 & 0.29 & 0.30 \\ 0.02 & 0.02 & 0.02 \end{pmatrix}$ | $T_{10.0}^2 = \begin{pmatrix} 0.73 & 0.72 & 0.71 \\ 0.26 & 0.27 & 0.28 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$ |
| $U_{0.0} = \begin{pmatrix} 0.71 & 0.73 & 0.75 \\ 0.28 & 0.26 & 0.24 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   | $U_{1.0} = \begin{pmatrix} 0.70 & 0.74 & 0.75 \\ 0.28 & 0.25 & 0.24 \\ 0.02 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   | $U_{10.0} = \begin{pmatrix} 0.73 & 0.75 & 0.77 \\ 0.26 & 0.24 & 0.22 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   |
| $W_{0.0} = \begin{pmatrix} 0.72 & 0.72 & 0.72 \\ 0.27 & 0.27 & 0.27 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   | $W_{1.0} = \begin{pmatrix} 0.72 & 0.72 & 0.72 \\ 0.27 & 0.27 & 0.27 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   | $W_{10.0} = \begin{pmatrix} 0.73 & 0.73 & 0.73 \\ 0.26 & 0.26 & 0.26 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix}$   |

avec :

$$T_F = \begin{pmatrix} P(A'_k = 1 | A'_j = 1) & P(A'_k = 1 | A'_j = 2) & P(A'_k = 1 | A'_j = 3) \\ P(A'_k = 2 | A'_j = 1) & P(A'_k = 2 | A'_j = 2) & P(A'_k = 2 | A'_j = 3) \\ P(A'_k = 3 | A'_j = 1) & P(A'_k = 3 | A'_j = 2) & P(A'_k = 3 | A'_j = 3) \end{pmatrix},$$

$$U_F = \begin{pmatrix} P(A'_k = 1 | A'_i = 1) & P(A'_k = 1 | A'_i = 2) & P(A'_k = 1 | A'_i = 3) \\ P(A'_k = 2 | A'_i = 1) & P(A'_k = 2 | A'_i = 2) & P(A'_k = 2 | A'_i = 3) \\ P(A'_k = 3 | A'_i = 1) & P(A'_k = 3 | A'_i = 2) & P(A'_k = 3 | A'_i = 3) \end{pmatrix},$$

$$W_F = \begin{pmatrix} P(A'_k = 1 | A'_m = 1) & P(A'_k = 1 | A'_m = 2) & P(A'_k = 1 | A'_m = 3) \\ P(A'_k = 2 | A'_m = 1) & P(A'_k = 2 | A'_m = 2) & P(A'_k = 2 | A'_m = 3) \\ P(A'_k = 3 | A'_m = 1) & P(A'_k = 3 | A'_m = 2) & P(A'_k = 3 | A'_m = 3) \end{pmatrix},$$

telles que  $\forall h, v_k \in G_V(h+1)$  est un fils de  $v_j \in G_V(h)$  lui même un fils de  $v_i \in G_V(h-1)$  lui même le fils du fils de  $v_m \in G_V(h-3)$  avec  $A'_k = \text{deg}_+(v_k)$ ,  $A'_j = \text{deg}_+(v_j)$ ,  $A'_i = \text{deg}_+(v_i)$

et  $A'_m = \text{deg}_+(v_m)$

Ainsi les nombres de fils  $\text{deg}_+(v)$  pour des pères appartenant à  $\{v \in V \mid \text{deg}_+(v) > 0\}$ , ne sont pas indépendamment distribués. Néanmoins le processus de branchement de type DLA perd sa mémoire toutes les quatre générations, ci au dessus les matrices de transition  $W_F$  sont là pour l'attester. Au bout de quatre générations qui plus est  $\forall(a, b) \in \llbracket 1, 4 \rrbracket^2$  les matrices de transition  $W_F$  présentent des probabilités  $P(A'_k = a \mid A'_m = b)$  égales aux probabilités  $P(A'_k = a)$  de la (Fig.5.7) et donc  $\forall(a, b) \in \llbracket 1, 4 \rrbracket^2$ ,  $P(A'_k = a, A'_m = b) = P(A'_k = a \mid A'_m = b) \cdot P(A'_m = b) = P(A'_k = a) \cdot P(A'_m = b)$ . Ceci est aussi confirmé sur la (Fig.5.2) sur laquelle on constate qu'au bout de quatre générations, la fréquence des multifurcations suit une loi géométrique caractéristique d'un processus de branchement markovien comme nous l'avons exposé plus tôt dans la sous-section 4.2.3. Cette mémoire sur quatre générations peut s'expliquer par un encombrement plus important autour des nœuds  $v \in V$  tels que  $\text{deg}_+(v) > 1$ , réduisant de ce fait la probabilité qu'ils se suivent de près d'une génération à l'autre. Tandis que pour des nœuds  $v \in V$  tels que  $\text{deg}_+(v) = 1$  pour lesquels le voisinage est significativement moins encombré, on constate que  $\forall i \in \llbracket 1, 4 \rrbracket$ ,  $U_{i,1} = T_{i,1}^2$ . Autrement dit que l'équation de Chapman–Kolmogorov se vérifie pour l'ensemble des nœuds  $\{v \in V \mid \text{deg}_+(v) = 1\}$ .

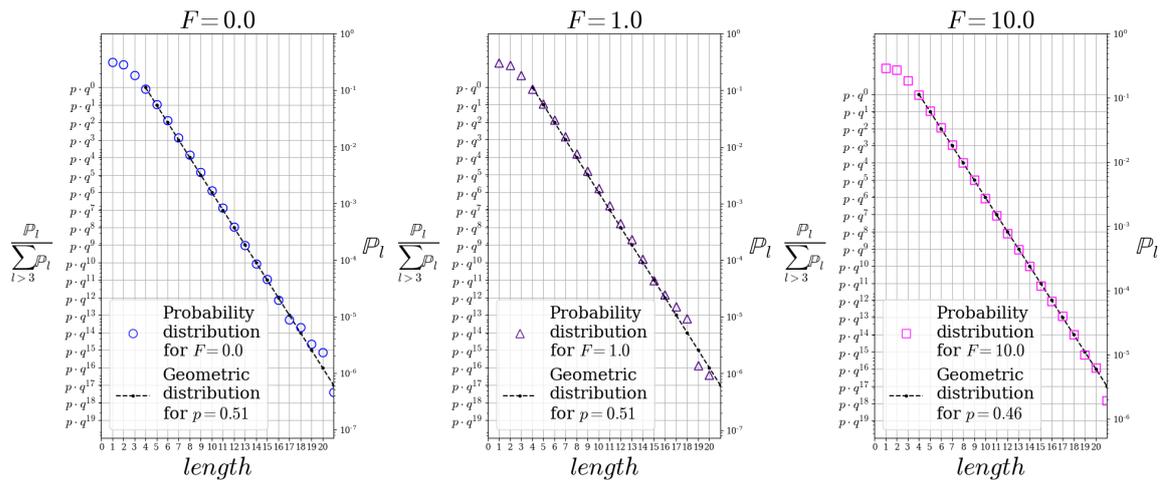


Figure 5.2 – La Longueur de chaîne séparant deux multifurcations dans un processus de branchement de type D.L.A suit une loi géométrique après quatre générations.

### 5.1.4 . DLA un processus de branchement particulier

On décide donc de construire l'arbre homéomorphe  $T'(V', E')$  obtenu à partir de l'arbre  $T(V, E)$  de type DLA, en lissant l'ensemble des nœuds de degré deux  $\{v \in V \mid \text{deg}(v) = 2\}$ . On obtient ainsi un arbre  $T'(V', E')$  dépourvu de degré 2 tel que  $V' = \{v \in V \mid \text{deg}(v) \neq 2\} \subset V$ . Afin de conserver l'intégralité de l'information contenue dans l'arbre  $T(V, E)$ , on pondère chaque lien  $e = (v_i, v_j) \in E'$  par la longueur de la chaîne reliant les nœuds  $v_i \in V$  et  $v_j \in V$  dans l'arbre  $T(V, E)$  original. De nouveau, intéressons-nous à la dépendance qui pourrait exister entre le nombre de fils d'un père et la taille de la fratrie dont ce père lui même fait partie

mais cette fois-ci des pères  $v_i \in V'$  pour lesquels les degrés  $deg_+(v_i) > 1$ . Pour un champ de force d'une intensité  $F$  donnée, les probabilités de transitions  $\forall(a, b) \in \llbracket 2, 4 \rrbracket^2, P(A'_k = a | A'_j = b)$ , avec  $A'_k = deg_+(v_k)$  et  $A'_j = deg_+(v_j)$  telles que  $\forall h, v_k \in G_{V'}(h+1)$  est un fils de  $v_j \in G_{V'}(h)$ , sont cette fois-ci, en plus d'être identiquement distribuées quelle que soit la génération  $G_{V'}(h)$  observée, indépendamment distribuées comme peuvent l'attester les matrices de transition ci-dessous.

$$F = 0.0 \qquad F = 1.0 \qquad F = 10.0$$

$$T_{0.0} = \begin{pmatrix} 0.95 & 0.95 \\ 0.05 & 0.05 \end{pmatrix} \quad T_{1.0} = \begin{pmatrix} 0.95 & 0.95 \\ 0.05 & 0.05 \end{pmatrix} \quad T_{10.0} = \begin{pmatrix} 0.95 & 0.95 \\ 0.05 & 0.05 \end{pmatrix}$$

Ainsi le processus de branchement de type DLA pourrait être parfaitement décrit par les matrices de transition ci-dessus pour ce qui est de la répartition des degrés des nœuds  $v \in V'$  et par la (Fig.5.2) pour ce qui est de la longueur des chaînes dans l'arbre  $T(V, E)$  original, reliant des nœuds  $v_i \in V'$  et  $v_j \in V'$  adjacents dans l'arbre homéomorphe  $T'(V', E')$ . Cependant depuis le début nous avons soigneusement fait en sorte d'exclure les terminaisons, c'est à dire les pères dépourvus de fils. Sur la (Fig.5.8) on constate que la taille des générations  $Z_h$  évoluent en moyenne suivant une loi de puissance à la différence des arbres aléatoires uniformes dont la taille des générations évolue suivant une loi exponentielle comme nous l'avions vu dans la sous-section 4.2.3. Ainsi pour une génération  $G_{V'}(h)$  étant donné que la taille moyenne de cette génération est  $Z_h = C \cdot h^\alpha$  alors le nombre moyen de fils pour un père de cette génération est  $m_h = \frac{(h+1)^\alpha}{h^\alpha}$ . Aussi pour une génération  $G_{V'}(h)$ , le nombre moyen  $x$  de pères  $v \in V'$  tels que  $deg_+(v) > 1$  est donné par l'équation suivante  $(h+1)^\alpha = (h^\alpha - x) \cdot 0 + x \cdot (2 \cdot 0.95 + 3 \cdot 0.05) \iff x = \frac{(h+1)^\alpha}{(2 \cdot 0.95 + 3 \cdot 0.05)}$ . Or pour une intensité  $F > 10$  du champ de force,  $\alpha \rightarrow 1$  et par conséquent  $\forall h, Z_h \rightarrow C \cdot h$ .

Ainsi le nombre de nœuds par génération  $G_{V'}(h)$  croît de façon linéaire à l'instar du périmètre du cercle sur lequel ils se localisent en moyenne. A partir de cet exemple on pourrait émettre l'hypothèse suivant laquelle la contrainte sur le nombre moyen de pères  $v \in V'$  tels que  $deg_+(v) > 1$  dépend de la forme globale de la structure dendritique sur laquelle viennent s'agréger les particules libres. Ainsi plus l'intensité  $F$  du champ de force augmente plus la section efficace de la structure dendritique qui va résulter de l'accrétion des particules libres sera importante elle aussi.

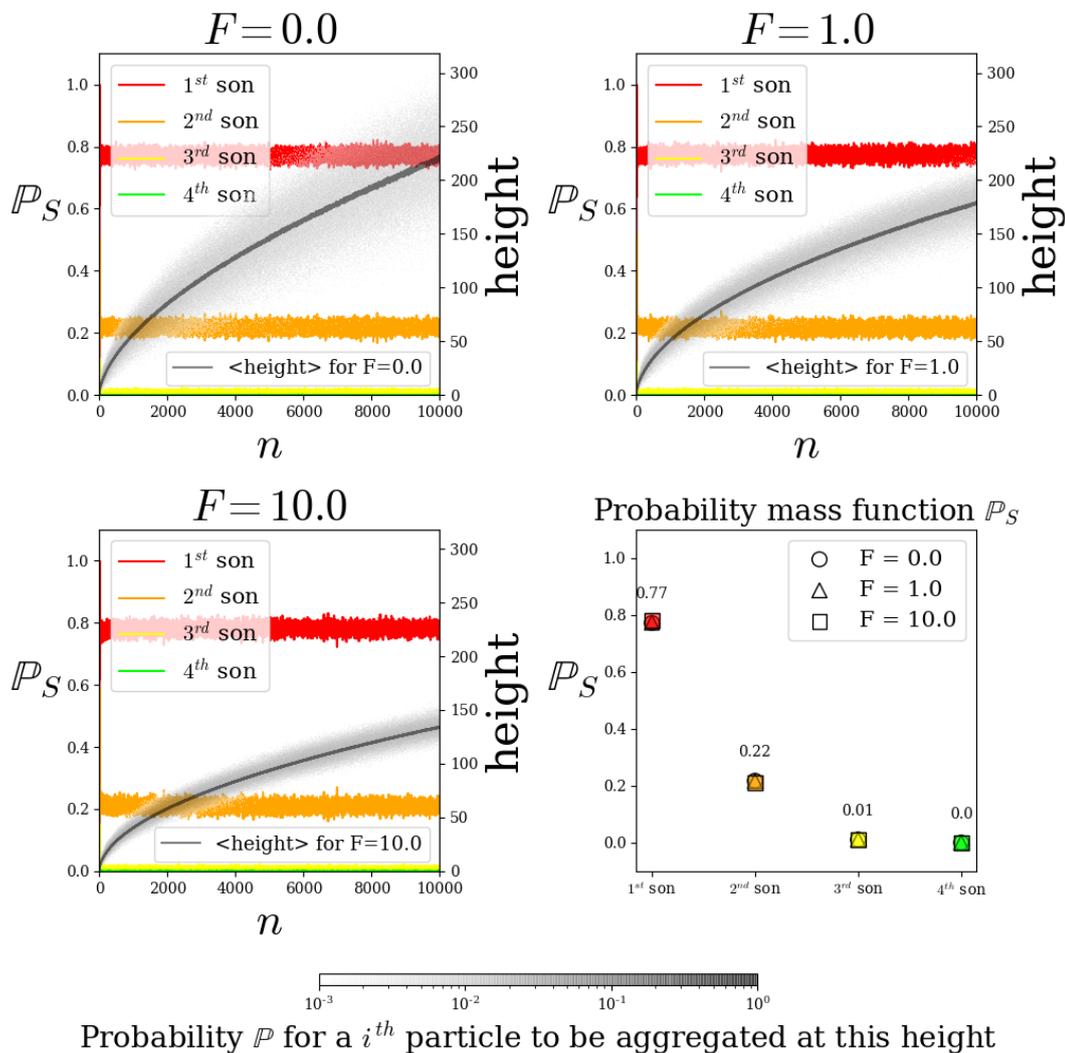


Figure 5.3 – La loi de probabilité  $\mathbb{P}_S$  est iid pour chacune des particules libres aux abords d'un arbre  $T(V, E)$  de type DLA. L'invariance de la loi  $\mathbb{P}_S$  par la modification de l'intensité  $F$  du champ de force est mise en évidence par la figure en bas à droite superposant sur le même tracé les fonctions de masse de  $\mathbb{P}_S$  pour différentes intensités  $F$ . Seule la hauteur moyenne à laquelle les particules viennent s'agréger à la structure dendritique varie en fonction de l'intensité du champ de force  $F$ . Ici pour chacune des intensités, on évalue simultanément  $\mathbb{P}_S$  et les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

$$F = 0.0$$

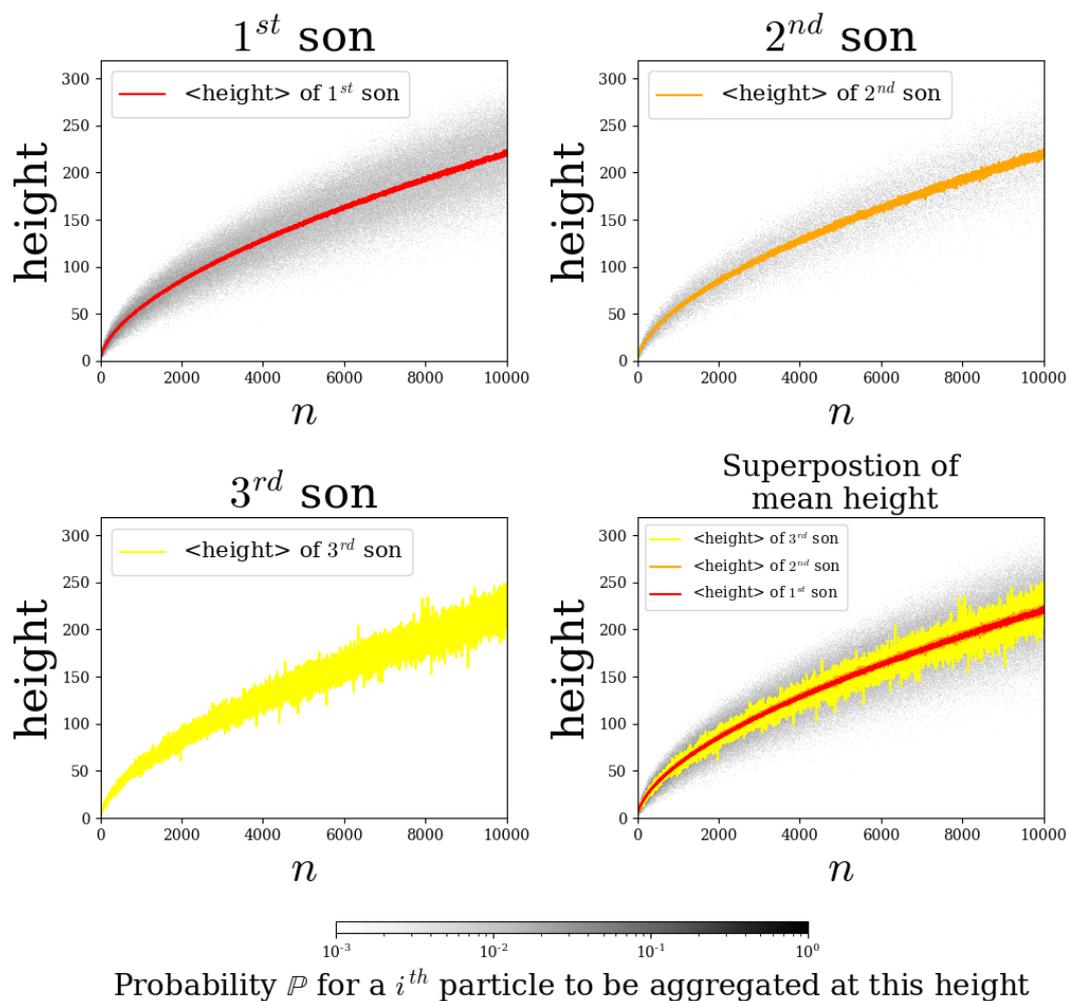


Figure 5.4 – La hauteur moyenne à laquelle les particules libres viennent s’agréger à la structure dendritique pour un champ de force d’intensité  $F = 0.0$ , reste invariante suivant que cette particule soit le 1<sup>er</sup>, le 2<sup>me</sup>, le 3<sup>me</sup> fils du nœud sur lequel aura lieu l’accrétion. On évalue ici les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

