

---

## Rapport 1 projet 3

---



# POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

---

Professeure : Jérémie Villeneuve

Département : Génie Physique

Sigle du cours : PHS3903

---

Date de remise : 28 février 2020

Élève : Alexis Séguin	Matricule : 1842761
Élève : Arthur Poiffaut	Matricule : 1877332
Élève : Didier Blach-Laflèche	Matricule : 1866262

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Formulation du problème</b>	<b>1</b>
1.1	Énoncer le but spécifique du projet . . . . .	1
1.2	Description du phénomène physique de la croissance des flocon de neige . . . . .	2
1.3	Mathématisation du problème et valeurs typiques . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Recherche de solution</b>	<b>5</b>
2.1	Différentes méthodes . . . . .	5
2.1.1	Diffusion limitée par agrégation (DLA) . . . . .	6
2.1.2	Méthode des Champs de Phase (MCP) . . . . .	6
2.1.3	Automate Cellulaire (AC) . . . . .	6
2.2	Choix de la méthode et des outils numériques . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Planification des prochain étape</b>	<b>8</b>

## Table des figures

1	Exemple de dendrite [2] . . . . .	1
2	Exemple de dendrite [4] . . . . .	1
3	Schéma de la croissance d'un flocon de neige [2] . . . . .	2
4	Forme moléculaire des cristaux d'eau [2] . . . . .	3
5	Tableau des types de flocons en fonction de la température et de l'humidité [2] . . . . .	3
6	Résultats de simulation de différentes méthodes tiré de [4][10][12] . . . . .	7
7	tableau des différentes catégorie de flocon [2] . . . . .	11

## Liste des tableaux

1	Valeurs typique selon la température . . . . .	5
2	Caractéristiques des différentes méthodes . . . . .	8
3	Tâches . . . . .	9

# Introduction

En physique du solide, le processus de croissance des cristaux est un phénomène complexe et vaste qui couvre bien des domaines tels que la solidification d'alliages métalliques pour des applications industrielles, la cristallisation de l'eau, la synthèse de cristaux ferromagnétique et bien d'autres. Il est aisé de comprendre pourquoi la communauté scientifique a un grand intérêt pour les phénomènes physiques qui entourent la croissance des cristaux. Ce phénomène de solidification étant bien trop complexe pour être précisément étudié de façon analytique, des méthodes de simulation numérique sont souvent utilisées pour tenter de mieux comprendre la physique qui se cache derrière ces phénomènes.

Cette cristallisation est un processus impliquant la transition d'une phase désordonnée (telle que liquide ou gazeuse) vers une phase plus ordonnée : solide. Lors de ce processus, la formation de dendrites peut apparaître pour de nombreux alliages lors de la solidification. [1] Les dendrites sont des cristaux ramifiés et se présente sous la forme d'un arbre (voir figures 1 et 2 ) leur formation ont beaucoup d'impacts sur les propriétés des cristaux. Par exemple, la finesse des ramifications dendritique varie grandement lors de la solidification de l'aluminium selon le processus de fabrication, changeant ainsi ses propriétés mécaniques.

Ce projet s'intéressera donc à la croissance des dendrites et plus particulièrement, la cristallisation des flocons de neige possédant des dendrites. L'étude des flocons pour les dendrites est justifiée par le fait que la cristallisation de ces flocons ressemble fortement à celle des métaux et minéraux plus complexes ayant potentiellement des applications industrielles comme l'explique le professeur Kenneth G. Libbrecht. De plus, il s'agit d'un phénomène avec un seul type de particule, simplifiant le tout, et la présence de résultats expérimentaux servant de comparaison est facilement accessible.[2]

Pour commencer, nous formulerons concrètement le problème sous forme mathématique en expliquant les différents phénomènes physiques liés à la croissance des cristaux. Ensuite, nous identifierons les différentes solutions possibles pour effectuer une simulation et choisirons parmi plusieurs méthodes celle qui sera la plus appropriée pour le problème. Pour finir, nous présenterons les prochaines étapes à suivre pour la réalisation du projet final.

## 1 Formulation du problème

Cette section présente la première étape du projet de simulation : soit la définition du problème étudié, la description des phénomènes physiques et les équations les décrivant ainsi que les conditions frontières/initiales. Les grandeurs physiques observable seront également décrites.

### 1.1 Énoncer le but spécifique du projet

Le projet aura pour but d'effectuer l'étude de la croissance de flocons de neige de type dendritique. De plus, leur taux de croissance ainsi que leur forme sera évalué. Pour ce faire, nous utiliserons une simulation numérique qui permettra la création d'une image finale du flocon ainsi qu'une vidéo simulant le processus de croissance. La simulation devra pouvoir être modifiable en fonction de certains paramètres physiques comme l'humidité, la température et le taux de vapeur d'eau. Une fois la simulation terminée, une comparaison avec les résultats empiriques recueillis dans le laboratoire du professeur Kenneth G. Libbrecht pourront valider ou dédire notre approche.