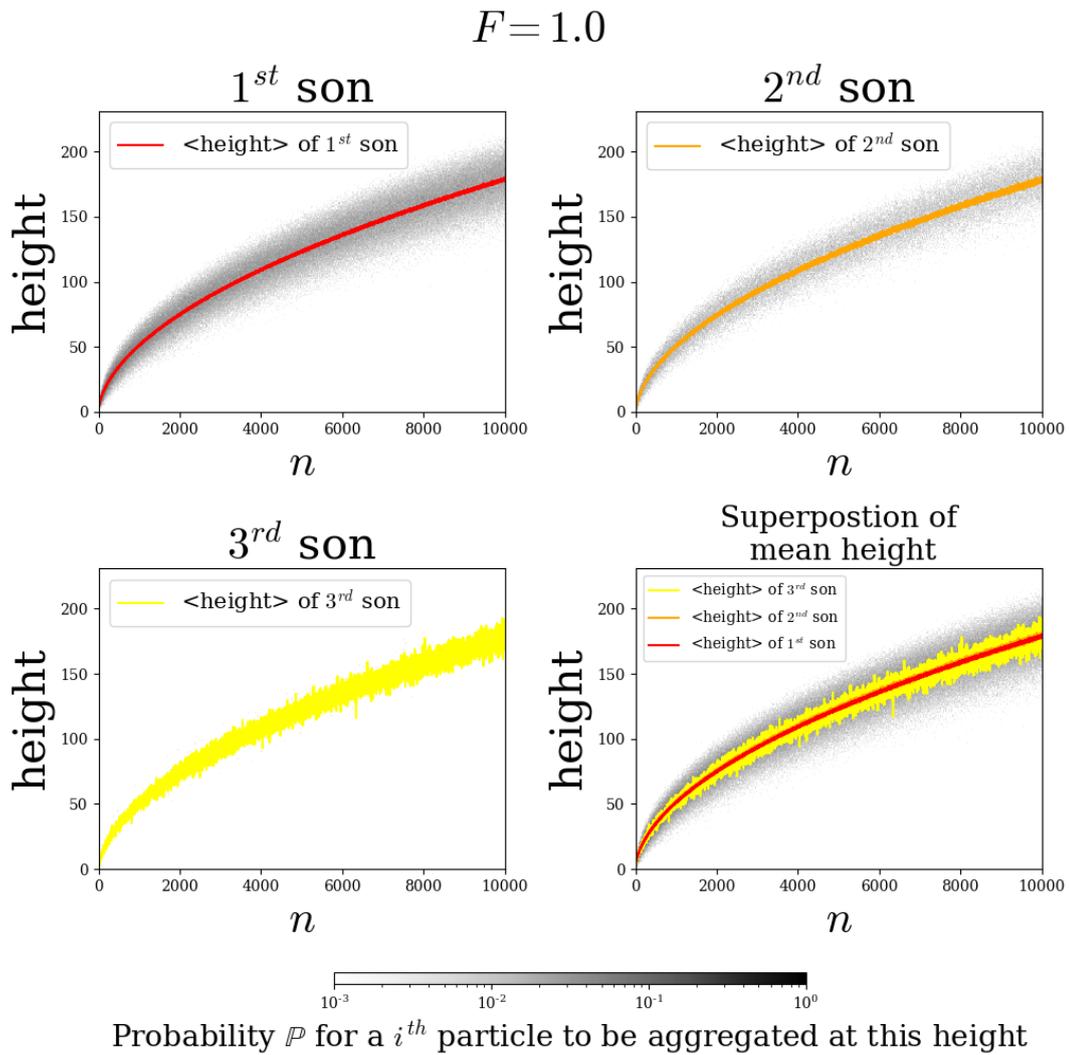


Figure 5.5 – La hauteur moyenne à laquelle les particules libres viennent s’agréger à la structure dendritique pour un champ de force d’intensité  $F = 1.0$ , reste invariante suivant que cette particule soit le 1<sup>er</sup>, le 2<sup>me</sup>, le 3<sup>me</sup> fils du nœud sur lequel aura lieu l’accrétion. On évalue ici les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

$$F = 10.0$$

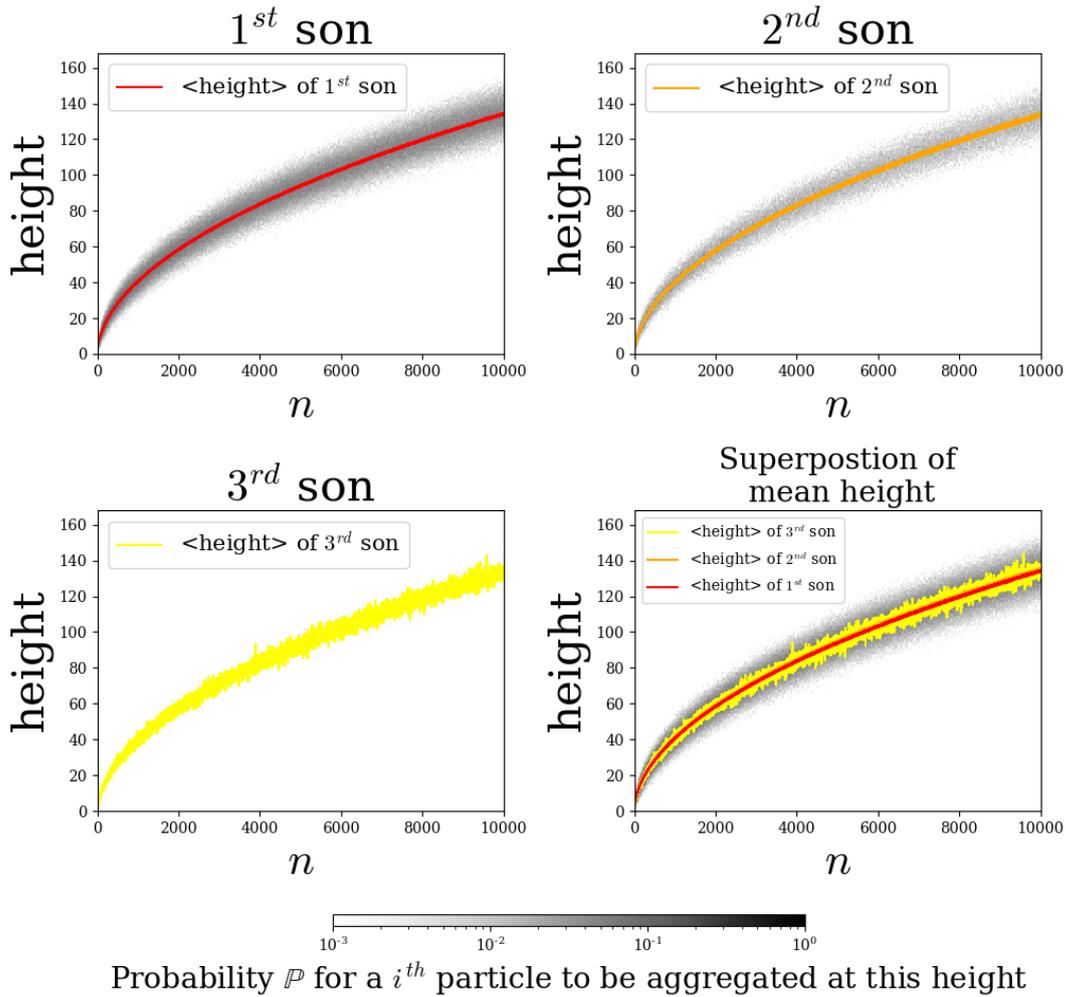


Figure 5.6 – La hauteur moyenne à laquelle les particules libres viennent s’agréger à la structure dendritique pour un champ de force d’intensité  $F = 10.0$ , reste invariante suivant que cette particule soit le 1<sup>er</sup>, le 2<sup>me</sup>, le 3<sup>me</sup> fils du nœud sur lequel aura lieu l’accrétion. On évalue ici les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

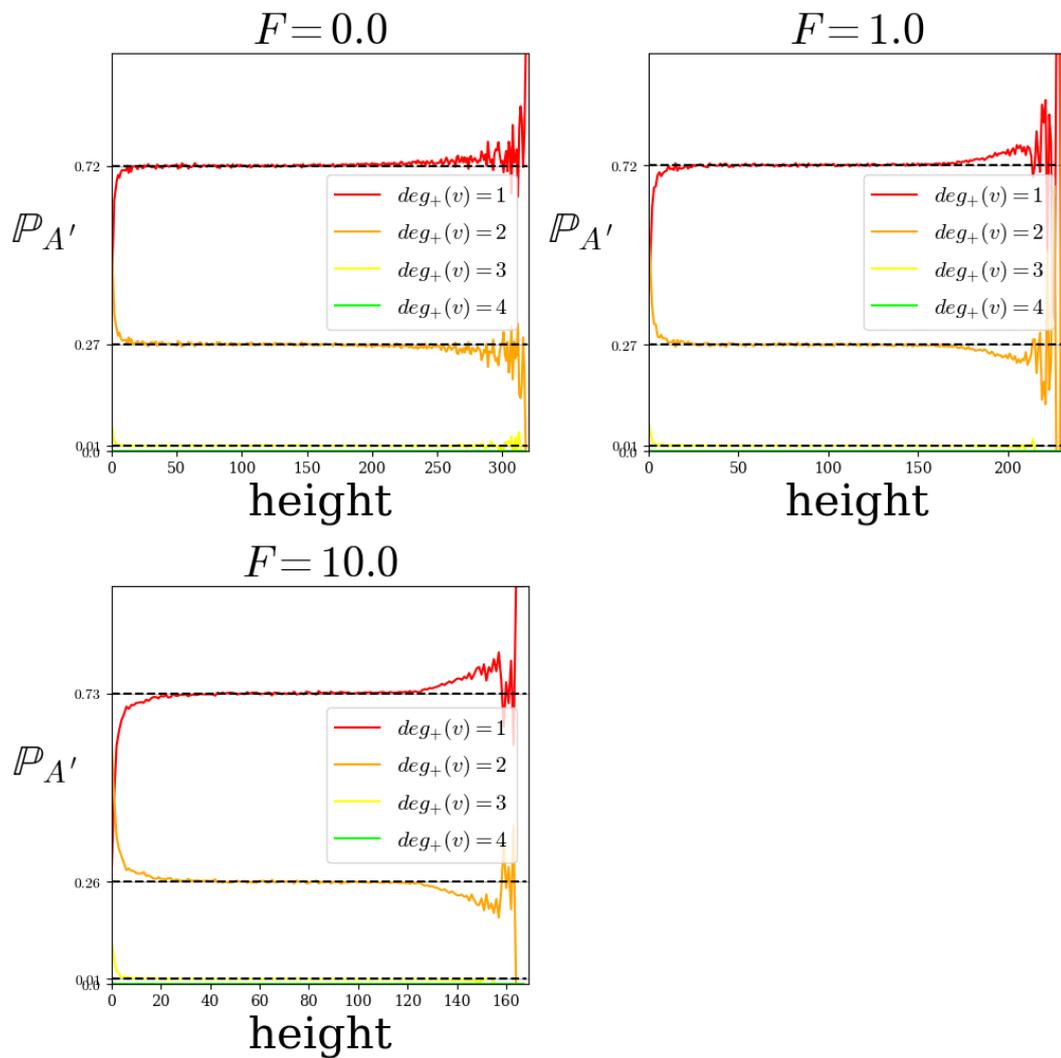


Figure 5.7 – La loi de probabilité  $\mathbb{P}_{A'}$  est iid pour chacun des nœuds. On observe cependant une variation subtile de la fonction de masse de  $\mathbb{P}_{A'}$  suivant l'intensité  $F$  du champ de force en l'occurrence peut être une très légère raréfaction des multifurcations à mesure que l'intensité  $F$  augmente. Ici pour chacune des intensités, on évalue simultanément  $\mathbb{P}_S$  et les hauteurs moyennes sur un échantillon comptant 1000 structures dendritiques.

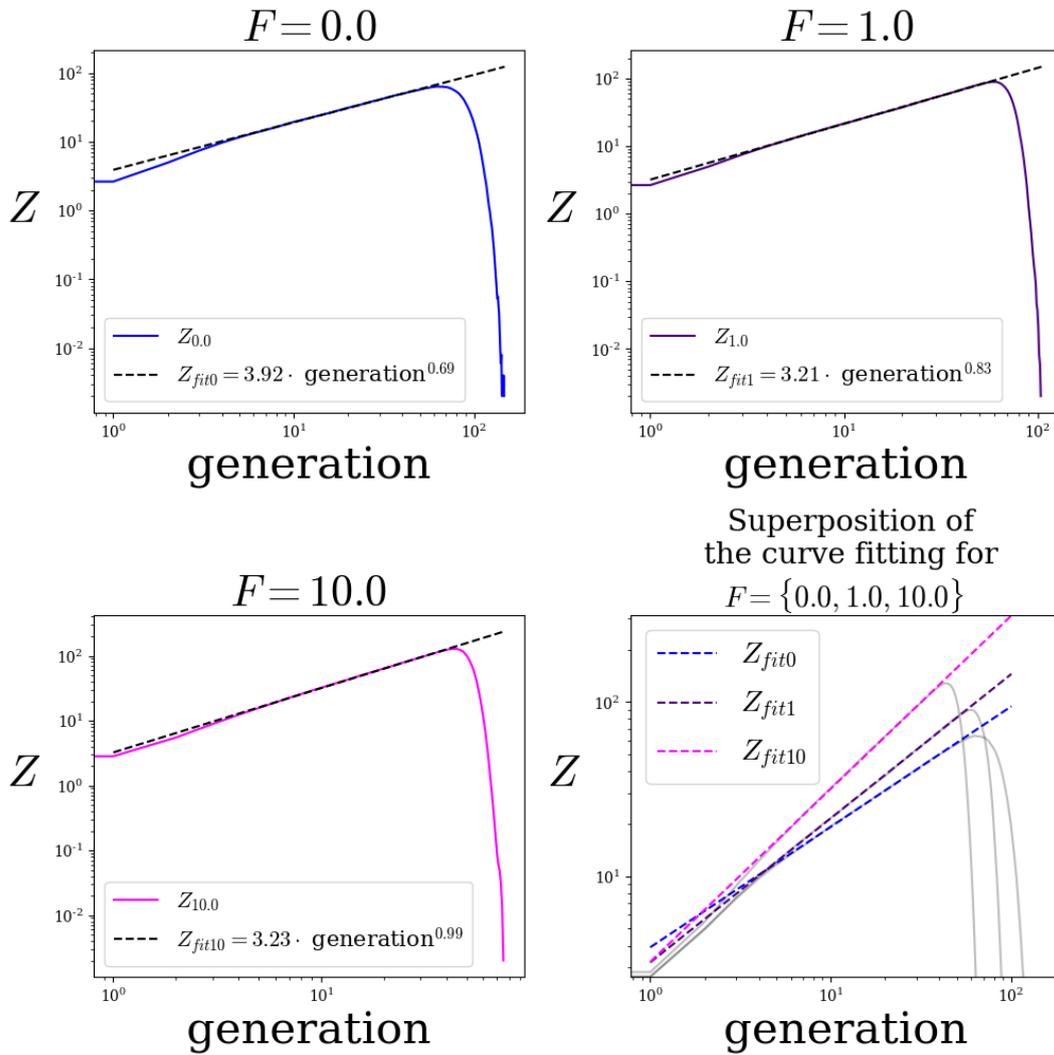


Figure 5.8 – Illustration pour différentes intensités de champ de force  $F$  du caractère non uniforme des arbres constitués par un processus de branchement de type DLA. Ici pour chacune des intensités on constate que la taille des générations évolue en moyenne suivant une loi de puissance à la différence des arbres aléatoires uniformes dont la taille des générations évolue suivant une loi exponentielle.

## 5.2 . Ordres des cours d'eau

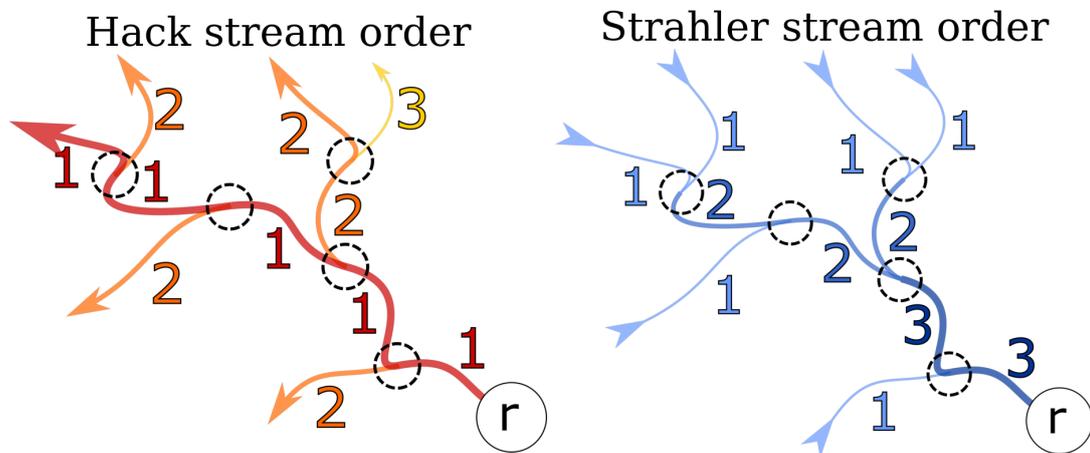


Figure 5.9 – Exemple d'un arbre quelconque dont les chaînes reliant deux bifurcations ou une terminaison et une bifurcation entre elles, auront été hiérarchisées suivant l'ordre de Hack (gauche) et celui de Strahler (droite). Sur cet arbre dont la racine est définie par le nœud  $r$ , les bifurcations sont entourées par des pointillés, tandis que les terminaisons, elles, sont signalées par des flèches. Le sens de ces flèches indique pour chacun de ces ordres, si celui-ci hiérarchise les chaînes de cet arbre de sa racine à ses terminaisons (gauche) ou inversement de ses terminaisons à sa racine (droite) et ainsi respectivement si il est du type "bottom-up" ou à l'inverse "top-down".

Les ordres des cours d'eau ou les "stream orders" en anglais sont des mesures qui à l'origine sont utilisées dans le domaine de la géomorphologie et de l'hydrologie pour appréhender la complexité d'un réseau fluvial arborescent. Les réseaux fluviaux peuvent être vus comme des arbres enracinés du point de vue de la théorie des graphes. Ainsi suivant l'ordre des cours d'eau choisi pour ordonnancer un réseau fluvial, les différents affluents le constituant seront hiérarchisés suivant une méthode qui mettra à jour certaines informations dont la pertinence dépendra de ce que l'on cherche à faire émerger de ce réseau. Cette mesure semble donc toute indiquée pour la description d'un arbre de type DLA et nous verrons que c'est bien le cas.

Il existe deux grands types d'ordres : les ordres de cours d'eau "top-down" hiérarchisant les chaînes d'un arbre des terminaisons vers la racine et les ordres de cours d'eau "bottom-up" pour lesquels c'est l'inverse. Sur la (Fig.5.9) on a illustré chacun de ces deux types d'ordre des cours d'eau par un exemple. Dans le cas d'un réseau fluvial, l'arbre enraciné qui le modélise a pour terminaisons les sources de ce réseau et pour racine son embouchure. Nous présenterons ici de façon non exhaustive quelques uns des ordres les plus connus et/ou ayant fait l'objet de travaux pour les arbres de type DLA.

Quelle que soit la convention choisie, un ordre de cours d'eau correspondra toujours à

un entier positif. Cet ordre peut venir pondérer la chaîne ou le simple lien existant entre une terminaison ou une multifurcation et la racine ou l'une des multifurcations dont elle est la descendante d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ . Pour la suite de ce travail il sera utile de définir un certain nombre d'ensembles qui s'avéreront être incontournables lorsque nous aurons à étudier l'ordonnement d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ . Ainsi commençons par définir  $C(\phi(c) = k)$  l'ensemble des chaînes pour lesquelles leur mesure  $\phi$  renvoie une valeur  $k$  donnée :

$$C(\phi(c) = k) = \{c = \underbrace{(e_1, \dots, e_q)}_q \in E^q \mid \phi(c) = k\} \quad (5.1)$$

Cette mesure peut être un ordre des cours d'eau  $\omega$  bien qu'il nous arrivera de choisir  $\phi \neq \omega$ . A partir de (5.1) nous pouvons alors définir  $C_\omega(k)$  l'ensemble des plus longues chaînes possibles d'un ordre  $\omega = k$  donné d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ .

$$C_\omega(k) = \{c \in C(\omega(c) = k) \mid \forall c_j \in C(\omega(c) = k) \setminus \{c\}, c \not\subseteq c_j\} \quad (5.2)$$

On définit aussi l'ensemble  $C_c$  des chaînes attachées à une chaîne  $c$  d'un arbre enraciné  $T(V, E)$  dont les ordres  $\omega$  valent  $\omega(c) + 1$  ou  $\omega(c) - 1$  suivant que cet ordonnancement soit respectivement "bottom-up" ou "top-down" :

$\forall k \in \mathbb{N}^*$ , si  $\omega$  est "bottom-up" :

$$C_c = \{b \in \bigcup_{k=1}^{+\infty} C_\omega(k+1) \mid \exists! v \in e_i \cap e_j \subset V, (e_i, e_j) \in c \times b \subset E^2 \text{ et } \omega(c) = k\} \quad (5.3)$$

$\forall k \in \mathbb{N}^*$ , si  $\omega$  est "top-down" :

$$C_c = \{b \in \bigcup_{k=1}^{+\infty} C_\omega(k-1) \mid \exists! v \in e_i \cap e_j \subset V, (e_i, e_j) \in c \times b \subset E^2 \text{ et } \omega(c) = k\} \quad (5.4)$$

Pour une meilleure lisibilité de la hiérarchisation des chaînes d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ , on pourra choisir de construire un hyperarbre  $H(V, E')$  pour lequel  $T(V, E)$  est l'un de ses graphes hôtes (voir sous-section 4.3.2) et dont chacun des hyperliens  $e'_i \in E'$  correspond à l'ensemble des nœuds parcourus par une chaîne  $c_i \in \bigcup_{k=1}^{+\infty} C_\omega(k)$ , d'où  $Card(E') = Card(\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_\omega(k))$ . Sur la (Fig.5.11) on a représenté les différentes chaînes appartenant à  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_\omega(k)$  de même que les hyperliens associés appartenant à  $E'$  pour différents ordres des cours d'eau appliqués au même arbre  $T(V, E)$ . Ainsi grâce à cet hyperarbre  $H(V, E')$  seulement dans le cas où  $c \in C_\omega(k)$  est une chaîne à partir de laquelle nous construisons l'ensemble  $C_c$  alors l'ensemble des hyperliens associés aux chaînes de  $C_c$  se résume à :

$$E'_{e'} = \{e'_i \in E' \mid Card(e' \cap e'_i) = 1\} \quad (5.5)$$

l'ensemble des hyperliens partageant pour chacun d'entre eux seulement un nœud parmi ceux reliés par l'hyperlien  $e \in E'$ , qui du point de vue de l'arbre enraciné hôte  $T(V, E)$  correspond à la chaîne  $c$ .