La video suivante montre l'un de leur resultat : <http://www.snowcrystals.com/videos/j0323r5n-1080h.mp4>(il ne s'agit pas d'une simulation, mais d'un flocon en laboratoire!) [3]

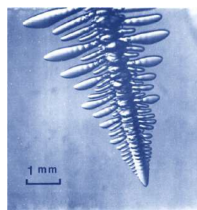


FIGURE (1) Exemple de dendrite [2]



FIGURE (2) Exemple de dendrite [4]

## 1.2 Description du phénomène physique de la croissance des flocon de neige

Lorsqu'on s'intéresse à la simulation de la croissance d'un cristal, deux questions sont primordiales. D'abord, à quel genre de géométrie s'intéresse-t-on ? Puis, qu'elles sont les dynamiques impliquées dans le problème ? Avant de répondre à ces questions il faut d'abord comprendre un la physique derrière la croissance des cristaux d'eau (flocons de neige). Ceux-ci se forment en haute altitude, entourés de vapeur d'eau dans les nuages. Leur forme est affectée par la température et l'humidité comme on peut le voir dans la figure 5. Puisqu'on veut s'intéresser qu'aux dendrites, on se limitera à la physique applicable à celles-ci et aux plates. Ce genre de flocons se forment, lorsque la vapeur d'eau dans l'air entre dans un état de sursaturation, ce qui revient à dire que l'humidité monte au-dessus de 100% et cause la vapeur à se condenser. Lorsqu'on est au sol, on peut observer cette condensation en tant que rosé sur les plantes, mais en haute altitude l'eau se condense en gouttelettes sphériques. Ces gouttelettes finissent par s'agglomérer autour de petites poussières en suspension dans l'air et si la température est assez basse les gouttelettes vont commencer à se solidifier, mais pas toutes en même temps. La plupart seront dans un état appelé surfusion qui est un état dans laquelle la matière a dépassé son point de fusion en restant sous forme liquide. Cet état est métastable est donc largement instable.

Donc la première étape de formation du flocon lorsque les gouttelettes condenser autour des poussières gèle et forme notre première particule de glace. Par la suite, cette particule de glace va croître en une surface hexagonale due au fait que la croissance est limitée par le phénomène d'attachement cinétique qui est anisotropique (différent dans toutes les directions). Puisque les molécules d'eau se mettent dans la forme montrée à la figure 4 qui montre une tranche 2D du cristal d'eau. Lorsque les coins de l'hexagone tendent à être plus éloignés les uns des autres ils sont moins en compétition pour la vapeur d'eau ce qui leur permettra de croître de plus vite, comme on peut le voir sur la troisième étape de la figure 3. Par la suite les coins étirés de l'hexagone finissent par retrouver un état dans lequel il y a moins de compétition pour la vapeur d'eau et où la température est uniforme. Alors, des plaques hexagonales se mettent à grossir. Encore une fois les parties plus éloignées grandissent plus vite et commencent à avoir le motif d'arborescence des dendrites, voir la figure 3 [2].

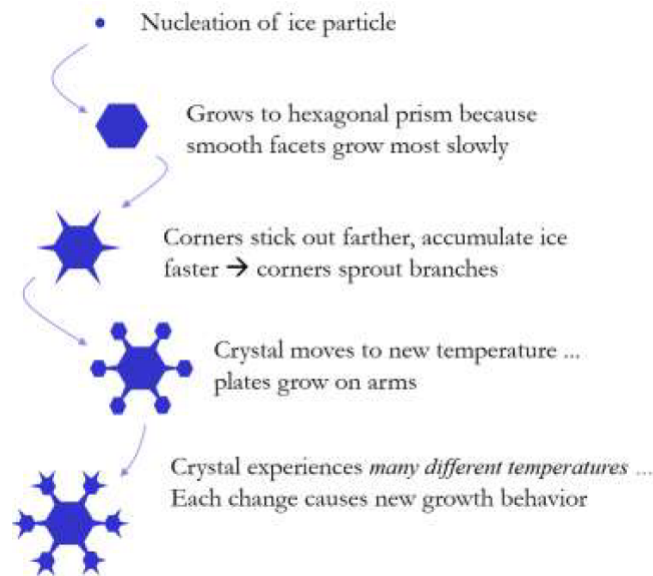


FIGURE (3) Schéma de la croissance d'un flocon de neige [2]

Le premier élément facile à identifier concerne la géométrie. Il est logique de prendre une grille hexagonale en 2 dimensions, puisque la géométrie du cristal d'eau est hexagonale comme on la vu dans la figure 4, dans les conditions où les flocon on les dendrites. Malgré on pourrai faire s'intéresser au problème en 3 dimension comme on le but de projet s'intéresse au dendrite et que la major partie de celle-ci apparaisse en 2 dimension. C'est pour ça qu'on s'intéresse juste au problème en 2 dimension simplifie le problème sans perde le but premier du projet. Enfin en ce qui attrait à la dynamique du problème on voit qu'elle peut être résumer en l'absorption de la vapeur d'eau par le cristal et la diffusion de la vapeur d'eau en état de surfusion autour du cristal.

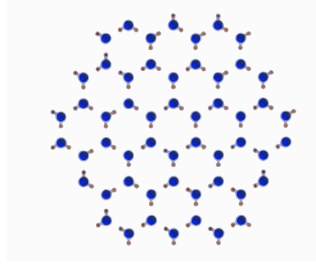


FIGURE (4) Forme moléculaire des cristaux d'eau [2]

### 1.3 Mathématisation du problème et valeurs typiques

Les cristaux de neiges se forment le plus souvent sous forme de simples prismes hexagonaux. Leur morphologie globale peut se diviser en forme de colonne ou bien de plaque comme on peut le voir dans la figure 5 [6]. Il existe d'autres types de formes solides pour l'eau par exemple, la glace cubique. Cependant, nous allons nous concentrer sur la forme hexagonale, car elle est la plus répandue et il s'agit de la forme qui donne les dendrites en 2D.

Les flocons avec dendrites sont observés dans des régions de température et de concentration de vapeur d'eau bien précises comme on peut le voir sur la figure 5. Sur cette même figure, la région qui est la plus pertinente et la plus étudiée dans la littérature est celle où la température varie entre  $-10$  et  $-20$  °C avec des concentrations entre  $0.15$  et  $0.3$  gramme d'eau par  $m^3$  [2]. La taille générale des flocons de neige est définie comme la distance d'une extrémité à l'autre des dendrites, elle peut varier de  $2$  à  $5$  mm. [7] Pour ce qui attrait à la rapidité de croissance (qui dépend des conditions de la formation des dendrites), on trouve, dans la littérature, une échelle de grandeur pour la croissance du bout de la dendrite d'environ quelques micromètres par seconde [6]. Concernant la forme des flocons, on peut trouver plusieurs exemples en ligne [3]. Il existe une méthode de classification, qu'on retrouve illustrée sous forme d'un tableau présenté en annexe A. Ce tableau contient toutes les familles des flocons de neige. Les groupes qui correspondent aux températures et concentrations choisies sont : plaques hexagonales, plaques en étoiles, plaques fragmentées, simples étoiles, dendrites étoilées ainsi que dendrites étoilés de type fougère. Ces deux dernières familles qui possèdent des dendrites sont celles qui sont d'intérêt pour le projet.

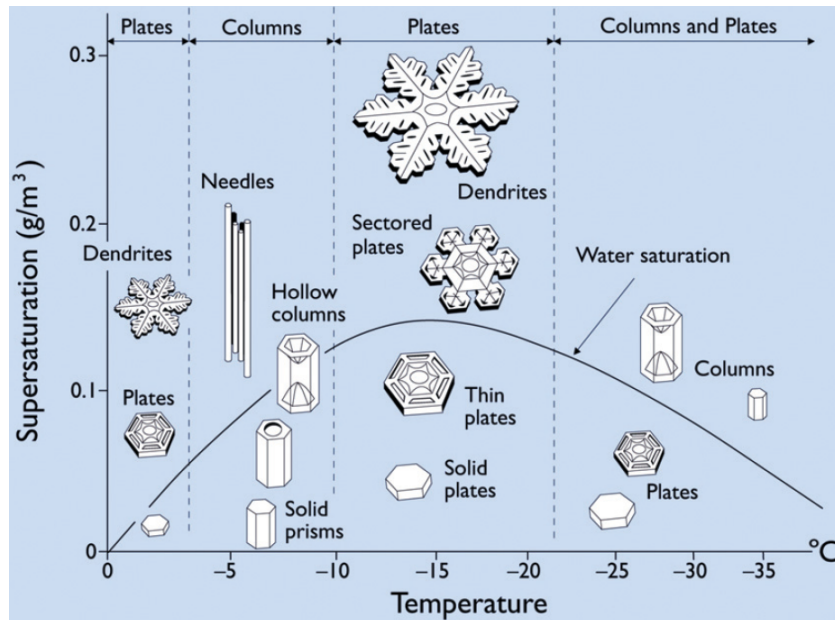


FIGURE (5) Tableau des types de flocons en fonction de la température et de l'humidité [2]

Dans le cas de la croissance des cristaux par vapeur, il s'agit d'un phénomène qui peut être modélisé par une croissance limitée par diffusion.[6] Cela se justifie par le fait que les paramètres de température et concentration de particules dans la vapeur d'eau sont les deux principales sources affectant la croissance des cristaux d'eau, puisque les molécules d'eau sont en diffusion dans le nuage dans lequel le flocon de neige se forme.