### 5.2.1 . Ordre des cours d'eau classique

L'ordre des cours d'eau classique  $\omega_H$  appelé aussi ordre de Hack ou de Gravelius, fait partie de la famille des ordres "bottom-up". Il consiste à hiérarchiser les branches d'un arbre  $T(V, E)$  en partant de sa racine  $v_r \in V$ . Dans le cas d'un réseau fluvial, l'ordre  $\omega_H = 1$  est donné au fleuve, autrement dit le bras qui débouche dans la mer. Lorsque l'on remonte le fleuve, afin de déterminer quel bras correspond au fleuve ou à l'un de ses affluents arrivé aux abords d'une confluence (bifurcation), la convention veut que l'on choisisse le bras pour lequel on retrouve le plus fort débit d'eau et cela jusqu'à atteindre une source. Dans le cas de nos arbres type DLA étant donné que ses liens ne sont pas pondérés, il nous faudra une convention. Nous proposons de pondérer à l'ordre  $\omega_H = 1$  les  $deg(v_r)$  branches issues de la racine  $v_r$  tel que pour chacune d'entre elles, leurs parcours aient été choisis pour atteindre leurs descendants les plus éloignés de la racine. Ensuite l'ordre  $\omega_H = 2$  correspondra aux affluents directs du fleuve et leurs parcours seront choisis comme précédemment et ainsi de suite pour les ordres supérieurs. Un exemple est donné sur la moitié gauche de la (Fig.5.9) d'un arbre enraciné quelconque pour lequel on aura hiérarchisé ses branches suivant l'ordre de Hack.

En 1957 John Tilton Hack [34] aura présenté une loi d'échelle portant son nom et corrélant la longueur d'un cours d'eau avec l'aire du bassin versant dans lequel il s'écoule.

$$A = C \cdot L^H \quad (5.6)$$

Un bassin versant représente la zone dans laquelle un cours d'eau et ses affluents se déversent jusqu'à atteindre une embouchure. Cette loi de Hack n'est pas sans rappeler d'après l'équation (3.2) la mesure de la dimension fractale  $D_g$  obtenue par le biais du rayon de giration  $R_g$  d'une arborescence ou bien le calcul de la dimension d'étalement  $N = C \cdot L^{D_e}$  dans lequel  $L$  correspond à la longueur de la branche la plus longue partant de la racine de l'arbre enraciné [30].

### 5.2.2 . Ordre de Strahler

L'ordre de Strahler  $\omega_S$ , présenté pour la première fois en 1952 [101] [102] par le géologue Arthur Newell Strahler faisant suite aux travaux d'un de ses pairs Robert Horton [40], fait partie de la famille des ordres "top-down". Dans un arbre enraciné  $T(V, E)$ , l'ordre de Strahler consiste à hiérarchiser les chaînes reliant les terminaisons ou les multifurcations aux premières multifurcations étant leurs ancêtres. Ainsi en partant des terminaisons, les chaînes, en l'occurrence les branches reliant les terminaisons aux premières multifurcations étant leurs ancêtres, seront pondérés à l'ordre de Strahler  $\omega_S = 1$ . A présent pour les ordres de Strahler  $\omega_S > 1$  ceux-ci seront donnés en suivant l'algorithme décrit ci-après. Soit une multifurcation  $v_j \in V$  dont les fils  $v_k \in V_f$  sont parcourus par les chaînes  $c_{v_j}(1), \dots, c_{v_j}(deg_+(v_j))$ , ayant déjà été pondérées par des ordres de Strahler tels que  $max_{\omega_S}(v_j)$  correspond à l'ordre de Strahler  $\omega_S$  maximum parmi ces  $deg_+(v_j)$  chaînes. Alors l'ordre de Strahler de la chaîne  $c_{v_i}(v_j)$  reliant la multifurcation  $v_j \in V$  à  $v_i \in V$  la première multifurcation étant son ancêtre, sera choisi tel que :

- Si parmi les chaînes  $c_{v_j}(1), \dots, c_{v_j}(deg_+(v_j))$  il en existe au moins deux dont l'ordre de Strahler vaut  $max_{\omega_S}(v_j)$  alors l'ordre de Strahler de la chaîne  $c_{v_i}(v_j)$  est égale à  $max_{\omega_S}(v_j) + 1$ ,

- Sinon dans le cas où il existe une unique chaîne d'ordre maximum alors l'ordre de Strahler de la chaîne  $c_{v_i}(v_j)$  est égale à  $max_{\omega_S}(v_j)$ .

Un exemple est donné sur la moitié droite de la (Fig.5.9) d'un arbre enraciné quelconque pour lequel on aura hiérarchisé ses chaînes suivant l'ordre de Strahler.

A partir des ordres de Strahler d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ , auront été définies un certain nombre d'observables que nous allons énumérer ci-dessous :

- Le nombre de Strahler  $N_S$  d'un arbre enraciné  $T(V, E)$ , comme étant l'ordre de Strahler maximum que l'on aura calculé parmi l'ensemble des chaînes de  $T(V, E)$  ayant été pondérées d'un ordre de Strahler.  $N_S$  mesure ainsi le niveau de complexité d'un arbre enraciné  $T(V, E)$

$$N_S = max\{\omega_S(e) \mid e \in E\} \quad (5.7)$$

- Le ratio ordre-multifurcation

$$\beta_k = \frac{Card(C_{\omega_S}(k))}{Card(C_{\omega_S}(k+1))} \quad (5.8)$$

avec, on le rappelle,  $\forall k \in \mathbb{N}^*$ ,  $C_{\omega_S}(k)$  définit tel que (5.2)

- Le ratio ordre-longueur de chaîne

$$\lambda_k = \frac{\langle \|c\| \rangle_{C_{\omega_S}(k+1)}}{\langle \|c\| \rangle_{C_{\omega_S}(k)}} \quad (5.9)$$

avec  $\forall k \in \mathbb{N}^*$ ,  $\langle \|c\| \rangle_{C_{\omega_S}(k)}$  la longueur moyenne des chaînes de l'ensemble  $C_{\omega_S}(k)$

- Le nombre de "border"  $b_{k,j}$  [108] que l'on pourrait traduire par couple d'ordre et tel que pour une multifurcation  $v \in V$ , parmi les chaînes dans lesquelles on retrouve les fils de  $v$ , ce couple  $(k, j)$  soit composé des deux plus hauts ordres de Strahler.
- La matrice de ramification  $R(k, j)$  [108] telle que :

$$R(k, j) = \begin{cases} \frac{b_{k,j}}{Card(V_k)} & \text{si } k > j \\ \frac{b_{k-1,k-1}}{Card(V_k)} & \text{si } k = j \\ 0 & \text{si } k < j \end{cases} \quad (5.10)$$

telle que  $V_k$  représente parmi l'ensemble des nœuds  $\{v \in V \mid deg_+(v) \neq 1\}$ , ceux ayant été parcourus par des chaînes d'ordre  $\omega_S = k$ .

De par la définition de  $R(k, j)$ ,  $\sum_j R(k, j) = 1$ . Ainsi la matrice de ramification  $R(k, j)$  peut être vue comme une matrice stochastique dont les éléments définissent la probabilité pour un nœud  $v \in V$  d'être le père d'un couple d'ordre  $(k, j)$ . Dès lors à partir de la seule information que renferme cette matrice, on pourrait construire des arbres binaires aléatoires. Dans sa thèse Georges Eyrolles [21] avait étudié les différentes morphologies d'arbres obtenues par le biais de ces matrices et avait même démontré qu'une large variété d'arborescences végétales pouvait être simulée à partir des probabilités de ces matrices de ramification. De plus l'analyse de la matrice de ramification d'un arbre quelconque permet d'estimer sa tendance à être plus ou moins broussailleux. En effet on comprend assez facilement que pour un arbre assez broussailleux ce seront les premières colonnes ( $j \ll k$ ) de la matrice de ramification qui

renfermeront les éléments de poids les plus forts; tandis que pour un arbre plutôt élagué ce sera le contraire.

L'ordre de Strahler des arbres DLA aura déjà fait l'objet d'études multiples et variées par le passé *e.g.* [18], [23], [66], [108] et [122].

Dans [108] J. Vannimenus et X. G. Viennot ont étudié des structures dendritiques de type DLA ayant crû sur un réseau carré et s'étant suffisamment développées pour que leur dimension fractale corresponde à  $D_g = 1.71$ . Cette valeur de la dimension fractale est usuelle pour toutes structures dendritiques de type DLA dont le nombre de Strahler  $N_S \leq 8$ . Une de leurs motivations aura été d'aider à confirmer l'impression visuelle de leurs pairs [14], [106] selon laquelle les digitations visqueuses [95] obtenues à l'intérieur de cellule d'Hele-Shaw [39] pourraient être modélisées par un arbre conçu par le biais d'un processus d'accrétion de type DLA. Une cellule d'Hele-Shaw du nom de son inventeur Henry Selby Hele-Shaw, est un dispositif expérimental datant de la fin du XIX siècle constitué de deux plaques de verre parallèles suffisamment proches l'une de l'autre pour agir sur un fluide comme le ferait un milieu poreux. Ainsi dans une cellule d'Hele-Shaw qui est une coupe bidimensionnelle d'un milieu poreux, si l'on injecte deux fluides non miscibles de viscosités différentes, l'interface entre ces deux fluides finira par prendre un profil digité comme représenté sur la (Fig.2 de [108]). Avant [108] pour apparenter la morphologie de ces digitations visqueuses à celle des arbres de type DLA, seule la dimension fractale existait. Or dans leur travail J. Vannimenus et X. G. Viennot comparent ces deux morphologies aussi grâce à la matrice de ramification  $R(k, j)$  et les autres observables décrites plus haut. Ils constatent que les probabilités  $R(k, j)$  telles que  $k = 4$  ainsi que les ratios ordre-multifurcation  $\beta_k$  calculés pour les arbres obtenus par digitation visqueuse semblent correspondre aux observables calculées pour des arbres de type DLA. Cependant l'échantillon d'arbre obtenu par digitation visqueuse est trop faible (4) pour confirmer avec certitude ces observations. Pour autant ce dont on peut être certain d'après leur travail est que les arbres obtenus par digitation visqueuse ne peuvent être rapprochés des processus à l'origine de la création d'arbres binaires aléatoires. Des processus de branchement binaire qui a priori auraient pu être des candidats tout à fait crédibles et qui d'ailleurs ont fait partie des hypothétiques modèles que l'on a éliminé pour décrire le processus de branchement de type DLA plus haut dans la sous-section 5.1.3.

Dans [66] J. G. Masek et D. L. Turcotte ont eux mesuré les ordres de Strahler cette fois-ci de forêts d'arbres de type DLA ayant crû sur un réseau carré, dans le but de rapprocher leur morphologie de celle des réseaux de drainage. Un réseau de drainage correspond au réseau de cours d'eau convergeant à l'intérieur d'un bassin versant en direction d'un point géographique donné. De façon analogue à ce qui avait été fait précédemment dans [108], la volonté des auteurs est de justifier l'utilisation du modèle DLA comme un processus de branchement crédible pour simuler le profil des réseaux de drainage. Ainsi c'est tout naturellement qu'ils utiliseront les observables attachées à l'ordre de Strahler pour exhiber les similitudes morphologiques existantes entre les arbres de type DLA et les réseaux de drainage; d'autant qu'à l'origine cet ordre avait été imaginé pour catégoriser la morphologie des réseaux fluviaux. Les lois d'Horton que sont le ratio ordre-multifurcation  $\beta_k$  et le ratio ordre-longueur de chaîne  $\lambda_k$  pour différents réseaux de drainage à travers le monde ont été mesurés constants. Il s'avère qu'ils le sont aussi pour les forêts d'arbres de type DLA qu'ils auront simulé. Ces forêts auront été simulées

telles qu'elles sont décrites sur la (Fig.5 de [66]) et (Fig.6 de [66]), c'est à dire en disposant à l'instant initial, un certain nombre de graines le long d'une des frontières du domaine de simulation. La constance des ratios de multifurcation à différents ordres de Strahler pour des arbres de type DLA ayant crû autour d'un graine centrale, n'avait pas été mis en évidence dans [108]. Cependant dans [122] les mesures auront été faites sur des arbres composés de un à cent millions de nœuds, et il en ressort que les ratios de multifurcation  $\beta_k$  tels que  $k > 1$  convergent tous vers la valeur  $\beta_k \simeq 5.2$  tandis que  $\beta_1 = 5.33$ . Cette différence de résultat avec [108] est expliquée dans [122] par le fait que pour correctement estimer la valeur vers laquelle converge le ratio de multifurcation  $\beta_k$  d'un arbre enraciné donné, il est nécessaire que l'ordre  $\omega_S = k \ll N_S$ ,  $N_S$  le nombre de Strahler de l'arbre tout entier. Compte tenu du fait que le nombre Strahler d'un arbre croît habituellement logarithmiquement avec le nombre de nœuds qui composent le dit arbre et que cela est le cas pour les arbres de type DLA ; cela nécessite donc un grand nombre d'accrétions avant d'obtenir des données exploitables pour des arbres de type DLA. C'est aussi une des raisons qui nous aura motivé à construire un autre type d'ordre des cours d'eau pour appréhender au mieux la morphologie des arbres de type DLA ainsi que celle des arborescences que l'on obtient en déposant des agrégats atomiques à la surface d'un substrat et pourquoi pas les comparer à notre tour.

### 5.3 . L'arbre de type DLA : une arborescence fractale statistique hétérogène auto-affine

#### 5.3.1 . Hiérarchisations des chaînes d'une arborescence DLA suivant l'ordre de Strahler

Sur la (Fig.5.10) en haut est représentée une fractale arborescente auto-similaire décrite pour la première fois par B. Mandelbrot et T. Vicsek en 1989 [64]. Cette fractale auto-similaire est déterministe et uniforme et donc lors du processus récursif à l'origine de sa construction, la procédure  $S$  comportera une seule échelle de contraction. Soient  $f$  cette contraction (homothétie) définie telle que  $\forall(x, y) \in (\mathbb{R}^2)^2$ ,  $|f(x) - f(y)| = \frac{1}{2}|x - y|$ ,  $g_1$ ,  $g_2$  et  $g_3$  trois isométries ou compositions d'isométries. On définit alors  $S = f \circ \sum_{i=1}^3 g_i = f \circ \sum_{i=1}^2 g_i + f \circ g_3$  cette procédure qui, appliquée à n'importe quel sous-ensemble compact fermé non vide  $E \subset \mathbb{R}^2$  une infinité de fois, aboutira à l'unique support  $F \subset \mathbb{R}^2$  pour lequel la procédure  $S$  est une involution tel que  $S^t(E) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} F$ . On peut noter que dans la procédure  $S$ ,  $f \circ g_3$  sera la similitude responsable à chacune des itérations  $t$  de l'apparition de nouvelles branches à cette arborescence fractale. Ainsi d'après (1.61) on obtient l'équation  $H^s(F) = 3 \cdot \frac{H^s(F)}{2^s}$  et donc d'après (1.63), la dimension de Hausdorff de cette fractale vaut  $s = \dim_H(F) = \frac{\log(3)}{\log(2)}$ .

En ce qui concerne la fractale arborescente représentée au milieu de la (Fig.5.10), bien que celle-ci soit aussi auto-similaire et qui plus est apparentée à la fractale arborescente déterministe décrite plus haut [64], elle aura la particularité d'être statistique hétérogène. Cette fractale statistique hétérogène pourrait être générée par l'application répétée à l'infini à un support quelconque  $E$  de la procédure  $S_{rand} = f \circ \sum_{i=1}^2 g_i + f \circ \sum_{i=1}^X g_{rand}$ . Les applications  $f$ ,  $g_1$  et  $g_2$  composant la procédure  $S_{rand}$  seraient définies comme précédemment pour  $S$  ; tandis que les applications  $g_{rand}$  elles seraient des isométries ou des compositions d'isométries choisies

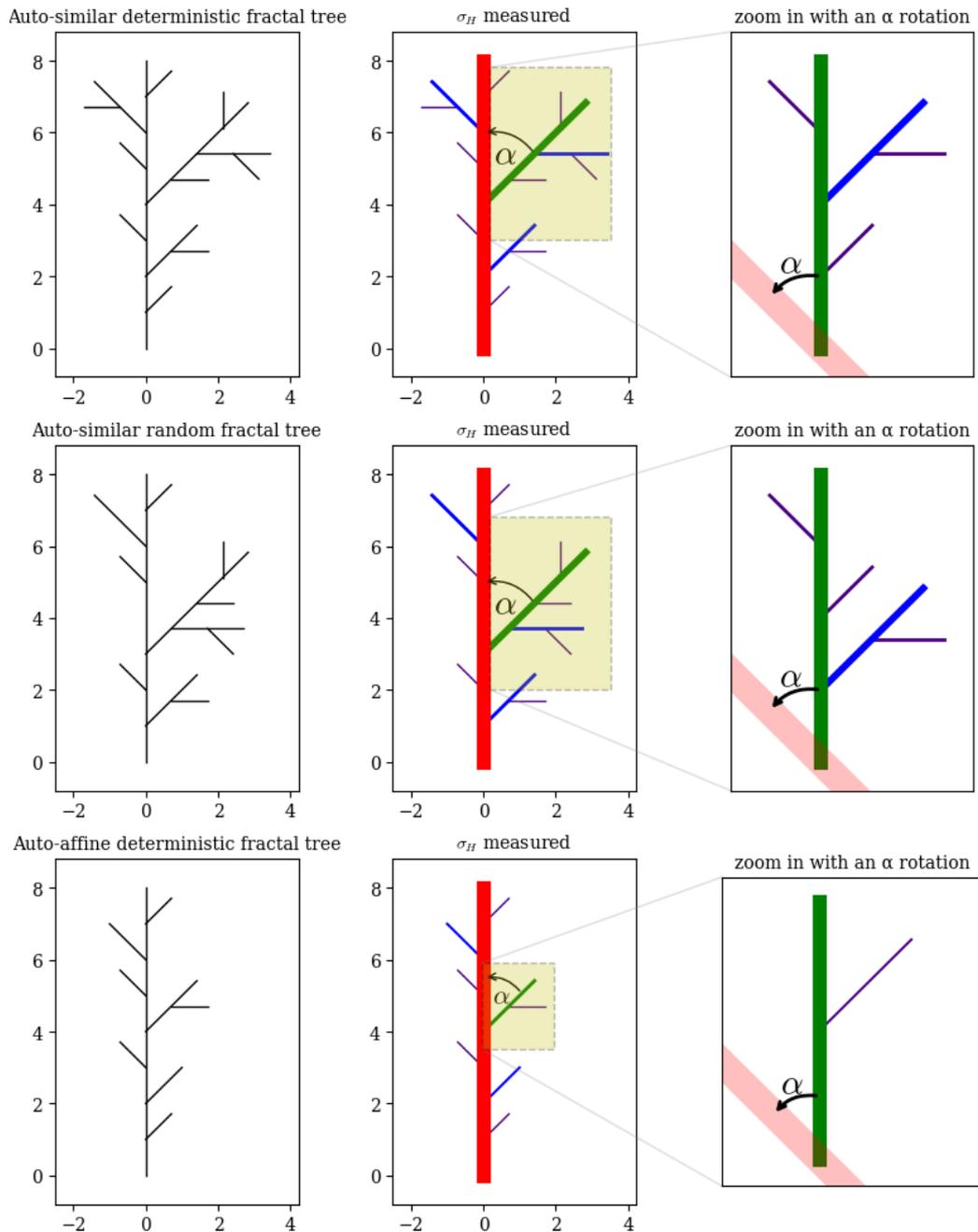


Figure 5.10 – Représentation de trois exemples de fractales arborescentes. On retrouve une arborescence fractale déterministe auto-similaire (haut), une fractale arborescente auto-similaire statistique hétérogène (milieu) dont la procédure  $S$  à l'origine de sa construction est apparentée à celle de la fractale du haut et enfin une fractale arborescente déterministe auto-affine (bas)

aléatoirement parmi un ensemble d'applications données. Ainsi pour chaque branche créée à une itération  $t$  donnée, il existerait une variable aléatoire  $X \in \{0, 1\}$  suivant une loi uniforme, définissant le nombre aléatoire de copies du support qui seraient ajoutées à celles-ci lors de l'itération  $t + 1$  de ce processus récursif. Suivant cette description, la dimension de Hausdorff de cette fractale statistique hétérogène serait égale à  $dim_H(F) = \frac{\log(2+\langle X \rangle)}{\log(2)} = \frac{\log(2.5)}{\log(2)}$ . Pour autant si on avait fait le choix pour la variable aléatoire  $X$  de la distribuer suivant une loi uniforme sur l'intervalle  $\{0, 1, 2\}$ , la dimension fractale obtenue pour cette fractale statistique serait identique à celle calculée précédemment pour la fractale déterministe dont elle est inspirée.