Dans le cas des dendrites de flocons de neige qui croissent dans l'air, il est possible de démontrer que la diffusion des particules freine davantage leur croissance que la diffusion de la chaleur [6]. Il est donc acceptable de négliger les effets causés par celle-ci. La température donc sera considéré comme étant constante. La théorie des dendrites commence donc avec la considération de l'équation du transport de particule en diffusion qui est donné par :

$$\frac{\partial c(x)}{\partial t} = D \nabla^2 c(x) \quad (1.3.1)$$

Ici,  $c(x)$  représente la concentration de vapeur d'eau en fonction de la position et  $D$ , une constante de diffusion. Afin de résoudre cette équation, on peut utiliser l'approximation de l'équation de diffusion de particule dans la limite d'un petit nombre de Peclet  $P_e$ . Ce nombre est définie comme suit :

$$P_e = \frac{\text{Taux transport additif}}{\text{Taux de transport de diffusion}} \quad (1.3.2)$$

Dans le cas de la croissance typique des cristaux d'eau, ce nombre est de l'ordre de  $10^{-5}$ . Cela revient à dire que la diffusion ajuste la densité de particules d'eau autour du cristal beaucoup plus rapidement que le changement de forme du cristal [6]. Dans ce genre de situation, l'équation de diffusion peut être réduite à l'équation de Laplace :

$$\nabla^2 c = 0 \quad (1.3.3)$$

Cette équation doit être résolue avec les bonnes conditions aux frontières appliquées à la concentration  $c(x)$ . Pour ces conditions, il existe plusieurs hypothèses valides. La plus pertinente est celle de la conservation de la masse car elle s'utilise dans le cas d'un cristal qui se forme dans l'air.[2] Cette condition, comme son nom l'indique, suppose que lorsqu'un cristal est en croissance dans l'air, il y a un flux de particules provenant de la vapeur qui se dirige vers la surface du cristal et cause la croissance de celui-ci. Dans ce cas précis, on peut démontrer que la condition à l'interface vapeur et glace est donné par cette équation :

$$\nu_n = \frac{c_{sat} D}{c_{ice}} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial n} \right)_{surface} \quad (1.3.4)$$

Où  $\nu_n$  est la vitesse de croissance normale à l'interface vapeur/glace,  $(\frac{\partial \sigma}{\partial n})_{surface}$  est le gradient normal de super-saturation à l'interface,  $c_{sat}(T), c_{ice}$ ,  $D$  est la constante de diffusion de l'air estimée à  $10^{-5}$  pour des condition atmosphérique classique[2]. Pour un cristal de glace formé à partir de vapeur d'eau, il est possible d'écrire  $\nu_n$  en termes de l'équation de Hertz-Knudsen [8] :

$$\nu_n = \alpha \frac{c_{sat}}{c_{solid}} \sqrt{\frac{k_B T}{2m\pi}} \sigma_{surf} \quad (1.3.5)$$

$$= \alpha \nu_{kin} \sigma_{surf} \quad (1.3.6)$$

Où

$$\nu_{kin} = \frac{c_{sat}}{c_{solid}} \sqrt{\frac{k_B T}{2m\pi}} \quad (1.3.7)$$

Où  $\nu_{kin}$  est la vitesse des particule,  $k_B T$  est l'énergie,  $m$  est la masse d'une molécule d'eau,  $c_{solid} = \frac{\rho_{ice}}{m}$  est la densité numérique de la glace,  $\sigma_{surf} = c_{surf}/c_{sat}$  est la super-saturation juste au dessus de la surface de croissance,  $c_{surf}$  est la densité numérique de la vapeur d'eau à la surface et  $c_{sat}(T)$  représente la densité numérique à l'équilibre au-dessus d'une surface de glace plate. Quand à la variable  $\alpha$ , il s'agit du coefficient de condensation.

On peut combiner les équations 1.3.4 et 1.3.6 pour obtenir notre condition frontière à l'interface :

$$X_0 \left( \frac{\partial \sigma}{\partial n} \right)_{surface} = \alpha \sigma_{surf} \quad (1.3.8)$$

Où

$$X_0 = \frac{c_{sat}D}{c_{ice}\nu_{kin}} \quad (1.3.9)$$

L'estimation de ce paramètre peut être effectué et se trouve dans la littérature [6]. Les valeurs associées pour des températures données se trouvent dans le tableau 1.