Assez naturellement, ces arborescences fractales peuvent être conçues comme des arbres enracinés  $T(V, E)$  pour lesquels l'ensemble des nœuds  $V$  sont soit des terminaisons, soit des multifurcations de ces arborescences fractales. Prenons le cas de l'arborescence fractale représentée en haut de la (Fig.5.10). A chacune des itérations du processus de sa construction, l'arbre qui la représente évolue. Ainsi durant une itération  $t + 1$  donnée, chacun de ses liens  $E(t)$  sera alors remplacé par trois nouveaux liens. Dit plus formellement,  $\forall e = (v_i, v_j) \in E(t)$  on trouvera à sa place les nouveaux liens  $e_1 = (v_i, v_a)$ ,  $e_2 = (v_j, v_a)$  et  $e_3 = (v_a, v_b)$  avec  $v_a$  et  $v_b$  deux nouveaux nœuds respectivement une multifurcation et une terminaison de l'arbre  $T(V(t+1), E(t+1))$ . Dans [122], I. Yekutieli aura entre autres étudié cette fractale déterministe uniforme en appréhendant sa morphologie aussi grâce à l'ordre de Strahler. Il démontre ainsi que pour la pré-fractale obtenue après  $t \in \mathbb{N}$  itérations de la procédure  $S$ ,  $N_{k,t} = Card(C_{\omega_S}(k))$  le nombre de liens dont l'ordre de Strahler vaut  $\omega_S = k$  est défini par la suite arithmético-géométrique suivante :

$$N_{k,t} = \begin{cases} 3N_{k,t-1} - 1 & \text{si } k < t + 1 \\ 1 & \text{si } k = t + 1 \\ 0 & \text{si } k > t + 1 \end{cases} \quad (5.11)$$

dont la formule explicite est alors :

$$N_{k,t} = \begin{cases} \frac{1}{2}(3^{t+1-k} + 1) & \text{si } k \leq t + 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.12)$$

Dès lors toujours pour la pré-fractale obtenue après  $t \in \mathbb{N}$  itérations de la procédure  $S$ , d'après (5.8) et (5.12) les ratios de multifurcation  $\beta_{k,t}$  sont donnés par la formule de récurrence explicite suivante :

$$\beta_{k,t} = \begin{cases} \frac{(3^{t+1-k} + 1)}{(3^{t-k} + 1)} & \text{si } k < t + 1 \\ \emptyset & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.13)$$

Or plus la pré-fractale se rapproche de l'image de la fractale, plus naturellement  $t \gg 1$  et :

$$\forall k \in \mathbb{N}^*, \beta_k \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 3 \quad (5.14)$$

Plus généralement, si la procédure  $S = f \circ \sum_{i=1}^2 g_i + f \circ \sum_{i=3}^{2+m} g_i$  on définit alors  $m$  la multiplicité de cette procédure. C'est à dire pour chaque branche créée à une itération  $t$  donnée du processus récursif, le nombre  $m$  de nouvelles branches que l'on viendra rajouter à chacune d'elles. D'après cette description, la dimension de Hausdorff de cette fractale déterministe serait

égale à  $dim_H(F) = \frac{\log(2m+1)}{\log(m+1)}$ . Ainsi à chacune des itérations  $t + 1$  du processus récursif on remplace alors chacun des liens  $E(t)$  de l'arbre  $T(E(T), V(T))$  par  $2m + 1$  nouveaux liens, entraînant l'ajout aussi de  $m$  nouvelles multifurcations et  $m$  nouvelles terminaisons,  $\forall m \in \mathbb{N}^*$ , les formules (5.11) et (5.12) précédentes deviennent :

$$N_{k,t} = \begin{cases} (2m + 1)N_{k,t-1} - m & \text{si } k < t + 1 \\ 1 & \text{si } k = t + 1 \\ 0 & \text{si } k > t + 1 \end{cases} \quad (5.15)$$

dont la formule explicite est alors :

$$N_{k,t} = \begin{cases} \frac{1}{2}((2m + 1)^{t+1-k} + 1) & \text{si } k \leq t + 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.16)$$

Et donc (5.14) devient :

$$\forall k \in \mathbb{N}^*, \beta_k \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 2m + 1 \quad (5.17)$$

Dès lors il existe une équivalence entre le fait qu'une arborescence soit fractale et la propriété suivante :

$$\forall k \in \mathbb{N}^*, \beta_k \sim \beta \in \mathbb{R}^+ \quad (5.18)$$

En effet la propriété (5.18) est vraie si et seulement si il existe une procédure  $S$  qui répétée à l'infini sur n'importe quel support  $E$  amènera celui-ci à converger vers un support unique  $F$  pour lequel la procédure  $S$  est une involution (1.40). Attention cependant comme il est mentionné dans [122], la propriété (5.18) ne vérifie pas qu'une arborescence fractale est auto-similaire. Une fractale n'étant pas forcément auto-similaire, il est tout à fait possible que la propriété (5.18) soit vraie pour des arborescences fractales qui du reste ne sont pas auto-similaires. En effet la propriété (5.18) ne permet pas de nous assurer qu'à chaque itération du processus récursif visant à construire la fractale  $F$ , la procédure  $S$  est une similitude. Or rappelons que suivant la définition donnée dans la section 1.4 d'une fractale auto-similaire, une condition pour qu'elle le soit, dépend du fait que cette procédure  $S$  soit une similitude. Cette incapacité est liée au fait que l'ordre de Strahler par construction ne prend pas en compte la longueur des chaînes qu'il hiérarchise. Ainsi on ne peut pas affirmer que les arbres enracinés de type DLA sont auto-similaires à partir du seul constat que leurs ratios de multifurcation sont tous égaux entre eux à l'exception de  $\beta_1$ . Si il fallait un contre exemple pour se convaincre de cette non équivalence, nous nous intéresserions à la valeur des taux de multifurcations de l'arborescence représentée en bas de la (Fig.5.10). Dès lors nous constaterions que pour celle-ci, la propriété (5.18) serait vérifiée. Pour autant et nous le décrirons mieux par la suite, la procédure  $S$  qui répétée à l'infini, permettra de construire cette arborescence fractale, n'est pas une similitude mais une fonction affine et plus précisément une contraction anisotrope (1.74). Ainsi l'arborescence représentée sur le bas de la (Fig.5.10), n'est pas auto-similaire mais auto-affine et donc constitue un contre exemple tout à fait satisfaisant pour valider cette démonstration.

### 5.3.2 . Hiérarchisations des branches d'une arborescence par la mesure de leurs abscisses curvilignes

Nous avons donc besoin d'établir une mesure reposant sur un ordre des cours d'eau  $\omega$ , à partir de laquelle nous serons en capacité d'affirmer, si une arborescence fractale est auto-similaire ou ne l'est pas. Pour ce qui était du choix de l'ordonnement qui sous tendrait cette

mesure, nous avons choisi l'ordre des cours d'eau classique ou ordre de Hack. Ce choix a été motivé par le fait que ce sont des branches qui sont ordonnées par l'ordre de Hack, à la différence de l'ordre de Strahler qui, lui, ordonne des chaînes. Qui plus est des branches spécifiques reliant pour chacune d'entre elles une certaine multifurcation à une certaine terminaison (voir plus haut dans la sous-section 5.2.1 la définition de l'ordre des cours d'eau classique). Or il se trouve que ces branches sont des supports qui, transformés une infinité de fois par une procédure  $S$  donnée, donnent naissance au support d'une fractale arborescente. Cependant à l'instar de l'ordre de Strahler, l'ordre de Hack pâtit toujours du fait de ne pas prendre en compte les profondeurs des branches dans sa manière de les hiérarchiser. On définit alors la mesure  $\sigma_H$ , pour chacune des branches ayant été ordonnées par l'ordre de Hack  $\omega_H$ . Dit plus formellement, on définit la mesure  $\sigma_H$ , pour l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  défini d'après (5.2). Pour chacune des ces branches la mesure  $\sigma_H$  correspondra à celle de leurs abscisses curviligne  $\sigma \in \mathbb{R}^+$ .

$$\sigma_H(b) = \sigma \in \mathbb{R}^+, \forall b \in \bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k) \quad (5.19)$$

Or il arrive que  $\sigma \in \mathbb{N}$ . Dès lors du point de vue de la théorie des graphes la profondeur des branches de  $T(V, E)$  pourra être confondue avec  $\sigma$ . Ceci est le cas pour l'exemple des arborescences fractales de la (Fig.5.10).

A présent commençons à montrer la relation qui existe entre la mesure  $\sigma_H$  et le processus récursif à l'origine de la construction d'une arborescence fractale. Soient  $E'(t)$  l'ensemble des hyperliens identifiés par l'ordre de Hack sur une arborescence fractale obtenue après  $t$  itérations du processus récursif à l'origine de sa construction et  $B(t)$  l'ensemble des branches associées aux hyperliens  $E'(t) \setminus E'(t-1)$ . Prenons alors l'exemple des arborescences fractales de la (Fig.5.10),  $\forall (b_i, b_j) \in B(t) \times B(t+1)$ ,  $\sigma_H(b_j) = \frac{\sigma_H(b_i)}{2}$ , c'est à dire  $\forall (b_i, b_j) \in B(0) \times B(t)$ ,  $\sigma_H(b_j) = \frac{\sigma_H(b_i)}{2^t}$ . Afin de plus facilement se figurer cette relation directe qui existe entre la mesure  $\sigma_H$  et la procédure  $S$ , on peut raisonner à partir des trois premières itérations du processus récursif à l'origine de la construction de cette fractale arborescente représenté en haut de la (Fig.5.10). Ainsi à  $t = 0$  on démarre avec le support initial qui n'est autre que la branche rouge dont la mesure  $\sigma_H = d = 2^3$ , à  $t = 1$  on obtiendra de nouveau cette branche ainsi que la branche verte dont la mesure  $\sigma_H = 2^2$ , puis à  $t = 2$  on obtiendra de nouveau ces deux branches ainsi que les branches bleues dont la mesure  $\sigma_H = 2^1$ , et ainsi de suite pour  $t \rightarrow +\infty$ .

Notons aussi que lors de l'étude d'arbres enracinés aléatoires issus d'un processus d'accrétion hors équilibre comme peut l'être le processus DLA, la mesure  $\sigma_H$  aura l'avantage d'éviter à une itération  $n$  donnée de ces processus d'accrétion, de confondre au même niveau hiérarchique des branches qui de toute évidence du simple fait de l'observation, possèdent des abscisses curvilignes significativement différentes et donc ne devrait pas avoir la même importance dans la hiérarchie qui ordonne la morphologie de l'arbre. Rappelons que ces arbres enracinés seront au mieux des pré-fractales, qui plus est avec souvent un nombre significatif de branches qui n'auront pas fini de grandir et/ou d'être décorées par d'autres branches plus petites encore. Sur l'exemple de la (Fig.5.11) en pondérant les branches de l'arbre grâce à la mesure  $\sigma_H$ , on évite de confondre au même niveau hiérarchique la branche  $B$  avec les branches  $C$  et  $D$  bien moins profondes. Or en se limitant à la seule donnée de l'ordre de Hack, nous n'aurions pas pu

l'éviter. De même en ce qui concerne l'ordre de Strahler, au mieux cette information sera prise en compte lorsque l'on mesurera le ratio d'ordre-longueur  $\lambda_k$  (5.9), mais celle-ci moyennée sur l'ensemble des chaînes d'un ordre  $\omega_S$  donné qui plus est tout cela seulement après que la hiérarchisation des branches ait été faite.

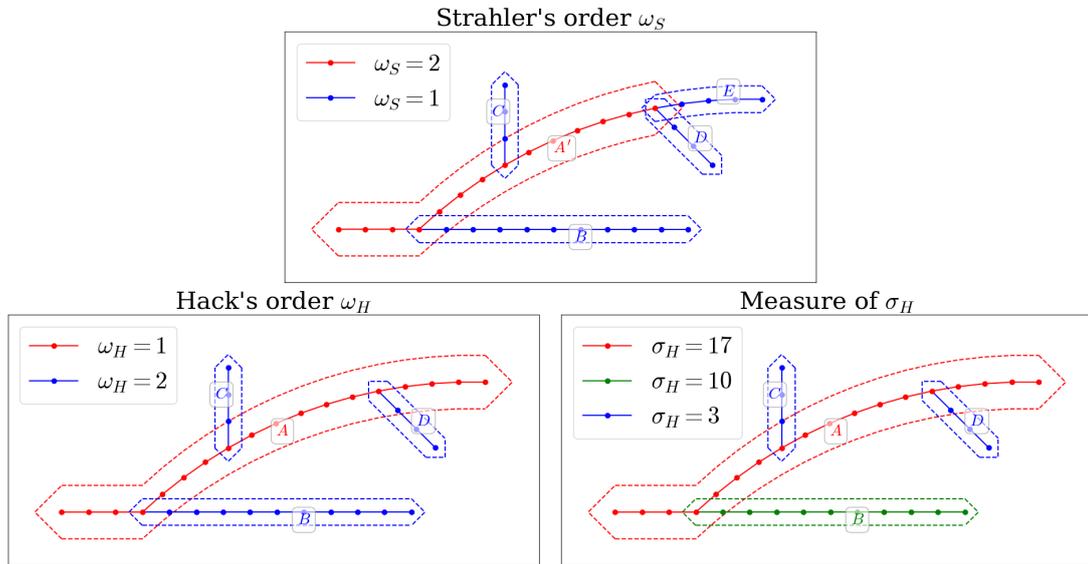


Figure 5.11 – Application pour un arbre enraciné quelconque  $T(V, E)$  graphe hôte d'un hyperarbre  $H(V, E')$ , de deux types d'ordres des cours d'eau : L'ordre de Strahler  $\omega_S$  (haut) et l'ordre de Hack  $\omega_H$  ainsi que de la mesure  $\sigma_H$  reposant sur cet ordre (bas). Les cadres représentent les hyperliens de  $E'$  reliant l'ensemble des nœuds se trouvant à l'intérieur de ces derniers. Les chaînes associées à ces hyperliens sont composées des liens de  $E$  encadrés eux aussi.

Désormais pour chacun des ensembles  $C(\sigma(c) = L)$  définis comme d'après (5.1), regroupant sans distinction toutes les branches possédant une abscisse curviligne  $L \in \mathbb{R}^{+*}$ , nous nous intéresserons à la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  (5.19) des branches de l'ensemble  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b$  avec  $C_b$  défini comme d'après (5.3). Lorsque l'on mesure cette distribution pour la pré-fractale arborescente auto-similaire de la (Fig.5.12) dont les branches ont des profondeurs égales à leurs abscisses curvilignes  $\sigma = d \in \mathbb{N}^*$ ; on constate que pour un ensemble de branches  $C(\sigma(c) = d)$  donné, cette distribution évolue en fonction de la mesure  $\sigma_H$  comme :

$$Card(\sigma_H) = d \cdot \frac{1}{2} \cdot \sigma_H^{-1}, \forall \sigma_H \in \mathbb{N}^* \quad (5.20)$$

Par la suite nous verrons que cette distribution (5.20) correspond à l'expression dans le cas particulier de la fractale arborescente représentée sur la (Fig.5.12), de l'équation plus générale (5.26). Dès lors afin de comprendre comment nous sommes parvenus à établir la formule (5.26) pour n'importe quelles fractales arborescentes, nous allons convertir celles-ci en courbes fractales plongées dans un espace à  $N_H$  dimension. A l'instar de ce que représente le nombre

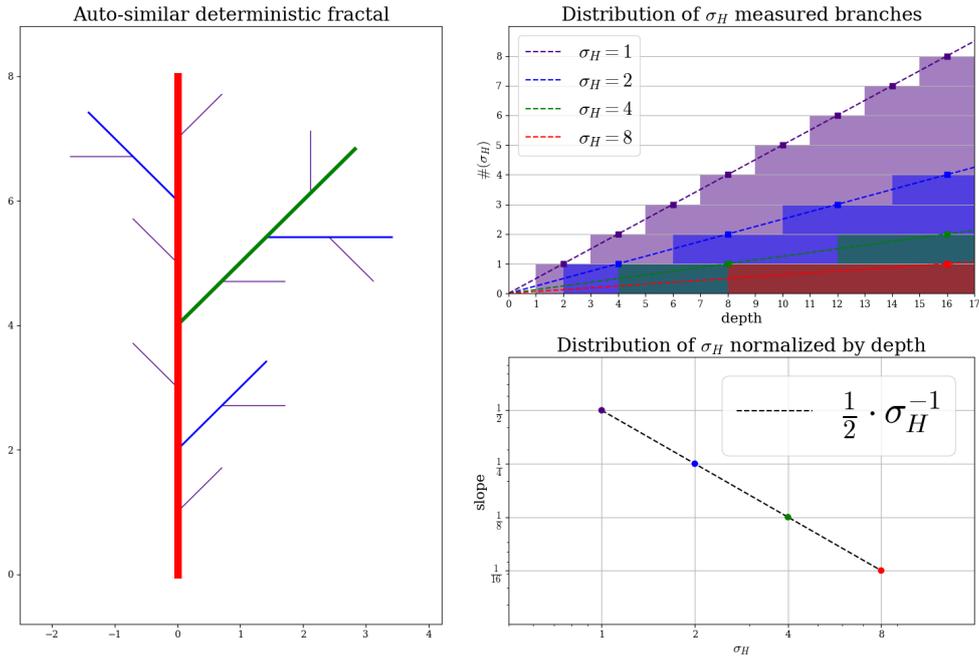


Figure 5.12 – (Gauche) Hiérarchisations par la mesure des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  de l'arborescence fractale déterministe auto-similaire uniforme du haut de la (Fig.5.10). (droite haut) Pour cette fractale et cela quelque fuisse la profondeur d'une de ses branches  $c$ , aura été tracée la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $C_c$ . (droite bas) Cette même distribution aura aussi été normalisée en fonction de la profondeur de la branche  $c$ .

de Strahler  $N_S$  pour son ordre (5.7), ici  $N_H$  renvoie à :

$$N_H = \max(\{\omega_H(e) \mid e \in E\}) \quad (5.21)$$

d'un arbre enraciné  $T(V, E)$  qui aurait été hiérarchisé par l'ordre classique des cours d'eau ou l'ordre de Hack (attention cependant à ne pas confondre  $N_H$  avec (5.6) la loi de Hack). On définit donc un espace à  $N_H$  dimensions dans lequel les branches d'ordre  $\omega_H = k$  sont des segments dont les longueurs correspondent à leurs mesures  $\sigma_H$ . Ces segments associés aux branches d'ordre  $\omega_H = k$  seront dirigés par le vecteur  $\mathbf{u}_k \in \mathbb{R}^{N_H}$  qui avec  $N_H - 1$  autres vecteurs définissent une base orthogonale de cet espace à  $N_H$  dimensions. Alors parmi les plans à deux dimensions définis par le couple de vecteurs  $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1})$ , il en existe un par branche d'ordre  $\omega_H$ , c'est à dire  $\text{Card}(C_{\omega_H}(k))$  en tout, dans lesquelles on retrouvera pour chacun d'entre eux ces branches d'ordre  $\omega_H = k$  décorées par l'ensemble des branches d'ordre  $\omega_H = k + 1$  qui leur sont attachées à différentes positions de leurs abscisses curvilignes  $\sigma$ . Dans chacun de ces plans, les branches de l'arborescence fractale décrivent ce qui pourrait s'apparenter à un peigne de Dirac, dont les valeurs absolues des magnitudes de ses "dents" (diracs) correspondent aux mesures  $\sigma_H$  des branches dirigées suivant  $\mathbf{u}_{k+1}$  auxquelles chacune

des ses dents renvoie. Quant aux signes de ces magnitudes, eux dépendent des sens dans lesquels ces branches sont dirigées. Ainsi dans un plan défini par le couple de vecteurs  $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1})$ , pour une branche  $b \in C(\sigma(c) = L)$  d'ordre  $\omega_H = k$  telle que  $L \in \mathbb{R}^{+*}$ , on trouve le peigne de Dirac suivant :

$$\text{III}_b(x) = \sum_{c_i \in C_b} \pm \sigma_H(c_i) \delta(x - x_i), \quad \forall x \in ]0, L[ \quad (5.22)$$

Avec  $C_b \subset C_{\omega_H}(k+1)$  l'ensemble défini tel que (5.3) et  $\forall c_i \in C_b, x_i \in ]0, L[$  les positions des multifurcations visitées par la branche  $b$  reliant celle-ci avec l'ensemble des branches  $C_b$ . Une primitive de cette distribution est donc :

$$\text{II}_b(x) = \sum_{c_i \in C_b} \pm \sigma_H(c_i) H(x - x_i), \quad \forall x \in ]0, L[ \quad (5.23)$$

telle que  $\forall x \in \mathbb{R}, H(x)$  est la fonction d'Heaviside. Pour l'exemple de la fractale arborescente autosimilaire décrite précédemment sur la (Fig.5.12),  $\forall b \in C(\sigma(c) = d)$  telle que  $d \in \mathbb{N}^*$ , les distributions  $\text{III}_b(x)$  et  $\text{II}_b(x)$  sont représentées sur la (Fig.5.13).