Tableau (1) Valeurs typique selon la température

$T(^{\circ}\text{C})$	$c_{sat}/c_{solid}$	$\nu_{kin}(\mu\text{ms}^{-1})$
-20	$0.96 \cdot 10^{-6}$	131
-15	$1.51 \cdot 10^{-6}$	208
-10	$2.33 \cdot 10^{-6}$	324

Enfin, la dernière chose qui reste à modéliser est le coefficient de condensation  $\alpha$ . Ce coefficient dépend de la physique derrière l'attachement des molécules gazeuses d'eau à la surface de glace. Ce phénomène physique, qui est appelé l'attachement cinétique, est non trivial et ne semble pas posséder d'équation, selon nos recherches. Cependant, des méthodes expérimentales montrent que ce coefficient dépend en général de la température, de la géométrie, de  $\sigma_{surf}$  et des interactions chimiques entre les molécules. Par exemple, un coefficient de condensation  $\alpha$  de 1 revient à supposer que toutes les particules qui rentrent en contact avec la glace restent automatiquement là. Cette approximation est bonne dans les cas où nous avons une surface rugueuse ou liquide. Cependant, ce n'est pas nécessairement toujours le cas puisque cela demande des conditions parfaites, ce qui est peu probable. Les expériences montrent que pour l'eau, lors de la formation de flocons de neige, le coefficient de condensation devrait avoir une valeur  $0 < \alpha < 1$ . [6]

Puisque la phase de nucléation ne fait pas intervenir de dendrites, le processus de simulation se fera à partir d'une plaque hexagonale déjà formée, permettant d'ignorer cette nucléation dans la simulation. Pour les conditions initiales concernant la température et la concentration de vapeur d'eau, elles seront supposées uniformes au temps  $t=0$  de la simulation.

Il existerait deux façons de modéliser la frontière de l'espace de simulation. La première serait de laisser celle-ci constante dans le temps supposant qu'elle est à l'équilibre avec un réservoir de vapeur d'eau. La seconde est de ne rien imposer aux extrémités en supposant qu'il n'y ait que l'eau initial de disponible. Cela revient à supposer qu'il a pas de réservoir, car d'autres flocons sont en entrain croître autour de celui-ci dans le même nuage, ce qui semble plus réaliste. Les méthodes numériques qui nous intéressent devront donc respecter l'équation de Laplace et les conditions frontières de conservation de masse à l'interface vapeur glace.

## 2 Recherche de solution

Cette section regroupe les différentes méthodes retrouvées dans la littérature pour la simulation numérique d'un tel phénomène. Les différentes méthodes seront présentées brièvement et seront jugées sur leurs forces et faiblesses à répondre au problème de la croissance de flocons de neige avec dendrites. Les attributs désirés sont la simplicité d'implémentation et la précision de la modélisation, tandis que la contrainte principale est d'avoir un coût d'opération exécutable sur un ordinateur standard.

### 2.1 Différentes méthodes

La contrainte la plus importante lors de la considération du choix de la méthode est le coût en opération de celle-ci. Puisque la simulation d'un flocon de neige nécessite la modélisation d'un beaucoup plus grand nombre de molécules par rapport à d'autres problèmes similaires, plusieurs méthodes existent qui modélisent bien le problème, mais seraient impossibles à faire fonctionner sur un ordinateur de puissance conventionnelle. Ainsi, des méthodes bien connues et documentées, telle que la dynamique moléculaire, utilisée en physique de matière condensée, doivent être immédiatement rejetées. Parmi les méthodes satisfaisant notre contrainte de coût en opération, trois ressortent par leur simplicité et la précision de leurs résultats. Tout d'abord, il y a les méthodes de Monte Carlo, dont celle qui est généralement utilisée pour la croissance d'un cristal par vapeur : « Diffusion limitée par agrégation ». Puis, il y a la méthode des « Champs de phase » (Phase field method) qui est une approche sans composante aléatoire.

Celle-ci se base, comme son nom l'indique, sur les différentes phases de la matière liquide ou gazeuse en diffusion qui se solidifie. Finalement, il y a la méthode de « Cellular Automata » qui fonctionne sur une grille avec des cellules possédant plusieurs états possibles et qui se modifient avec des conditions de voisins proches. Ces trois méthodes considérées, ainsi que leur force et faiblesse, seront expliquées brièvement dans les sous-sections suivantes.