Quelle que soit l'arborescence fractale que nous serons amenés à étudier, nous venons de montrer qu'il est possible de construire pour n'importe laquelle de ses branches  $b$  la fonction continue par morceaux  $\text{II}_b$  (5.23). En mesurant la dimension fractale des courbes générées par ces fonctions  $\text{II}$  comme nous avons pu le faire pour celles décrites dans la section 1.6, nous évaluerons leur exposant de Hurst  $H$  (1.80). A ce stade, rappelons que cet exposant intervenant dans le calcul de la dimension fractale d'une courbe, renvoie directement à son caractère auto-similaire si  $H = 1$  ou auto-affine sinon. Dès lors en évaluant le caractère autosimilaire ou auto-affine des courbes tracées à partir des fonctions  $\text{II}$  de chacune des branches d'une arborescence fractale quelconque, nous évaluerons de fait celui de l'arborescence elle-même. Or la décomposition en ondelette de ces courbes fractales qui plus est par le biais d'ondelettes de Haar (1.94) dont le profil sera plus que jamais adapté ici pour cette décomposition, nous donne d'après (1.100)  $\forall k \in \mathbb{N}$  et  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$  :

$$\left\langle \left| \langle \text{II}(x) \rangle_{I_{(\frac{L}{2^k}, a)}} - \langle \text{II}(x) \rangle_{I_{(\frac{L}{2^k}, b)}} \right| \right\rangle = \sum_{j=1}^M \frac{2^{-H_j}}{M} \left\langle \left| \langle \text{II}(x) \rangle_{I_{(\frac{L}{2^{k-1}}, a)}} - \langle \text{II}(x) \rangle_{I_{(\frac{L}{2^{k-1}}, b)}} \right| \right\rangle \quad (5.24)$$

avec  $M$  le nombre de contractions  $f_j = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_j+1} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_j+1} H_j \end{pmatrix}$  potentiellement anisotropes (1.74)

composant la procédure  $S$  pour laquelle le support  $F$  tracé de la fonction  $\text{II}$  est invariant et  $H_j \in ]0, 1[$  l'exposant de Hurst pour chacune de ces échelles de contractions.  $I_{(\frac{L}{2^k}, a)} = [\frac{L}{2^{k+1}} + \frac{nL}{2^k}, \frac{(n+1)L}{2^k}[$  et  $I_{(\frac{L}{2^k}, b)} = [\frac{nL}{2^k}, \frac{L}{2^{k+1}} + \frac{nL}{2^k}[$  quant à eux sont les intervalles définis tels que  $n \in \llbracket 0, 2^k - 1 \rrbracket$  inclus nécessairement dans l'intervalle  $[0, L[$ .

Ainsi d'après (1.84),  $\forall b \in C(\sigma(c) = L)$  telle que  $L \in \mathbb{R}^{+*}$ , les courbes tracées à partir des fonctions  $\text{II}_b$  des branches  $b$  d'une arborescence fractale sont définies telles que :

$$\sqrt{\text{var}(\Delta \text{II}(\Delta x))} = \frac{\sum_{j=1}^M (m_j + 1) \cdot \lambda_j \cdot \Delta x^{H_j}}{M}, \quad \forall \Delta x \in ]0, L[ \quad (5.25)$$

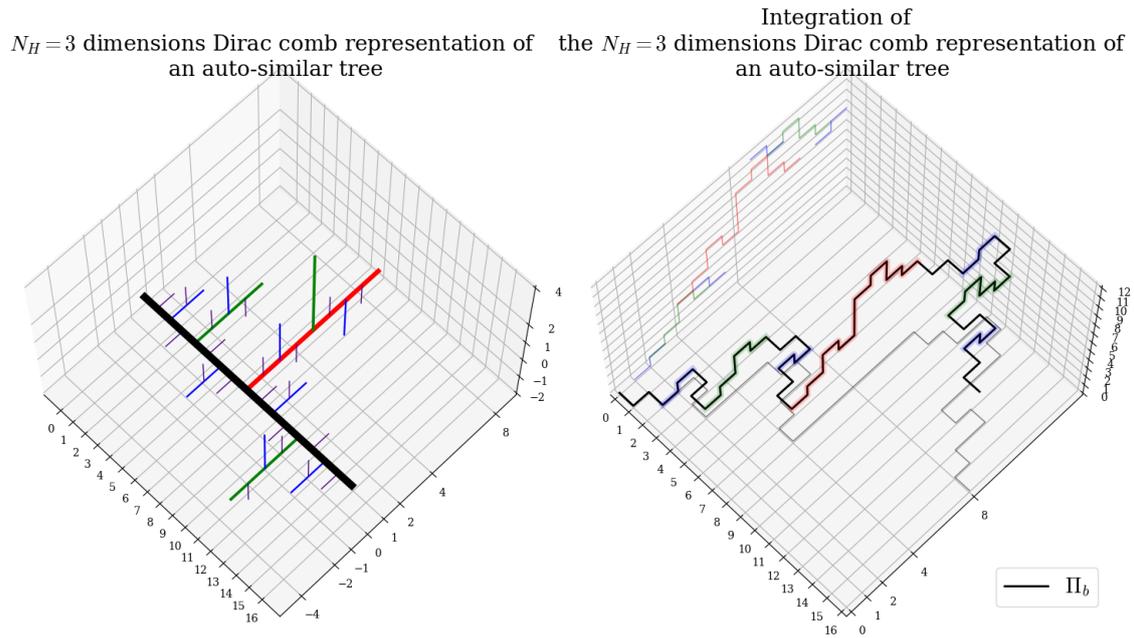


Figure 5.13 – Une pré-fractale arborescente auto-similaire uniforme construite suivant la même procédure  $S$  que celle de la (Fig.5.12) et pour laquelle  $N_H = 3$ . Ici celle-ci est représentée sous la forme de son peigne de Dirac (gauche) décrit comme d'après (5.22), ainsi que sa fonction continue par morceau  $\Pi_b$  (droite) (5.23) résultant de l'intégration de ce dernier, la branche  $b$  d'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$  appartenant à un arbre enraciné  $T(V, E)$  constituant cette pré-fractale.

avec  $m_j$  la multiplicité et  $\lambda_j$  le coefficient de proportionnalité de la  $i^{me}$  échelle de contraction qui n'est autre, dans le cas où la fractale arborescente est auto-similaire ( $\forall j \in \llbracket 1, M \rrbracket$ ,  $H_j = 1$ ), que le rapport d'homothétie d'une des  $M$  similitudes à l'origine de la construction des branches de l'ensemble  $C_b$  (5.3) attachées à la branche  $b$ . Ainsi d'après (5.25) on en déduit finalement la formule (5.26) :

$$Card(\sigma_H) = L \cdot \frac{\sum_{j=1}^M m_j \cdot \lambda_j \cdot \sigma_H^{-\frac{1}{H_j}}}{M}, \forall \sigma_H \in ]0, L[ \quad (5.26)$$

généralisant le résultat (5.20) obtenu plus haut pour la fractale arborescente auto-similaire uniforme représentée sur la (Fig.5.12). Notons que si l'on pose  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$ ,  $\sigma_H = \alpha \cdot L$  avec  $\alpha \in ]0, 1[$ , dans le cas où la fractale arborescente est auto-similaire alors la distribution (5.26) peut s'écrire :

$$Card(\alpha) = \frac{\sum_{j=1}^M m_j \cdot \lambda_j \cdot \alpha^{-1}}{M}, \forall \alpha \in ]0, 1[ \quad (5.27)$$

Cette simplification est possible puisque  $H_j = 1$ . Celle-ci est caractéristique de l'**invariance d'échelle par le même facteur de contraction suivant toutes les directions de l'espace** d'une fractale auto-similaire. Ceci n'est évidemment pas vérifié pour le reste des fractales arborescentes auto-affines pour lesquelles les éléments de la diagonale des contractions anisotropes  $f_j$  ne sont pas égaux.

A présent nous sommes en mesure de réaliser l'analyse du caractère fractale des arborescences issues de processus d'accrétion de type DLA auxquelles nous attachons un intérêt certain dans ce travail grâce aux équations (5.24), (5.25) et (5.26). Mais avant cela nous allons mettre en application ces équations, pour trois différents exemples bien choisis de fractales arborescentes dont on connaît d'ores et déjà les caractéristiques et ainsi constater les informations pertinentes que nous pourront mettre à jour par la suite pour n'importe quel type de fractale arborescente que nous serons potentiellement amenés à étudier.

La (Fig.5.14) représente pour une branche  $b$  donnée dont l'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$ , le peigne de Dirac  $\mathbb{I}\mathbb{I}_b$  ainsi que la fonction continue par morceau  $\Pi_b$  construits à partir de la fractale arborescente déterministe uniforme vue précédemment sur la (Fig.5.12). On rappelle que pour n'importe quelle branche d'un ensemble  $C(\sigma(c) = L)$  donné, l'équation (5.20) donne la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches de l'ensemble  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b$  qui leur sont attachées. Or  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$ , on trouve bien que  $\sqrt{\text{var}(\Delta\Pi(\Delta x))} = \Delta x, \forall \Delta x \in ]0, L[$  ce qui correspond bien à la description de fonction attendue pour cette fractale autosimilaire ( $H = 1$ ), uniforme ( $M = 1$ ) dont le rapport d'homothétie vaut  $\lambda = \frac{1}{2}$  et la multiplicité  $m = 1$ .

La deuxième fractale arborescente que nous avons choisi parmi ces trois stéréotypes est auto-similaire mais non uniforme cette fois-ci. Le nombre de ses échelles de contraction est  $M = 2$ . L'une d'entre elle conserve comme pour la fractale précédente un rapport d'homothétie  $\lambda_1 = \frac{1}{2}$  tandis que l'autre aura un rapport  $\lambda_2 = \frac{1}{3}$ . Du reste la multiplicité de ces deux échelles est  $m_1 = m_2 = m = 1$ . Ainsi comme cela était le cas pour la fractale précédente; Sur la (Fig.5.15)  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$  la décomposition en ondelette de la fonction  $\Pi_b$  d'une branche  $b \in C(\sigma(c) = L)$  de cette fractale arborescente satisfait toujours  $\sqrt{\text{var}(\Delta\Pi(\Delta x))} \propto \Delta x, \forall \Delta x \in ]0, L[$  étant donné qu'elle aussi est auto-similaire ( $H_1 = H_2 = H = 1$ ), plus précisément  $\sqrt{\text{var}(\Delta\Pi(\Delta x))} = (\frac{1}{2} + \frac{1}{3}) \cdot \Delta x, \forall \Delta x \in ]0, L[$ . Cependant quelle que soit la branche  $b$  que l'on choisira de sélectionner sur l'arbre enraciné représentant cette arborescence fractale, la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches de l'ensemble  $C_b$ , verra ses valeurs  $\text{Card}(\sigma_H)$  osciller successivement entre les  $M = 2$  courbes  $\text{Card}(\sigma_H) = d \cdot \frac{1}{2} \cdot \sigma_H^{-1}$  et  $\text{Card}(\sigma_H) = d \cdot \frac{1}{3} \cdot \sigma_H^{-1}$ . Sur la (Fig.5.15) pour une branche  $b$  dont l'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$ , nous avons illustré les  $M! = 2!$  possibles répartitions des branches de l'ensemble  $C_b$  qui pourraient lui être attachées. Ainsi pour la répartition représentée sur la (Fig.5.15 bas), pour laquelle nous avons surligné les diracs de son peigne en jaune, la distribution qui lui correspond est celle dont les points auront été eux aussi surlignés en jaune. Inversement pour l'autre répartition représentée sur la (Fig.5.15 haut) sa distribution correspond aux points non surlignés. Dès lors en moyenne on retrouve bien  $\text{Card}(\alpha) = \frac{d}{2} \cdot (\frac{1}{2} + \frac{1}{3}) \cdot \alpha^{-1}, \forall \alpha \in ]0, 1[$  telle que  $\sigma_H = \alpha \cdot L$  comme le prévoit l'équation (5.27). Finalement en plus de vérifier à nouveau que nous sommes en mesure d'évaluer le caractère auto-similaire ou auto-affine d'une arborescence fractale; cet exemple illustre aussi le fait que nous serons en mesure de compter le

nombre  $M$  d'échelles de contraction au sein de la procédure  $S$  à l'origine de sa construction. Pour cela, il suffira d'identifier les  $M$  courbes du type  $Card(\sigma_H) = m_j \cdot \lambda_j \cdot \sigma_H^{-1}$ ,  $\forall j \in \llbracket 1, M \rrbracket$  correspondantes sur lesquelles se répartissent la distributions de l'ensemble des branches  $C_b$  attachées à une branche  $b$  quelconque choisie sur l'arbre enraciné représentant cette fractale arborescente.

Désormais parmi les fractales arborescentes que nous aurons choisies comme exemple, nous allons nous intéresser à celle de la (Fig.5.16) qui est déterministe auto-affine uniforme. Ainsi pour n'importe quelle branche  $b$  de cette arborescence telle que son abscisse curviligne  $\sigma(b) = L \in \mathbb{R}^{+*}$ , la fonction  $\Pi_b$  qui lui sera associée satisfera l'équation  $\sqrt{var(\Delta\Pi(\Delta x))} = \Delta x^{\frac{1}{2}}$ ,  $\forall \Delta x \in ]0, L[$ . La procédure  $S$  à l'origine de la construction de la courbe fractale de la fonction  $\Pi_b$  comporte  $M = 1$  contraction anisotrope  $f = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$  dont la multiplicité  $m = 1$  et le rapport d'homothétie vaut  $\lambda = \frac{1}{2}$ . Enfin les valeurs  $Card(\sigma_H)$  de la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches d'un ensemble  $C_b$ , se localiseront donc sur l'unique courbe  $Card(\sigma_H) = d \cdot \frac{1}{2} \cdot \sigma_H^{-2}$ .

Ces trois différentes fractales arborescentes nous auront donc permis de nous convaincre par l'exemple qu'à partir de l'étude de la distribution des abscisses curvilignes des branches d'un ensemble  $C_b$  attachées à une branche  $b$  d'une arborescence ; nous serons en mesure de savoir si celle-ci est avant toute autre chose bel et bien fractale. Ainsi si les valeurs de cette distribution sont portées par  $M \in \mathbb{N}^*$  fonctions de puissance du type (5.26) alors l'arborescence sera fractale. Du reste nous avons pu constater que les informations que l'on peut extraire de (5.26), sont loin de se résumer à seulement confirmer la fractalité ou non d'une arborescence. En effet nous pourrons en plus déterminer son caractère auto-similaire ou auto-affine en évaluant l'exposant de Hurst  $H$  de la courbe tracée à partir de la fonction  $\Pi_b$ . Nous pourrons également statuer sur le fait que cette fractale arborescente sera uniforme ou non suivant qu'il existera une ou  $M > 1$  courbes sur lesquelles viendront se répartir les valeurs  $Card(\sigma_H)$  de cette distribution. Aussi pour chacune de ces  $M$  échelles de contraction, il sera alors possible d'évaluer précisément le produit  $(m_j + 1)\lambda_j$ ,  $\forall j \in \llbracket 1, M \rrbracket$  de leurs multiplicités avec leurs rapports d'homothétie.

Qu'en est-il alors des arborescences obtenues par un processus d'accrétion de type DLA ? Rappelons d'ores et déjà que les arbres enracinés  $T(V, E)$  de type DLA sur lesquels nous basons notre travail, seront au mieux des pré-fractales étant donné que leur taille  $Card(V) \in \mathbb{N}$  est un entier fini. Ainsi pour différentes intensités  $F$  du champ de force radial uniforme appliqué lors d'un processus d'accrétion de type DLA, nous avons mesuré  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$  les distributions des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches de l'ensemble  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b$  d'un millier d'arbres enracinés comptant dix milles nœuds chacun. On constate alors sur la (Fig.5.18), que chacune de ces distributions voit ses valeurs se répartir suivant  $M = 1$  courbe, pouvant être ajustée par une fonction de puissance et cela pour des branches dont l'abscisse curviligne ne dépasse pas  $\sigma_H \simeq 20$ . Il est à noter toutefois que cette valeur limite de  $\sigma_H$ , pour laquelle l'ajustement de cette courbe par une fonction de puissance devient de moins en moins juste, est intimement liée à la taille des arbres enracinés de type DLA qui auront servi à la construire. Précédemment dans cette sous-section 5.2.2 lorsque l'on abordait l'ordre de Strahler, nous

avons évoqué la nécessité de générer des arbres enracinés de type DLA d'une taille suffisamment importante, pour que les ordres de Strahler des chaînes avec lesquels on estimerait les ratio de multifurcation  $\beta_k$ , satisfassent  $\omega_S = k \ll N_S$  et ainsi que ces  $\beta_k$  puissent converger. A nouveau ici, si l'on veut que la distribution converge correctement avec une fonction de puissance pour des branches dont l'abscisse curviligne atteint une valeur  $\sigma_H$  donnée; il faudra que les arbres enracinés de types DLA ayant servi à calculer cette distribution, soient suffisamment grands pour que chacune des branches  $b \in C(\sigma(c) = L)$  sur lesquelles sont attachées les branches  $C_b$ , soit assez longue pour que  $\sigma_H \ll L \in \mathbb{R}^{+*}$ . Ainsi **l'invariance d'échelle d'un arbre enraciné de type DLA se vérifie sur une certaine plage d'abscisses curvilignes donnée et cela en fonction de la taille que fera cette pré-fractale**. Dès lors pour  $L \rightarrow +\infty$ , c'est à dire lorsque cette pré-fractale tend asymptotiquement à devenir une véritable fractale, cette invariance devrait se vérifier à toutes les échelles. Pour ce qui est du caractère auto-similaire ou auto-affine de ces arborescences, étant donné que nous avons pu réaliser les mesures de leurs distribution (5.26) seulement pour un nombre fini d'intensité  $F$  de champ de force radial uniforme, tout ce que l'on peut dire de manière générale est que les exposants de Hurst des courbes tracées à partir des fonctions continues par morceaux  $\Pi$  décroissent légèrement lorsque  $F$  augmente. Pour une intensité  $F = 0$ , c'est à dire en l'absence de champ de force, l'exposant de Hurst est mesuré à  $H_{F=0} = \frac{1}{1.63}$  sur la (Fig.5.17). Il semblerait donc qu'**en présence d'un champ de force radial uniforme dont l'intensité  $F \geq 0$ , les arborescences pré-fractales produites par un processus d'accrétion de type DLA seront nécessairement auto-affine**. On notera aussi encore une fois au conditionnel, étant donné le petit échantillon d'intensité de champ de force radial uniforme testé, qu'il se pourrait que  $\forall F \in \mathbb{R}$  le produit de la multiplicité avec le rapport d'homothétie vaudrait  $(m + 1)\lambda = 0.3$ . Il semblerait donc qu'**un champ de force radial uniforme agisse uniquement sur le caractère auto-affine d'une arborescence obtenue par un processus d'accrétion de type DLA et cela en faisant évoluer la valeur de l'exposant de Hurst  $H$  de sa fonction  $\Pi$ , sans jamais modifier son rapport d'homothétie  $\lambda$ , ni sa multiplicité  $m$  dont le produit  $(m + 1)\lambda = 0.3, \forall F \in \mathbb{R}$ .**

En conclusion, pour des arborescences générées par un processus d'accrétion de type DLA, nous sommes parvenus à évaluer précisément en fonction de leurs tailles, la gamme d'abscisses curvilignes  $\sigma_H$  sur laquelle on observait l'invariance d'échelle caractéristique de leur nature fractale. Nous avons pu aussi mesurer avec précision le caractère auto-affine de ces arborescences, pour différentes intensités  $F$  d'un champ de force radial uniforme et émettre l'hypothèse selon laquelle le rapport d'homothétie  $\lambda$  ainsi que la multiplicité  $m$  de leurs fonctions  $\Pi$ , ne dépendraient pas du champ de force appliqué lors d'un processus d'accrétion de type DLA. Toutes ces observations, ces résultats, obtenus grâce à la mesure des distributions des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches des ensembles  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b, \forall L \in \mathbb{R}^{+*}$ , ne pouvaient pas être déduits seulement à partir de la valeur de la dimension fractale de ces arborescences. Ainsi cette distribution constitue sans nul doute un outil puissant pour étudier encore plus en détail la nature fractale de telles arborescences.