### 2.1.1 Diffusion limitée par agrégation (DLA)

La méthode de diffusion limitée par agrégation suppose que la croissance est faite par l'agrégation de particules Browniennes (généralement de gaz), avec ou sans collision. Le principe est relativement simple, on génère une grille sur laquelle on fixe le cristal initial. Une fois l'état initial déterminé, on initialise un ou plusieurs marcheurs aléatoires pouvant se déplacer sur la grille. Ceux-ci représentent le déplacement des particules suivant le mouvement Brownien. Par la suite, à chaque itération, on déplace le ou les marcheurs et, selon les spécifications de la méthode implémentée, différents événements peuvent arriver. Par exemple, pour un seul marcheur qui entre en contact avec une des cases qui contiennent la particule solide du cristal, on peut avoir une probabilité qu'il s'aggrave au cristal. Cette probabilité est basée sur un calcul dépendant seulement des plus proches voisins dans le cristal. Si le marcheur sort de la grille, on en initie un nouveau à une position aléatoire. Cette méthode peut devenir de plus en plus complexe plus on suppose d'événements possibles entre les marcheurs et les parties sur la grille qui font partie du cristal.[4]

Puisque le problème de la croissance de cristaux à partir d'un gaz est en partie un problème de diffusion et qu'un marcheur aléatoire respecte la condition de Laplace 1.3.3, on a la même densité de probabilité partout. Elle devrait donc donner une solution valide, surtout si on utilise des paramètres d'interaction qui sont en accord avec les conditions frontière désirées pour la solidification des cristaux d'eau. [4][9]

Bien que cette méthode soit valide et puisse donner des résultats qui ressemblent à des flocons de neige en dendrite, voir la figure 6, mais on peut remarquer que les symétries de rotation ne sont pas respectées. Cette méthode est relativement vieille et est rarement utilisée dans la littérature actuelle pour étudier la formation des flocons de neige.

### 2.1.2 Méthode des Champs de Phase (MCP)

La méthode des champs de phase utilise des équations cinétiques, telles que l'attachement cinétique, et des équations de diffusion. Ces équations sont décrites par plusieurs paramètres. En général, la méthode admet un paramètre de phase qui varie entre -1 (vapeur d'eau) et 1 (glace), un paramètre de température, un pour le potentiel chimique de l'interface solide/gazeux et un pour l'anisotropie. Pour les conditions initiales du système, on détermine la forme du cristal de glace et l'état de la matière autour de celui-ci. Ensuite, on le laisse évoluer de manière à ce que les conditions d'interaction aux frontières soient respectées. Les équations cinétiques qui peuvent représenter les interactions de l'interface entre la phase gazeuse et solide sont connues et peuvent être trouvées dans la littérature. Ces équations donnent donc des conditions aux frontières des l'interface solide/gazeux et on peut donc simuler le changement de la forme de la frontière entre les deux états. [10][11]

Cette méthode, déjà beaucoup plus complexe que le DLA, donne de meilleurs résultats et peut être implémenté en 3D. Ces équations sont directement liées à la physique de croissance de cristaux par vapeur. Elle est donc fort intéressante pour la réalisation du projet. Par contre, elle possède aussi quelques défauts comme le soulève Kenneth Libbrecht dans son livre Snow crystal : «For example, the attachment kinetics function was only weakly anisotropic and did not include the known basal nucleation barrier » [2]. Elle n'en demeure pas moins une meilleure approximation du phénomène que la méthode DLA.

### 2.1.3 Automate Cellulaire (AC)

La méthode d'automate cellulaire s'effectue sur une grille discrète comme pour la méthode DLA. Chaque cellule de la grille peut se trouver dans un état parmi un nombre d'états déterminé par la physique que l'on veut simuler. Après avoir donné les paramètres initiaux à chaque cellule, on initie les itérations, et donc chaque cellule modifie sa valeur en fonction de ses plus proches voisins. La définition des proches voisins et leur impact sur la cellule est définie encore une fois par la physique du problème que l'on tente de simuler.

Lorsque cette méthode est plus spécifiquement utilisée à la croissance de cristaux à partir d'un gaz, les valeurs des cellules représentent l'état de la matière. Par exemple, une valeur de 1 serait attribuée pour la glace et une valeur



entre 0 et 0.99 serait pour la vapeur (selon sa concentration). Les interactions des plus proches voisins sont définies pour respecter encore une fois l'équation de Laplace pour simuler la diffusion du gaz et des règles sont implémenté pour les cellules qui sont considérées proche voisin du cristal de glace.[12][13]

Cette méthode donne d'excellents résultats et est relativement simple et rapide à implémenter. Si les paramètres d'implantation sont bien choisis, ils représentent bien la physique en oeuvre lors de la formation des flocons de neige. Cette méthode n'a pas le problème de simuler une anisotropie forte pour l'attachement cinétique contrairement la méthode des champs de phase. Elle peut aussi être utilisée pour simuler la croissance en 3D. Le seul défaut en général attribué à cette méthode et que les paramètres sont souvent dur à lier à des paramètres physiques. Mais des articles plus récents on montre que cette méthode peut bien être lier a des paramètres physiques. [2]

## 2.2 Choix de la méthode et des outils numériques

Le tableau 2 montre les caractéristiques principales des différentes méthodes considérées, et la figure 6 présente un exemple visuel de la croissance avec celles-ci. Considérant que des propriétés les plus importantes des flocons des neiges sont ses symétries de rotation 1/6, on remarque immédiatement la faible performance de la méthode DLA. En effet, la figure 6 a) montre, à vue d'œil, que les différentes branches du flocon ne sont pas pareilles. On peut donc rejeter cette méthode, d'autant plus qu'elle est vieille et peu utilisée de nos jours, pour la croissance des cristaux d'eau.[2] [5].

Il reste donc les méthodes DCP et AC qui produisent toutes les deux résultats acceptables. La méthode AC à l'avantage d'être relativement simple et de présenter les meilleurs résultats, bien selon le professeur Kenneth G Libbrecht [2] elle est supposément difficile à lier à la physique. En revanche, la méthode MCP qui a l'avantage de pouvoir être implémentée en 3D plus facilement que la AC et de donner des bons résultats a le désavantage d'être plus difficile à implémenter de manière générale. Il faut noter aussi que la symétrie de rotation avec MCP n'est pas aussi parfaite qu'avec le AC, mais ceci est acceptable, puisque dans la symétrie des vrais flocons n'est pas parfaite non plus. Sachant que l'inconvénient principal de la méthode AC, soit son lien à la physique, peut être corrigé [2][14], tandis que l'avantage principal du MCP, soit l'implémentation en 3D, n'est pas nécessaire, la méthode choisie pour l'implémentation sera la méthode d'automate cellulaire(AC), puisque sa rapidité, simplicité et précision satisfait le moyeu au besoin du projet.

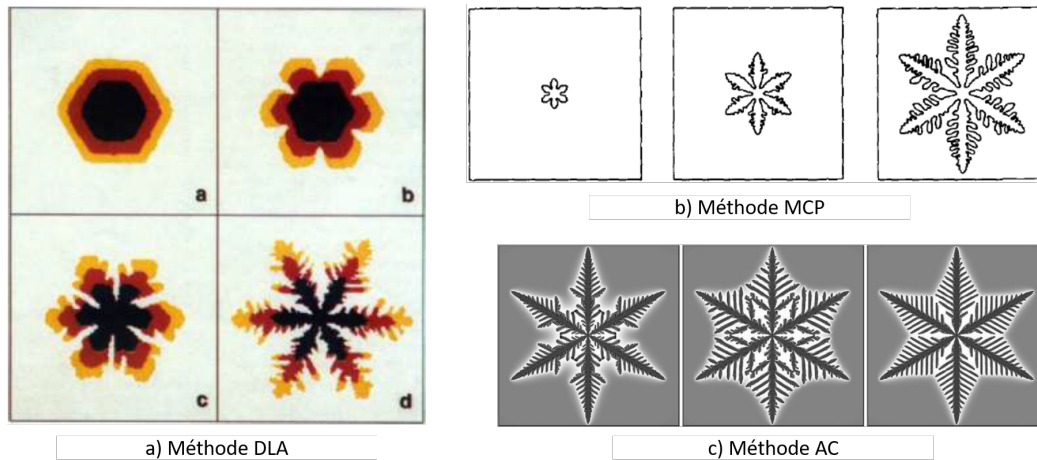


FIGURE (6) Résultats de simulation de différentes méthodes tiré de [4][10][12]

Pour l'implémentation, l'équipe a choisi de fortement se baser sur la version de la méthode AC réalisée dans l'article [12] qui ajoute une composante de bruit aléatoire pour rendre le modèle plus réaliste. Ainsi que sur l'article plus récent [14] pour avoir des paramètres d'implémentation qui sont plus facile à lier avec de vraie valeurs physiques. En ce qui a trait aux outils à utiliser pour réaliser le projet, l'équipe a choisi d'utiliser le langage Python, car il est gratuit et permet un accès facile pour chaque membre de l'équipe. Ce langage est aussi familier pour chaque membre de l'équipe et est généralement bien documenté.