Avant de clore ce chapitre, nous allons faire une remarque en lien avec la sous-section 5.1.4. Dans cette sous-section nous avons montré que n'importe quel arbre  $T(V, E)$  de type DLA était le fruit d'un processus de branchement particulier. Un processus pour lequel d'après

la (Fig.5.2) après quatre générations, les longueurs des chaînes reliant deux multifurcations, étaient distribuées suivant une loi géométrique  $\mathbb{P}_l$  de paramètre  $p = \mathbb{P}(A_i \neq 1)$  et dont le nombre moyen  $x$  de pères  $v \in V' \subset V$  tels que  $\text{deg}_+(v) > 1$ , était donné par l'équation suivante  $x = \frac{(h+1)^\alpha}{(2 \cdot 0.95 + 3 \cdot 0.05)}$  pour une génération  $G_{V'}(h)$ . Dès lors si on faisait l'erreur de résumer ce processus à un simple processus de Galton-Watson,  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$  la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches de l'ensemble  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b$  de ces arbres devrait suivre la fonction  $\text{Card}(\sigma_H) = ((N - n)p + 1)q^n = ((p \cdot N + 1) - p \cdot n) \cdot e^{n \cdot \log(q)}$ ,  $\forall N \in \mathbb{N}^*$ ,  $\forall n \in \llbracket 1, N \rrbracket$  telle que  $L = N + r$  et  $\sigma_H = n + r$ . Or cette fonction n'est manifestement pas la fonction de puissance mesurée sur les (Fig.5.18), mais le produit d'une exponentielle avec une fonction affine. Ainsi cette distribution confirme de nouveau que les arbres de type DLA ne sont pas des arbres de Galton-Watson.

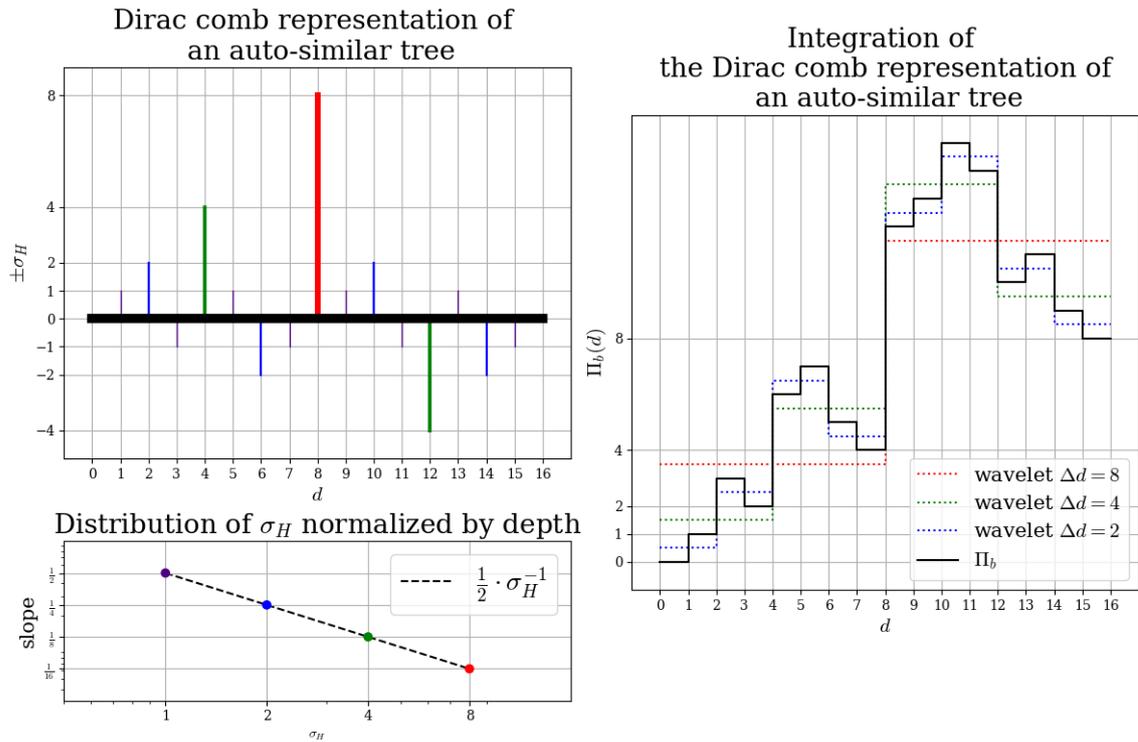


Figure 5.14 – Pour une branche  $b$  d'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$  d'ordre  $\omega_H = k$  d'un arbre enraciné  $T(V, E)$  se constituant comme une pré-fractale arborescente auto-similaire uniforme construite suivant la même procédure  $S$  que celle de la (Fig.5.12), ici est tracée la projection suivant le plan défini par le couple de vecteurs  $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1})$ , du peigne de Dirac (gauche haut) décrit comme d'après (5.22) ainsi que la fonction continue par morceau  $\Pi_b$  (droite) (5.23) associée à cette branche  $b$ . Dans l'encadré de droite sur lequel on trouve cette projection de la fonction  $\Pi_b$ , on aura aussi représenté la décomposition en ondelette de Haar pour différentes échelles  $\Delta d$ . Enfin la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  normalisée par la profondeur des branches qui les portent est aussi également représentée (gauche bas).

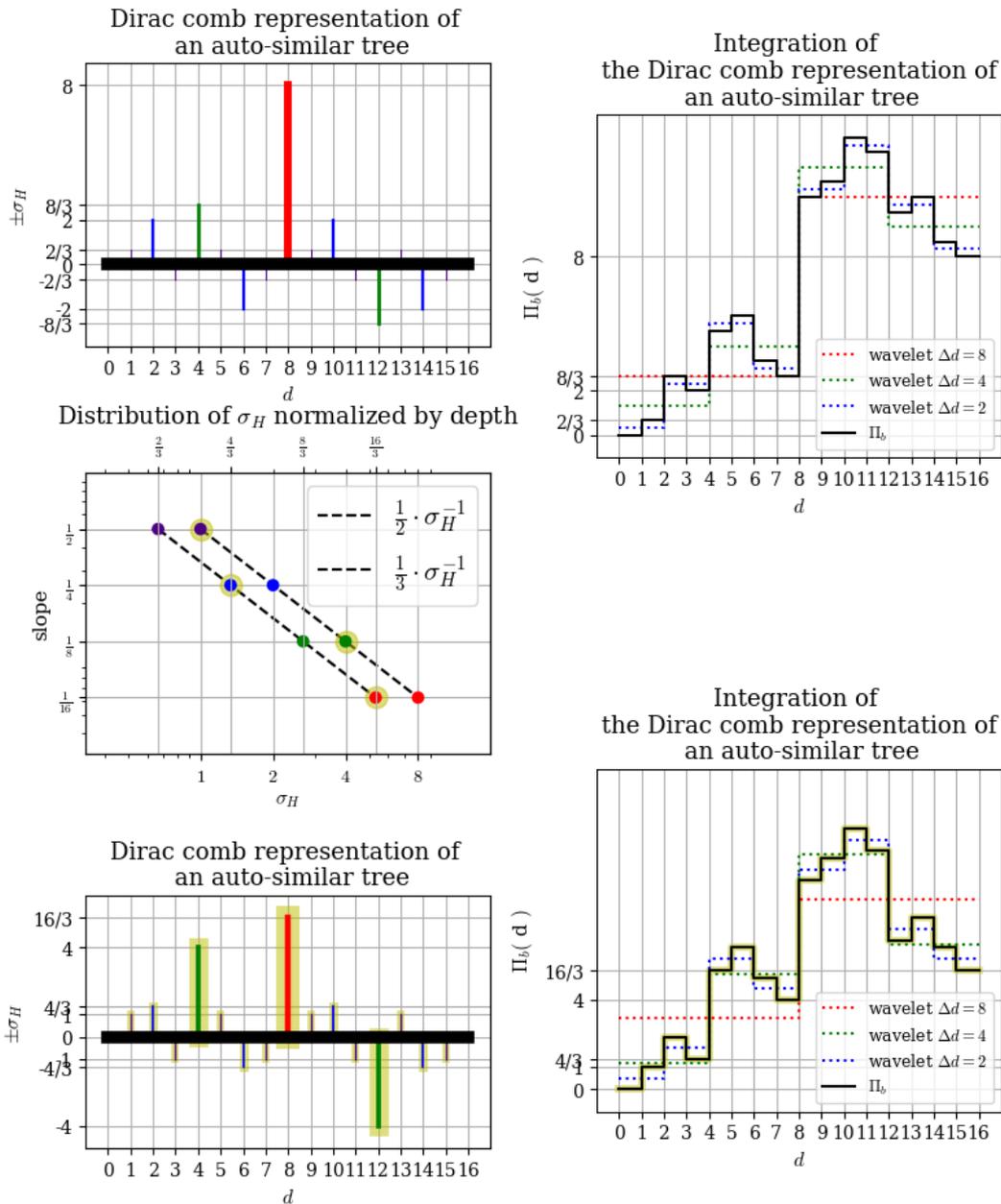


Figure 5.15 – Pour une branche  $b$  d'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$  d'ordre  $\omega_H = k$  d'un arbre enraciné  $T(V, E)$  se constituant comme une pré-fractale arborescente auto-similaire non uniforme, on a tracé ici la projection suivant le plan défini par le couple de vecteurs  $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1})$ , du peigne de Dirac (gauche haut/bas) décrit comme d'après (5.22) ainsi que de la fonction continue par morceau  $\Pi_b$  (droite haut/bas) (5.23) associée à cette branche  $b$ . Dans l'encadré de droite sur lequel on trouve cette projection de la fonction  $\Pi_b$ , on aura aussi représenté la décomposition en ondelette de Haar pour différentes échelles  $\Delta d$ . Enfin la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  normalisée par la profondeur des branches qui les portent est aussi également représentée (gauche milieu).

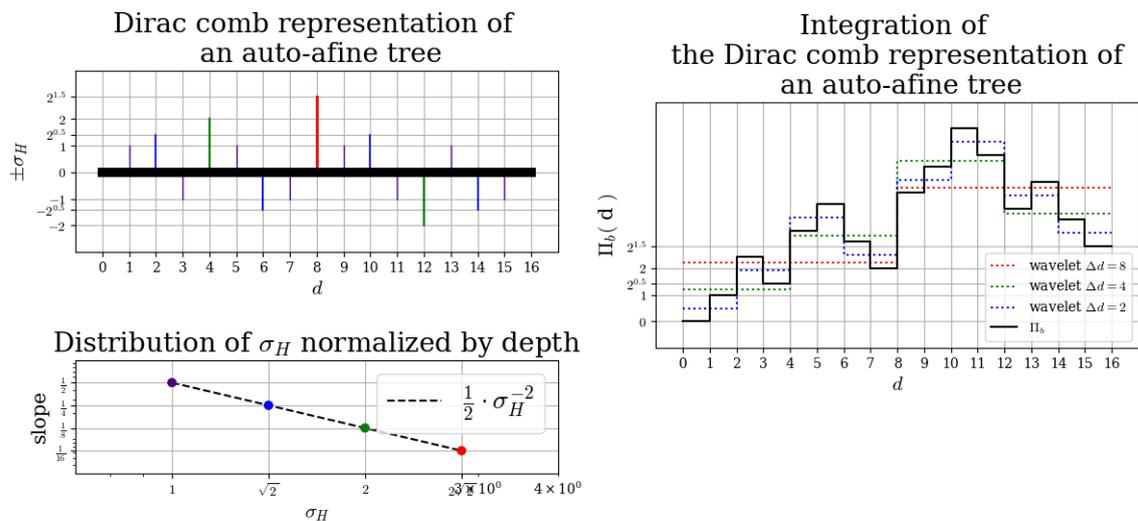


Figure 5.16 – Pour une branche  $b$  d'abscisse curviligne  $\sigma(b) = 16$  d'ordre  $\omega_H = k$  d'un arbre enraciné  $T(V, E)$  se constituant comme une pré-fractale arborescente auto-affine uniforme, on a tracé ici la projection suivant le plan défini par le couple de vecteurs  $(\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1})$ , du peigne de Dirac (gauche haut) décrit comme d'après (5.22) ainsi que de la fonction continue par morceau  $\Pi_b$  (droite) (5.23) associée à cette branche  $b$ . Dans l'encadré de droite sur lequel on trouve cette projection de la fonction  $\Pi_b$ , on aura aussi représenté la décomposition en ondelettes de Haar pour différentes échelles  $\Delta d$ . Enfin la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  normalisée par la profondeur des branches qui les portent est aussi également représentée (gauche bas).

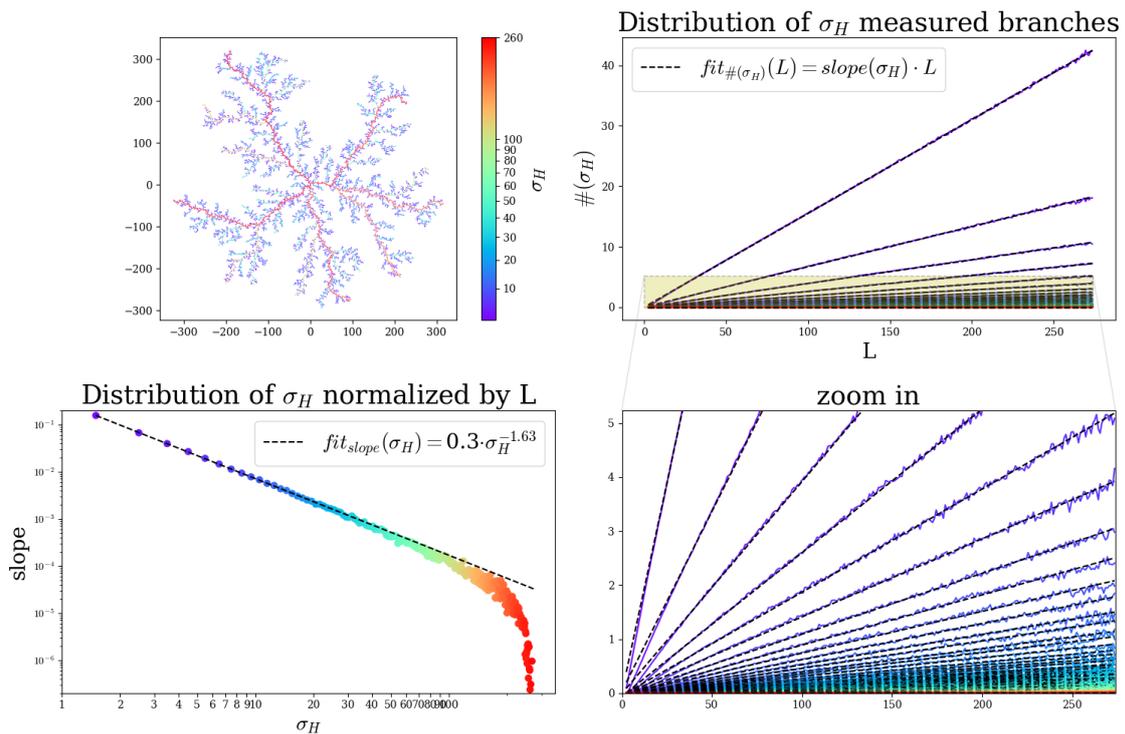


Figure 5.17 – Hiérarchisations par la mesure des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  de 1000 arborescences de type DLA composées de 10000 particules n'ayant subi aucun champ de force externe (gauche haut), à partir de laquelle aura été tracée la distribution des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de ces branches normalisée (gauche bas) ou non (droite) par l'abscisse curviligne des branches qui les portent.

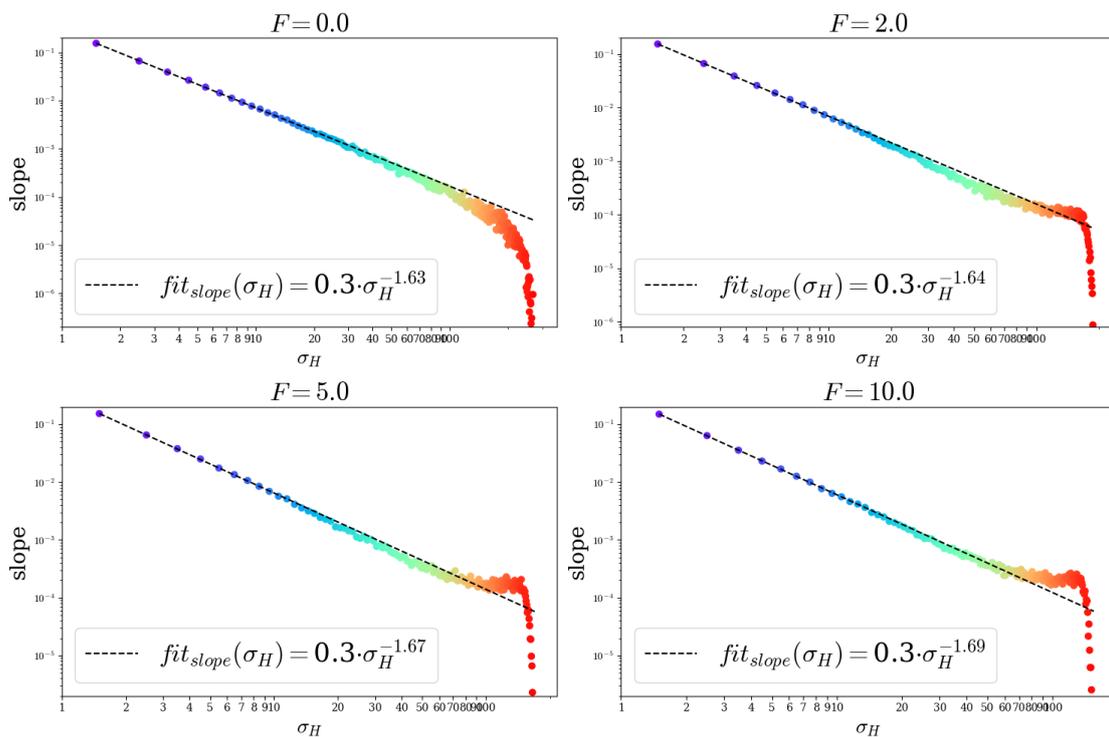


Figure 5.18 – Tracés des distributions normalisées des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  de l'ensemble des branches  $\bigcup_{k=1}^{+\infty} C_{\omega_H}(k)$  appartenant à 1000 arborescences de type DLA composées de 10000 particules subissant un champ de force central uniforme d'une intensité allant de  $F = 0.0$  à  $F = 10.0$  en unité de force arbitraire (sens de la lecture).



## Conclusion générale

Les objectifs de ce travail auront été :

Initialement d'inclure au sein d'un algorithme de type DLA hors réseau pré-existant [55], l'équation maîtresse (3.35); de sorte à ce que dans nos simulations, les mouvements erratiques des sphères dures modélisant des agrégats atomiques à la surface d'un substrat, soient régis par l'équation de diffusion de Smoluchowski (3.10).

Ensuite d'établir la chronologie la plus probable, des étapes de construction de n'importe quelle arborescence ayant été obtenue par accrétions successives d'agrégats atomiques diffusant à faible densité à la surface d'un substrat.

Enfin, en s'appuyant sur des notions issues de la théorie des graphes, de développer des outils d'analyse approfondie de la géométrie fractale des arborescences obtenues au moyen de nos simulations numériques.

### Bilan

Le modèle de Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions proposé pour la première fois par T.A Witten et L.M Sander dans [115] et [116], est un modèle de simulation numérique à l'origine conçu pour modéliser l'accrétion de particules colloïdales [74]. L'utilisation de ce modèle de simulation numérique a par la suite été élargie à d'autres expériences comme : les décharges diélectrique [86], les digitations visqueuses d'un fluide dans un autre de viscosité différente [95] et pour ce qui nous intéresse plus particulièrement dans ce travail les dépôts d'agrégats atomiques à la surface d'un substrat [3].

Une des spécificités du modèle DLA réside dans le fait que la dynamique de chacune des particules libres diffusant à la surface du domaine de simulation, est complètement indépendante<sup>2</sup> de celles des autres. En effet dans ce type de simulation, seule une particule libre diffuse à la fois, le déclenchement de la diffusion d'une de ces sphères dures étant conditionné par l'accrétion de la précédente au reste de la structure dendritique. Dès lors la notion de temps est propre à la dynamique de chacune de ces particules libres et leurs taux de probabilité de transition régissant leurs mouvements erratiques à la surface du domaine de simulation n'ont pas nécessairement besoin de dépendre d'une équation du mouvement. Ceci est le cas du modèle original [115] dans lequel les taux de transition suivant les quatre directions cardinales des particules libres valent  $w = \frac{1}{4}$ , mais aussi ceux proposés par P.Meakin dans [68] et R. Jullien dans [49] pour lesquelles la diffusion de chaque sphère dure peut être anisotrope, voire subir une dérive.

En choisissant d'insérer l'équation maîtresse (3.35) dans l'algorithme de type DLA optimisé par K.R Kuijpers *et al.* dans [55], en plus de rendre la diffusion des particules libres ainsi que leurs

---

2. Le modèle DLA est en mesure de simuler uniquement des dépôts d'agrégats atomiques diffusant à faible densité à la surface d'un substrat.

sites d'accrétions parfaitement indépendants des effets d'un réseau<sup>3</sup>, nous nous sommes donnés la possibilité de modéliser la diffusion de particules libres subissant les effets d'un champ de force non-uniforme. En effet cette équation maîtresse (3.35) est obtenue à partir de l'équation de diffusion de Smoluchowski (3.10), elle-même résultant de l'équation du mouvement (3.5) proposée par Paul Langevin en 1908. Ainsi l'expression (3.38) pour les taux de transition, nous permet de piloter en tout endroit de l'espace l'intensité du champ de force perçu par les particules libres. De plus en ne confondant pas le libre parcours moyen d'une particule libre et sa fréquence de saut moyenne avec les pas d'espace et de temps servant à l'intégration numérique de l'équation de diffusion de Smoluchowski (3.10) dans notre algorithme, nous nous sommes libérés aussitôt de la contrainte<sup>4</sup> qui pesait sur la valeur de l'intensité du champ de force  $F$  dans l'expression du taux de transition défini suivant (A.10) dans [12].

Bien que plus coûteux en temps de calcul et en espace mémoire, l'algorithme que nous avons décrit dans la sous-section 3.2.1, inspiré de celui proposé par Lyklema *et al.* dans [63], permettrait lui aussi de générer à la surface d'un réseau, des structures dendritiques de type DLA s'étant auto-organisées sous l'influence d'un champ de force. Cependant les arborescences obtenues par cet algorithme, auraient la particularité d'être les mêmes que celles que l'on obtiendrait en appliquant la condition de rejet  $n \rightarrow +\infty$  dans l'algorithme basé sur le modèle DLA [77] proposé par A.Y. Menshutin et L.N. Shchur. Autrement dit ces structures dendritiques suivraient des tracés qui s'approcheraient elles aussi assez fortement d'une morphologie moyenne.

Dès lors en inversant la logique de cet algorithme, c'est à dire en retirant à chacune des étapes  $T$  de la construction d'une structure dendritique, la sphère dure la plus susceptible de s'être fixée durant cette étape, nous sommes parvenus à proposer une méthode permettant d'approcher très fidèlement la véritable chronologie des événements ayant abouti à la construction d'une arborescence. Rappelons que ces structures dendritiques sont obtenues au moyen d'un processus stochastique irréversible, il nous est donc impossible, à partir de la seule information du tracé d'une arborescence, de reconstituer exactement la suite des événements ayant contribué à sa construction. Néanmoins passé les 100 premières étapes de construction d'une arborescence composée de  $N = 1000$  sphères dures, lorsque l'on mesure l'erreur relative entre la véritable chronologie et celle estimée par notre méthode, celle-ci se maintient à des valeurs inférieures à 10% (voir (Fig.3.14), (Fig.3.15)).

Les structures dendritiques obtenues grâce au modèle DLA, peuvent être assimilées du point de vue de la théorie des graphes à des représentations planaires d'arbres enracinés qui plus est aléatoires. En étudiant ces arborescences, nous sommes arrivés à la conclusion que le processus d'accrétion de type DLA est sans vieillissement. Cependant si on considère la croissance de ces arbres aléatoires comme étant le fruit d'un processus de branchement, ce dernier ne pourra être décrit par un processus de Galton-Watson, ni même par une chaîne de Markov. Néanmoins le processus de branchement de type DLA perd sa mémoire toutes les quatre générations. Ainsi en construisant de nouveaux arbres à partir des originaux tels que chaque chaîne, reliant initialement des multifurcations entre elles, soit remplacée par un lien

---

3. Ces effets de réseau influencent grandement la morphologie moyenne des structures dendritiques obtenues par les simulation de type DLA sur réseau (voir [71], [73] et [77]).

4. Une contrainte permettant de conserver la valeur de ce taux toujours positive.

pondéré par sa longueur; on constate que la taille d'une fratrie privée des terminaisons est identiquement et indépendamment distribuée au sein de ces arbres homéomorphes, tandis que les pondérations des liens reliant ses nœuds fils à leur père sont distribuées, elles, suivant une loi géométrique sur l'intervalle  $\llbracket 4, +\infty \llbracket$ . Finalement lorsque que l'on inclus les terminaisons lors du recensement du nombre de fils composant une fratrie et donc par extension du nombre de noeuds constitutifs d'une génération tout entière, ce nombre évolue en moyenne suivant une loi de puissance et non pas suivant une loi exponentielle comme ceci aurait été le cas pour un processus de Galton-Watson. La DLA produit donc un processus de branchement particulier qui à chaque génération sera contraint aussi par l'encombrement stérique de la représentation planaire de l'arbre qu'il construit.

Du point de vue de la théorie des graphes, l'étude de la structuration interne des arborescences de type DLA, a fait l'objet de l'intérêt d'un certain nombre de chercheurs, notamment la hiérarchisation suivant l'ordre de Strahler<sup>5</sup> de ces arbres enracinés. Cependant l'ordre de Strahler ne permet pas de déterminer la nature auto-similaire d'une fractale arborescente, car par construction il ne prend pas en compte la longueur des chaînes qu'il hiérarchise. Constaté pour une arborescence que ses ratios de multifurcation (5.8) sont tous égaux entre eux à l'exception de  $\beta_1$ , prouve seulement que celle-ci est fractale. Ainsi est né le besoin d'établir la mesure  $\sigma_H$  (5.19), reposant pour n'importe quelle arborescence, sur l'ordonnement de ses branches suivant l'ordre de Hack  $\omega_H$ . Grâce à cette mesure, nous pouvons désormais confirmer ou non la nature auto-similaire d'une arborescence fractale, en étudiant  $\forall L \in \mathbb{R}^{+*}$ , la valeur de l'exposant de Hurst<sup>6</sup> présent dans l'expression des distributions (5.26) des abscisses curvilignes  $\sigma_H$  des branches de l'ensemble  $\bigcup_{b \in C(\sigma(c)=L)} C_b$  avec  $C_b$  défini comme d'après (5.3). De plus l'expression (5.26) de ces distributions, permet aussi de vérifier si cette fractale arborescente est uniforme ou non et pour chacun de ses  $M$  motifs d'évaluer la valeur du produit de leurs multiplicités avec leurs rapports d'homothétie.

Dès lors en appliquant cette analyse aux branches d'arborescences pré-fractales générées par un processus d'accrétion de type DLA; l'invariance d'échelle imputable à leur nature fractale a pu être vérifiée sur une certaine plage d'abscisses curvilignes donnée en fonction de leurs tailles. Sur cet intervalle et cela pour un certain nombre d'intensités  $F$  de champs de force radial uniforme, le caractère auto-affine de ces arborescences a pu être mesuré avec précision, révélant ainsi que l'exposant de Hurst<sup>7</sup> décroît à mesure que l'intensité  $F$  augmente. A cela nous avons aussi pu déterminer d'après la (Fig.5.18) que ces fractales sont uniformes ( $M = 1$ ) et qui plus est que le rapport d'homothétie  $\lambda$  ainsi que la multiplicité  $m$  de leur unique motif, semble ne pas dépendre du champ de force appliqué lors du processus d'accrétion. Ces informations sur la nature fractale de nos arborescence de type DLA, n'aurait pu être obtenue uniquement par le calcul de leurs dimensions fractales.

---

5. on peut citer [18], [23], [66], [108], [122]

6. On rappelle que d'après (1.82) le support  $F$  d'une fractale est auto-similaire si  $H = 1$ , sinon auto-affine.

7. Pour une intensité  $F = 0$ , c'est à dire en l'absence de champ de force, l'exposant de Hurst est mesuré à  $H_{F=0} = \frac{1}{1.63}$  sur la (Fig.5.17)

## Perspectives

Dans le chapitre 3, lorsque nous avons présenté le modèle de Diffusions de particules Limitées par leurs Accrétions ou "Diffusion Limited Aggregation", nous avons aussi fait remarquer que : "Pour n'importe quel algorithme construit sur les bases de ce modèle, la notion de temps n'a de sens que pour la dynamique d'une particule libre. Le déclenchement artificiel de la diffusion d'une nouvelle particule libre à l'issue de l'accrétion d'une autre l'ayant précédé, rend caduque toutes tentatives visant à évaluer la dynamique de construction d'une structure dendritique." Or si l'on désire, sans faire l'hypothèse d'un dépôt à faible couverture, pouvoir utiliser la méthode décrite dans la sous-section 3.2.2 sur des images expérimentales ou bien modéliser la croissance de ces arborescences d'agrégats atomiques; il nous faudra s'inspirer d'un autre modèle de simulation numérique appelé DDA, acronyme anglais pour "Deposition, Diffusion and Aggregation".

A la différence de la DLA, ce modèle proposé par Jensen *et al.* dans [45] aura été spécialement conçu pour simuler l'auto-organisation d'agrégats atomiques en structures dendritiques lors d'expériences de dépôts. En plus d'autoriser simultanément plusieurs particules libres à diffuser et s'agréger les unes avec les autres; Il permet aussi de modéliser la compétition qui existe entre les différents mécanismes<sup>8</sup> de bases illustrés sur la (Fig.1 de [45]) et responsables du mouvement et de la réorganisation de ces arborescences. l'algorithme du modèle DDA utilise la même optimisation<sup>9</sup> présentée dans [6], ayant permis de réduire drastiquement le temps de calcul de l'algorithme Monte Carlo du modèle d'Ising. Cette optimisation consiste à ne plus tester, pour chaque particule, chacun des mécanismes de base; et ainsi éviter de fixer le pas de temps  $\delta t$  à une valeur inférieure à l'inverse de la fréquence  $\nu_{min}$  du plus récurrent de ces processus. L'algorithme choisira plutôt, pour chacune de ses boucles temporelles, une particule aléatoirement, et en fonction de sa probabilité d'avoir lieu, le mécanisme de base qui sera effectué par celle-ci. En évitant de rejeter et cela de nombreuses fois par boucles, les processus les moins probables, cet algorithme réduira considérablement son temps d'exécution. Il suffira ensuite de mettre à jour entre chaque boucle, le temps dans la simulation en incrémentant ce dernier par :

$$\delta t = \frac{1}{\phi S + N_{isl} \sum_i \nu_i + N_{stuck} \sum_j \nu_j + N_{free} \sum_k \nu_k}$$

Dans la formule ci-dessus,  $\phi$  définit le flux de nouvelles particules libres déposées à la surface du domaine de simulation d'une aire  $S$ ; tandis que  $N_{isl}$ ,  $N_{stuck}$  et  $N_{free}$  comptabilisent respectivement le nombre de structures dendritiques, de particules fixes et de particules libres présentes à la surface du domaine de simulation. Pour chacune de ces populations, leur nombre multiplie la somme des fréquences  $\nu$  des mécanismes de base qui leurs sont associées. En supprimant l'hypothèse imposée par le modèle DLA sur le flux de particules libres, le modèle DDA aura permis à P. Jensen et B. Niemeyer dans [46] de montrer que pour un flux  $\phi$  pulsé,

---

8. Les processus, illustrés sur la (Fig.1 de [45]), avaient d'ores et déjà été présentés sur la (Fig.2.7), lorsque dans la sous section 2.2.1, nous avons présenté les mécanismes de diffusions à l'origine de la réorganisation des adatoms constituant un îlot 2D.

9. Les avantages apportés par le choix de cette optimisation sont amplement détaillés dans l'article de revue [44] de P. Jensen *et al.*.

la dynamique de croissance ainsi que la morphologie du dépôt pourront être profondément impactées. Ainsi ce modèle permet d'observer des différences morphologiques qui seraient impossibles à modéliser au moyen du modèle DLA.

En excluant, parmi les processus susceptibles d'être exécutés lors de nos simulations, ceux affectant les structures dendritiques dans leurs ensembles; l'algorithme sur réseau carré du modèle DDA, présenté dans [45], pourrait être facilement adapté en un algorithme hors réseau, pour lequel les particules libres diffuseraient sous l'influence d'un champ de force. Pour cela il faudrait que l'équation maîtresse (3.35) régie le déplacement de ces particules libres. Cependant d'après la contrainte (3.44), pour chaque particule, la fréquence  $\nu$  associée à son mécanisme de diffusion devrait être calculée individuellement et actualisée à chacune des boucles temporelles de l'algorithme. Pour ce qui est de la méthode décrite dans la sous-section 3.2.2, permettant d'approcher la chronologie des événements à l'origine de la construction d'une arborescence de type DLA, certaines modifications permettraient d'élargir son application à une plus grande variété de résultats expérimentaux. Limités à des analyses d'images expérimentales de dépôts à faibles couvertures, nous pourrions nous libérer de cette contrainte. Pour cela il nous faudrait remplacer les conditions aux limites à l'infini par des conditions aux limites périodiques. La source de particules libres s'en trouverait alors elle aussi modifiée. Elle recouvrirait l'intégralité du domaine de simulation, déposant toujours à sa surface les nouvelles particules libres avec le flux  $\phi$ .

Dans le chapitre 5 de cette thèse, afin d'analyser avec précision la géométrie des arborescences pouvant être obtenues par dépôts d'agrégats atomiques, nous avons fait appel à la théorie des graphes. Parmi les ressources bibliographiques que nous aurons été amenés à consulter sur le sujet, le travail de P. Ferraro et C. Godin dans [24] faisaient état d'une méthode permettant de mesurer une distance morphologique entre deux arborescences. Appliqué ici à de la botanique, l'algorithme permettant d'évaluer cette distance aura été initialement proposé par K. Zhang dans [123], afin de mesurer les différences séparant deux réseaux arborescents. Dans ce travail, K. Zhang décide de nommer cette distance : la "constrained edit distance mapping". Celle-ci évaluera la série de modifications la moins "coûteuse" en opérations dites d'éditions, devant être opérées sur un arbre  $A$  pour obtenir un arbre  $B$  et tout cela en respectant un certain nombre de contraintes<sup>10</sup>. Ces opérations sont au nombre de trois : suppression d'un nœud de l'arbre  $A$  ou  $B$ , ajout d'un nœud à l'arbre  $A$  ou  $B$  et enfin association d'un nœud de l'arbre  $A$  avec un nœud de l'arbre  $B$ . Cette algorithme plutôt complexe utilise une notion qui n'a pas été abordé dans ce manuscrit, celle des flots dans un graphe. Ce concept aura été brillamment vulgarisé sur la chaîne youtube [À la découverte des graphes](#), par C. Laforest<sup>11</sup>, professeur à l'université de Clermont.

Ainsi nous avons tenté de comparer des arborescences de type DLA au moyen de cet algo-

---

10. Plus tôt dans [124], K.Zhang *et al.* avaient défini la "edit distance" entre deux arbres enracinés non-ordonnés  $A$  et  $B$ . La "constrained edit distance mapping" constitue une évolution de la "edit distance", en ce que la série d'opérations d'éditions qu'elle pondère respecte l'ordre généalogique de chacun des deux arbres et n'associe jamais plus d'un seul sous-arbre de  $A$  à un sous arbre de  $B$  et inversement.

11. C. Laforest est aussi l'auteur de [57], un ouvrage de vulgarisation sur la théorie des graphes.

rithme. Nous avons espoir de noter une différence entre la distance moyenne mesurée pour des couples d'arbres construits suivant des conditions identiques et celles mesurées pour des couples d'arbres élaborés chacun suivant des conditions différentes. Malheureusement aucune différence notable ne semblait se dégager de nos mesures. Une explication à cela pourrait être le fait qu'ici la "constrained edit distance mapping" mesure un bruit et pas les différences structurelles que nous sommes capables d'identifier à l'œil nu sur la (Fig.3.7). A la fin de la sous-section 5.3.2, après analyse des résultats, nous avons conclu que : "l'invariance d'échelle d'un arbre enraciné de type DLA se vérifie sur une certaine plage d'abscisses curvilignes donnée et cela en fonction de la taille que fera cette pré-fractale." Or rappelons que les coefficients de Hurst mesurés pour ces pré-fractales, construites sous l'influence de champs de forces différents, varient peu (voir (Fig.5.18)). Dès lors si ce que l'on a appelé "bruit" correspond à la répétition du motif aléatoire de ces arborescences fractales auto-affines, une solution à apporter pour résoudre ce problème pourrait être de tronquer l'ensemble des branches, dont les abscisses curvilignes seraient comprises dans l'intervalle où l'on retrouverait l'invariance d'échelles fractale.

## Bibliographie

- [1] S. Agnihotri, S. Mukherji, and S. Mukherji. Size-controlled silver nanoparticles synthesized over the range 5–100 nm using the same protocol and their antibacterial efficacy. *RSC Advances*, 4(8) :3974–3983, Dec. 2013. Publisher : The Royal Society of Chemistry.
- [2] G. Ayrault and G. Ehrlich. Surface Self-Diffusion at Cryogenic Temperatures : Rh on Rh. *The Journal of Chemical Physics*, 57(4) :1788, Sept. 2003. Publisher : American Institute of PhysicsAIP.
- [3] L. Bardotti, P. Jensen, A. Hoareau, M. Treilleux, and B. Cabaud. Experimental Observation of Fast Diffusion of Large Antimony Clusters on Graphite Surfaces. *Physical Review Letters*, 74(23) :4694–4697, June 1995. Publisher : American Physical Society.
- [4] C. Berge. *Graphs and hypergraphs*. North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1979. OCLC : 174005441.
- [5] H. P. Bonze. Surface diffusion of metals - a comparison of intrinsic and mass transfer measurements. *C R C Critical Reviews in Solid State Sciences*, 6(2) :171–194, Apr. 1976. Publisher : Taylor & Francis \_eprint : <https://doi.org/10.1080/10408437608243554>.
- [6] A. B. Bortz, M. H. Kalos, and J. L. Lebowitz. A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems. *Journal of Computational Physics*, 17(1) :10–18, Jan. 1975.
- [7] C. Bréchnignac, P. Cahuzac, F. Carlier, M. de Frutos, A. Masson, C. Colliex, C. Mory, and B. Yoon. Mobility and aggregation of free clusters soft landed on amorphous and crystalline carbon substrates. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 40(1) :516–519, Mar. 1997.
- [8] C. Bréchnignac, P. Cahuzac, F. Carlier, M. de Frutos, A. Masson, C. Mory, C. Colliex, and B. Yoon. Size effects in nucleation and growth processes from preformed soft-landed clusters. *Physical Review B*, 57(4) :R2084–R2087, Jan. 1998. Publisher : American Physical Society.
- [9] C. Bréchnignac, P. Cahuzac, F. Carlier, M. de Frutos, A. Masson, and J. Roux. Generation of rare earth metal clusters by means of the gas-aggregation technique. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 19(4) :195–197, Mar. 1991.
- [10] R. Brown. *The Miscellaneous Botanical Works of Robert Brown*. Cambridge University Press, Cambridge, 1827.
- [11] G. Cantor. Beiträge zur Begründung der transfiniten Mengenlehre. *Mathematische Annalen*, 46(4) :481–512, Nov. 1895.
- [12] F. Carlier, E. Brion, and V. M. Akulin. Fractal growth in the presence of a surface force field. *The European Physical Journal B*, 85(5) :152, May 2012.
- [13] T. H. Cormen and T. H. Cormen. *Introduction to algorithms*. MIT Press, Cambridge, Mass., 2001. OCLC : 46792720.

- [14] G. Daccord, J. Nittmann, and H. E. Stanley. Radial viscous fingers and diffusion-limited aggregation : Fractal dimension and growth sites. *Physical Review Letters*, 56(4) :336–339, Jan. 1986.
- [15] I. Daubechies. Au-delà des séries de Fourier.
- [16] P. Deltour, J.-L. Barrat, and P. Jensen. Fast Diffusion of a Lennard-Jones Cluster on a Crystalline Surface. *Physical Review Letters*, 78(24) :4597–4600, June 1997. Publisher : American Physical Society.
- [17] R. Diestel. *Graph theory*. Number 173 in Graduate texts in mathematics. Springer, New York, 2nd ed edition, 2000.
- [18] Z. V. Djordjevic, X. F. Li, W. S. Shin, S. L. Wunder, and G. R. Baran. Fractal and topological characterization of branching patterns on the fracture surface of cross-linked dimethacrylate resins : Part I. *Journal of Materials Science*, 30(11) :2968–2980, June 1995.
- [19] M. Drmota. *Random Trees : An Interplay between Combinatorics and Probability*. Springer-Verlag, Wien, 2009.
- [20] I. Elkinani and J. Villain. Growth roughness and instabilities due to the Schwoebel effect : a one-dimensional model. *Journal de Physique I*, 4(6) :949–973, June 1994. Publisher : EDP Sciences.
- [21] G. Eyrolles. *Synthèse d'images figuratives d'arbres par des méthodes combinatoires*. PhD thesis, A.N.R.T, Université Pierre Mendès France (Grenoble II), Grenoble, 1986. OCLC : 67293100.
- [22] K. J. Falconer. *Fractal geometry*. Wiley, Chichester, 1990. OCLC : 644702325.
- [23] J. Feder, E. L. Hinrichsen, K. J. Måløy, and T. Jøssang. Geometrical crossover and self-similarity of DLA and viscous fingering clusters. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 38(1-3) :104–111, Sept. 1989.
- [24] P. Ferraro and C. Godin. A distance measure between plant architectures. *Annals of Forest Science*, 57(5) :445–461, June 2000.
- [25] G. M. Francis, I. M. Goldby, L. Kuipers, B. v. Issendorff, and R. E. Palmer. Deposition and growth of noble metal clusters on graphite. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, (5) :665–671, Jan. 1996. Publisher : The Royal Society of Chemistry.
- [26] E. Ganz, K. Sattler, and J. Clarke. Scanning tunneling microscopy of Cu, Ag, Au and Al adatoms, small clusters, and islands on graphite. *Surface Science*, 219(1) :33–67, Sept. 1989.
- [27] Y. Geguzin, Y. Kaganovskij, and E. Mikhajlov. On structural anisotropy of <sup>63</sup>Ni diffusion spread over the W surface. *Ukrainskij Fizicheskij Zhurnal*, 27(12) :1865–1867, 1982. Place : USSR INIS Reference Number : 14782874.
- [28] I. M. Goldby, L. Kuipers, B. von Issendorff, and R. E. Palmer. Diffusion and aggregation of size-selected silver clusters on a graphite surface. *Applied Physics Letters*, 69(19) :2819–2821, Nov. 1996. Publisher : American Institute of Physics.

- [29] R. Gomer. Diffusion of adsorbates on metal surfaces. *Reports on Progress in Physics*, 53(7) :917–1002, July 1990. Publisher : IOP Publishing.
- [30] J.-F. Gouyet and B. B. Mandelbrot. *Physics and fractal structures*. Masson, Paris [etc., 1996. OCLC : 489865090.
- [31] A. Haar and G. Zimmermann. On the Theory of Orthogonal Function Systems. In *On the Theory of Orthogonal Function Systems*, pages 155–188. Princeton University Press, Jan. 2009.
- [32] H. Haberland, Z. Insepov, and M. Moseler. Molecular-dynamics simulation of thin-film growth by energetic cluster impact. *Physical Review B*, 51(16) :11061–11067, Apr. 1995. Publisher : American Physical Society.
- [33] H. Haberland, M. Karrais, M. Mall, and Y. Thurner. Thin films from energetic cluster impact : A feasibility study. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 10(5) :3266–3271, May 1992. Publisher : American Vacuum Society.
- [34] J. T. Hack. Studies of longitudinal stream profiles in Virginia and Maryland. *Professional Paper*, 1957. Number : 294-B.
- [35] J. C. Hamilton, M. S. Daw, and S. M. Foiles. Dislocation Mechanism for Island Diffusion on fcc (111) Surfaces. *Physical Review Letters*, 74(14) :2760–2763, Apr. 1995. Publisher : American Physical Society.
- [36] Y. Han, A. K. Engstfeld, R. J. Behm, and J. W. Evans. Atomistic modeling of the directed-assembly of bimetallic Pt-Ru nanoclusters on Ru(0001)-supported monolayer graphene. *The Journal of Chemical Physics*, 138(13) :134703, Apr. 2013. Publisher : American Institute of Physics.
- [37] T. E. Harris. FIRST PASSAGE AND RECURRENCE DISTRIBUTIONS. page 16.
- [38] J. Hautman and M. L. Klein. Microscopic wetting phenomena. *Physical Review Letters*, 67(13) :1763–1766, Sept. 1991. Publisher : American Physical Society.
- [39] H. S. Hele-Shaw. The Flow of Water. *Nature*, 58(1489) :34–36, May 1898. Bandiera\_abtest : a Cg\_type : Nature Research Journals Number : 1489 Primary\_atype : News Publisher : Nature Publishing Group.
- [40] R. E. Horton. Erosional Development of Streams and Their Drainage Basins; Hydrophysical Approach to Quantitative Morphology. *Geological Society of America Bulletin*, 56 :275, Jan. 1945.
- [41] H. E. Hurst. Long-Term Storage Capacity of Reservoirs. *T. Am. Soc. Civ. Eng. Transactions of the American Society of Civil Engineers*, 116(1) :770–799, 1951. OCLC : 8913457174.
- [42] H. E. Hurst, R. P. Black, and Y. M. Simaika. *Long-term storage, an experimental study*. Constable, London, 1965. OCLC : 2489955.
- [43] K. Itô. Stochastic integral. *Proceedings of the Imperial Academy*, 20(8) :519–524, Jan. 1944. Publisher : The Japan Academy.
- [44] P. Jensen. Growth of nanostructures by cluster deposition : Experiments and simple models. *Reviews of Modern Physics*, 71(5) :1695–1735, Oct. 1999.

- [45] P. Jensen, A.-L. Barabási, H. Larralde, S. Havlin, and H. E. Stanley. Deposition, diffusion, and aggregation of atoms on surfaces : A model for nanostructure growth. *Physical Review B*, 50(20) :15316–15329, Nov. 1994.
- [46] P. Jensen and B. Niemeyer. The effect of a modulated flux on the growth of thin films. *Surface Science*, 384(1) :L823–L827, July 1997.
- [47] J. E. Jones and S. Chapman. On the determination of molecular fields. —II. From the equation of state of a gas. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 106(738) :463–477, Oct. 1924. Publisher : Royal Society.
- [48] J. E. Jones and S. Chapman. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 106(738) :441–462, Oct. 1924. Publisher : Royal Society.
- [49] R. Jullien, M. Kolb, and R. Botet. Diffusion limited aggregation with directed and anisotropic diffusion. *Journal de Physique*, 45(3) :395–399, 1984.
- [50] C. L. Kelchner and A. E. DePristo. MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF LOW ENERGY CLUSTER DEPOSITION DURING DIFFUSION-LIMITED THIN FILM GROWTH. *Nanostructured Materials*, 8(3) :253–268, May 1997.
- [51] G. L. Kellogg. Atomic view of cluster diffusion on metal surfaces. *Progress in Surface Science*, 53(2) :217–223, Oct. 1996.
- [52] R. Kern, J. J. Metois, and G. Le Lay. Basic mechanisms in the early stages of epitaxy. *Current topics in materials science, vol. 3, pp. 131-419*, 3, 1979. Place : Amsterdam OCLC : 1101445366.
- [53] W. Kossel. Zur Theorie des Kristallwachstums. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse*, 1927 :135–143, 1927.
- [54] J. Krug and M. Schimschak. Metastability of Step Flow Growth in 1+1 Dimensions. *Journal de Physique I*, 5(8) :1065–1086, Aug. 1995. Publisher : EDP Sciences.
- [55] K. R. Kuijpers, L. de Martín, and J. R. van Ommen. Optimizing off-lattice Diffusion-Limited Aggregation. *Computer Physics Communications*, 185(3) :841–846, Mar. 2014.
- [56] K. Kyuno and G. Ehrlich. Diffusion and dissociation of platinum clusters on Pt(111). *Surface Science*, 437(1) :29–37, Aug. 1999.
- [57] C. Laforest. À la découverte des graphes et des algorithmes de graphes, Mar. 2017.
- [58] L. D. Landau and E. M. Lifšic. *Theory of elasticity*. Elsevier, Amsterdam, 2008. OCLC : 934382464.
- [59] J. E. Lennard-Jones. Cohesion. 43(5) :461–482, Sept. 1931. Publisher : IOP Publishing.
- [60] S. Linas, F. Jean, T. Zhou, C. Albin, G. Renaud, L. Bardotti, and F. Tournus. Moiré induced organization of size-selected Pt clusters soft landed on epitaxial graphene. *Scientific Reports*, 5(1) :13053, Aug. 2015. Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group.

- [61] T. R. Linderoth, S. Horch, L. Petersen, S. Helveg, E. Lægsgaard, I. Stensgaard, and F. Besenbacher. Novel Mechanism for Diffusion of One-Dimensional Clusters :  $\mathrm{Pt}/\mathrm{Pt}(110)$ . *Physical Review Letters*, 82(7) :1494–1497, Feb. 1999. Publisher : American Physical Society.
- [62] S. Liu, Z. Zhang, J. Nørskov, and H. Metiu. The mobility of Pt atoms and small Pt clusters on Pt(111) and its implications for the early stages of epitaxial growth. *Surface Science*, 321(1) :161–171, Dec. 1994.
- [63] J. W. Lyklema, C. Evertsz, and L. Pietronero. The Laplacian Random Walk. *Europhysics Letters (EPL)*, 2(2) :77–82, July 1986. Publisher : IOP Publishing.
- [64] B. B. Mandelbrot and T. Vicsek. Directed recursion models for fractal growth. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 22(9) :L377–L383, May 1989. Publisher : IOP Publishing.
- [65] B. B. Mandelbrot and J. R. Wallis. Noah, Joseph, and Operational Hydrology. *Water Resources Research*, 4(5) :909–918, 1968. \_eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/WR004i005p00909>.
- [66] J. G. Masek and D. L. Turcotte. A diffusion-limited aggregation model for the evolution of drainage networks. *Earth and Planetary Science Letters*, 119(3) :379–386, Sept. 1993.
- [67] C. Massobrio and B. Nacer. Collisional dynamics of Ag<sub>19</sub> on Pd(100) : a molecular dynamics study. *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*, 40(1) :526–529, Mar. 1997.
- [68] P. Meakin. Effects of particle drift on diffusion-limited aggregation. *Physical Review B*, 28(9) :5221–5224, Nov. 1983.
- [69] P. Meakin. Accretion processes with linear particle trajectories. *Journal of Colloid and Interface Science*, 105(1) :240–246, May 1985.
- [70] P. Meakin. The structure of two-dimensional Witten-Sander aggregates. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 18(11) :L661–L666, Aug. 1985.
- [71] P. Meakin. Universality, nonuniversality, and the effects of anisotropy on diffusion-limited aggregation. *Physical Review A*, 33(5) :3371–3382, May 1986.
- [72] P. Meakin, P. Ramanlal, L. M. Sander, and R. C. Ball. Ballistic deposition on surfaces. *Physical Review A*, 34(6) :5091–5103, Dec. 1986.
- [73] P. Meakin and T. Vicsek. Internal structure of diffusion-limited aggregates. *Physical Review A*, 32(1) :685–688, July 1985. Publisher : American Physical Society.
- [74] A. I. Medalia and F. A. Heckman. Morphology of aggregates : VII. Comparison chart method for electron microscopic determination of carbon black aggregate morphology. *Journal of Colloid and Interface Science*, 36(2) :173–190, June 1971.
- [75] P. Mélinon, G. Fuchs, B. Cabaud, A. Hoareau, P. Jensen, V. Paillard, and M. Treilleux. Low-energy cluster beam deposition : do you need it ? *Journal de Physique I*, 3(7) :1585–1603, July 1993. Publisher : EDP Sciences.

- [76] P. Melinon, V. Paillard, V. Dupuis, A. Perez, P. Jensen, A. Hoareau, J. Perez, J. Tuillon, M. Broyer, J. Vialle, M. Pellarin, B. Baguenard, and J. Lerme. From free clusters to cluster-assembled materials. *International Journal of Modern Physics B*, 09(04n05) :339–397, Feb. 1995. Publisher : World Scientific Publishing Co.
- [77] A. Menshutina and L. Shchur. Morphological diagram of diffusion driven aggregate growth in plane : Competition of anisotropy and adhesion. *Computer Physics Communications*, 182(9) :1819–1823, Sept. 2011.
- [78] A. Y. Menshutina and L. N. Shchur. Test of multiscaling in a diffusion-limited-aggregation model using an off-lattice killing-free algorithm. *Physical Review E*, 73(1) :011407, Jan. 2006.
- [79] T. Mhíocháin, G. Hinds, A. Martin, E. Chang Z.Y, A. Lai, L. Costiner, and J. Coey. Influence of magnetic field and gravity on the morphology of zinc fractal electrodeposits. *Electrochimica Acta*, 49(27) :4813–4828, Oct. 2004.
- [80] T. R. N. Mhíocháin and J. M. D. Coey. Chirality of electrodeposits grown in a magnetic field. *Physical Review E*, 69(6) :061404, June 2004.
- [81] L. Mulfinger, S. D. Solomon, M. Bahadory, A. V. Jeyarajasingam, S. A. Rutkowsky, and C. Boritz. Synthesis and Study of Silver Nanoparticles. *Journal of Chemical Education*, 84(2) :322, Feb. 2007. Publisher : American Chemical Society.
- [82] T. Nagatani. Growth model with phase transition : Drift-diffusion-limited aggregation. *Physical Review A*, 39(1) :438–441, Jan. 1989.
- [83] A. G. Naumovets and Y. S. Vedula. Surface diffusion of adsorbates. *Surface Science Reports*, 4(7) :365–434, May 1985.
- [84] J. Neveu. Arbres et processus de Galton-Watson. page 10.
- [85] L. Niemeyer, L. Pietronero, and H. J. Wiesmann. Fractal Dimension of Dielectric Breakdown. *Physical Review Letters*, 52(12) :1033–1036, Mar. 1984.
- [86] L. Niemeyer and F. Pinnekamp. Leader discharges in SF<sub>6</sub>. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 16(6) :1031–1045, June 1983. Publisher : IOP Publishing.
- [87] K. Oura, V. G. Lifshits, A. Saranin, A. V. Zotov, and M. Katayama. *Surface Science : An Introduction*. Advanced Texts in Physics. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2003.
- [88] M. Ø. Pedersen, L. Österlund, J. J. Mortensen, M. Mavrikakis, L. B. Hansen, I. Stensgaard, E. Lægsgaard, J. K. Nørskov, and F. Besenbacher. Diffusion of N Adatoms on the Fe(100) Surface. *Physical Review Letters*, 84(21) :4898–4901, May 2000. Publisher : American Physical Society.
- [89] A. Perez, P. Melinon, V. Dupuis, P. Jensen, B. Prevel, J. Tuillon, L. Bardotti, C. Martet, M. Treilleux, M. Broyer, M. Pellarin, J. L. Vaille, B. Palpant, and J. Lerme. Cluster assembled materials : a novel class of nanostructured solids with original structures and properties. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 30(5) :709–721, Mar. 1997. Publisher : IOP Publishing.
- [90] J. Pitman. *Combinatorial Stochastic Processes*. page 251.

- [91] B. Polster. *A geometrical picture book*. Springer, New York, 1998. OCLC : 924543427.
- [92] J. G. Pruett, H. Windischmann, M. L. Nicholas, and P. S. Lampard. Cluster size and temperature measurement in a pure vapor source expansion. *Journal of Applied Physics*, 64(5) :2271–2278, Sept. 1988. Publisher : American Institute of Physics.
- [93] C. Rizescu and M. Rizescu. *Structure of the Crystalline Solids, Imperfections and Defects in Crystals*. Shutter Waves, 1st edition edition, Jan. 2018.
- [94] J. F. Roux, B. Cabaud, G. Fuchs, D. Guillot, A. Hoareau, and P. Mélinon. Mass selection of neutral clusters in Low-Energy Cluster Beam Deposition experiments : Is it realistic? *Applied Physics Letters*, 64(10) :1212–1214, Mar. 1994. Publisher : American Institute of Physics.
- [95] P. G. Saffman and G. I. Taylor. The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, June 1958. Publisher : The Royal Society London.
- [96] K. Sattler, J. Mühlbach, and E. Recknagel. Generation of Metal Clusters Containing from 2 to 500 Atoms. *Physical Review Letters*, 45(10) :821–824, Sept. 1980. Publisher : American Physical Society.
- [97] R. L. Schwoebel. Step Motion on Crystal Surfaces. II. *Journal of Applied Physics*, 40(2) :614–618, Feb. 1969. Publisher : American Institute of Physics.
- [98] R. L. Schwoebel and E. J. Shipsey. Step Motion on Crystal Surfaces. *Journal of Applied Physics*, 37(10) :3682–3686, Sept. 1966.
- [99] I. Simonsen, A. Hansen, and O. M. Nes. Determination of the Hurst Exponent by Use of Wavelet Transforms. *Physical Review E*, 58(3) :2779–2787, Sept. 1998. arXiv : cond-mat/9707153.
- [100] E. Snapper and R. J. Troyer. *Metric affine geometry*. Dover Publications, New York, 1989. OCLC : 19815516.
- [101] A. N. Strahler. HYPSONOMETRIC (AREA-ALTITUDE) ANALYSIS OF EROSIONAL TOPOGRAPHY. *GSA Bulletin*, 63(11) :1117–1142, Nov. 1952. Publisher : GeoScience-World.
- [102] A. N. Strahler. Quantitative analysis of watershed geomorphology. *undefined*, 1957.
- [103] I. N. Stranski. Zur Theorie des Kristallwachstums. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 136U(1) :259–278, Aug. 1928. Publisher : Oldenbourg Wissenschaftsverlag.
- [104] D. N. Sutherland. Comments on Vold's simulation of floc formation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 22(3) :300–302, Sept. 1966.
- [105] D. E. Turner, K. M. Lakin, and H. R. Shanks. Cluster Size Measurements in an Ionized Cluster Beam System. *MRS Online Proceedings Library*, 128(1) :125–130, Dec. 1988.
- [106] H. Van Damme, C. Laroche, L. Gatineau, and P. Levitz. Viscoelastic effects in fingering between miscible fluids. *Journal de Physique*, 48(7) :1121–1133, July 1987. Publisher : Société Française de Physique.

- [107] D. L. Van Hying, W. G. Klemperer, and C. F. Zukoski. Silver Nanoparticle Formation : Predictions and Verification of the Aggregative Growth Model. *Langmuir*, 17(11) :3128–3135, May 2001. Publisher : American Chemical Society.
- [108] J. Vannimenus and X. G. Viennot. Combinatorial tools for the analysis of ramified patterns. *Journal of Statistical Physics*, 54(5-6) :1529–1538, Mar. 1989.
- [109] M. J. Vold. Computer simulation of floc formation in a colloidal suspension. *Journal of Colloid Science*, 18(7) :684–695, Sept. 1963.
- [110] G. Voronoi. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Premier mémoire. Sur quelques propriétés des formes quadratiques positives parfaites. *Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelles Journal)*, 1908(133) :97–102, Jan. 1908. Publisher : De Gruyter Section : Journal für die reine und angewandte Mathematik.
- [111] A. F. Voter. Simulation Of The Layer-Growth Dynamics In Silver Films : Dynamics Of Adatom And Vacancy Clusters On Ag(100). In *Modeling of Optical Thin Films*, volume 0821, pages 214–226. SPIE, Feb. 1988.
- [112] C. Y. Wang, P. L. Liu, and J. B. Bassingthwaite. Off-lattice Eden-C cluster growth model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 28(8) :2141–2147, Apr. 1995.
- [113] S. C. Wang and G. Ehrlich. Diffusion of Large Surface Clusters : Direct Observations on Ir(111). *Physical Review Letters*, 79(21) :4234–4237, Nov. 1997. Publisher : American Physical Society.
- [114] A. Wawro, R. Czajka, A. Kasuya, and Y. Nishina. Deposited microclusters and their interaction with substrate. *Surface Science*, 365(2) :503–510, Sept. 1996.
- [115] T. A. Witten and L. M. Sander. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon. *Physical Review Letters*, 47(19) :1400–1403, Nov. 1981.
- [116] T. A. Witten and L. M. Sander. Diffusion-limited aggregation. *Physical Review B*, 27(9) :5686–5697, May 1983.
- [117] X.-D. Xiao, X. D. Zhu, W. Daum, and Y. R. Shen. Anisotropic surface diffusion of CO on Ni(110). *Physical Review Letters*, 66(18) :2352–2355, May 1991. Publisher : American Physical Society.
- [118] Y. Xue. Voie innovante pour la nano micro texturation de surfaces métalliques à base d'assemblage de nanoparticules d'Au : application superhydrophobe. *undefined*, 2014.
- [119] I. Yamada. Applications of gas cluster ion beams for materials processing. *Materials Science and Engineering : A*, 217-218 :82–88, Oct. 1996.
- [120] I. Yamada, H. Inokawa, and T. Takagi. Epitaxial growth of Al on Si(111) and Si(100) by ionized-cluster beam. *Journal of Applied Physics*, 56(10) :2746, June 1984. Publisher : American Institute of PhysicsAIP.
- [121] I. Y. I. Yamada and G. H. T. G. H. Takaoka. Ionized Cluster Beams : Physics and Technology. *Japanese Journal of Applied Physics*, 32(5R) :2121, May 1993. Publisher : IOP Publishing.

- [122] I. Yekutieli, B. B. Mandelbrot, and H. Kaufman. Self-similarity of the branching structure in very large DLA clusters and other branching fractals. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 27(2) :275–284, Jan. 1994. Publisher : IOP Publishing.
- [123] K. Zhang. A constrained edit distance between unordered labeled trees. page 18.
- [124] K. Zhang, R. Statman, and D. Shasha. On the editing distance between unordered labeled trees. *Information Processing Letters*, 42(3) :133–139, May 1992.