Bien qu'un langage comme le C aurait été plus approprié, car il est beaucoup plus rapide pour effectuer les simulations et aurait permis de gagner un temps considérable. Considérant que les membres de l'équipe ne sont pas familiers

Tableau (2) Caractéristiques des différentes méthodes

Méthode	Avantages	Inconvénients
DLA	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bon résultats</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Vielle</li> <li>• Peu symétrique</li> </ul>
MCP	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bon résultats</li> <li>• Fonctionne bien en 3D</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Faiblement anisotropique</li> <li>• Compliquée</li> </ul>
AC	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Excellents résultats</li> <li>• Simple à implémenter</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Difficile à lier à la physique</li> </ul>

avec ce langage, il a été décidé de ne pas l'utiliser. La plate-forme de partage GIT sera également utilisée pour simplifier le développement du code et le partage du travail et ainsi faciliter la gestion des étapes subséquentes.

### 3 Planification des prochaines étapes

Cette section établira les prochaines étapes ainsi que l'organisation des tâches au sein de l'équipe pour la suite du projet de simulation. Pour ce faire l'équipe s'est basée sur les objectifs du plan de cours en spécifiant des sous-tâches qui sont données dans le tableau 3 avec l'attribution de la tâche et la date d'échéance de celle-ci.

La prochaine étape du projet est le début de la mise en oeuvre de la méthode AC. Pour ce faire il faut que tous les membres de l'équipe se familiarisent avec les articles relatifs à cette méthode. Par la suite, un pseudo-code sera d'abord écrit par l'un des membres de l'équipe pour permettre une étape de programmation plus rapide par la suite. Pendant ce temps, un autre membre s'occupera de définir les valeurs pour les paramètres numériques de la méthode. Le dernier membre aura pour tâche de créer un code afin de générer un vidéo à partir des résultats de la simulation. Enfin, un membre de l'équipe se verra attribuer l'écriture de la section qui concerne ces étapes dans le rapport final.

Ensuite le projet passera à l'implantation de la méthode, ainsi qu'à la correction des erreurs de programmation. L'atteinte de cet objectif commencera par la conversion du pseudo-code en code Python fonctionnel. En parallèle, un code sera effectué pour convertir les résultats de la simulation sous forme de vidéo. Une fois que le code sera fonctionnel, on comparera nos résultats avec ceux des articles [14] [12] et les résultats expérimentaux du professeur Kenneth G. Libbrecht[2]. Ces comparaisons permettront de clarifier les problèmes relatifs à la méthode et nous permettront de passer à la dernière sous-étape de cet objectif, soit d'appliquer des corrections au code.

Une fois le code jugé fonctionnel, l'objectif sera d'évaluer les performances détaillées du code. Pour ce faire, le code sera testé avec un ensemble de valeurs pour les paramètres de la méthode et l'observation de leur impact sur les résultats et sur le temps d'exécution du code. Les limitations de simulation seront explorées pour bien comprendre les limites de la méthode. Selon ces évaluations, l'équipe pourra appliquer les correctifs nécessaires sur le code de simulation. Enfin, un membre de l'équipe sera attribué à la rédaction de ces évaluations dans le rapport final.

Une fois les derniers correctifs apportés au code, le dernier objectif du projet sera de générer les résultats finaux de la simulation et l'évaluation de ceux-ci, puis de comparer le tout avec la littérature et les expériences faites en laboratoire [2]. Ces résultats finaux devront être présentés sous format visuel (vidéos/images) pour le rapport. Finalement, la rédaction du rapport devra être complétée.

Il y a aussi des tâches supplémentaires qui ne sont pas reliées aux objectifs du développement du code. L'équipe a identifié 2 tâches de ce type. La première est de lier la présentation orale qui aura lieu à la fin du cours. Pour cette présentation, un support visuel, tel qu'un PowerPoint, sera nécessaire pour une communication adéquate des résultats du projet. De ce fait, chaque membre de l'équipe aura une section attribuée et devra faire ses diapositives. Pour finir, un membre de l'équipe se verra attribuer la responsabilité de s'assurer de l'homogénéité du rapport final.

Tableau (3) Tâches

	Attribution	Date limite
Objectif 4 : Mise en oeuvre d'une méthode numérique sélectionnée		
- Finir les lectures sur les articles [12][13][14]	Toute l'équipe	10 Mars
- Définir les paramètres de la méthode AC qui sera utilisé	Alexis	20 Mars
- Écriture d'un pseudo-code	Arthur	20 Mars
- Rédaction de la méthode dans le rapport final	Arthur,Alexis	20 Avril
- Coder le programme de traitement de la vidéo réelle	Didier	20 Mars
Objectif 5 : Premiers essais et compréhension des défis principaux		
- Coder la méthode	Arthur, Alexis	3 Avril
- Coder la transformation des résultats en format vidéo	Didier	27 Mars
- Tester la méthode et la comparer au résultats de la littérature	Arthur	10 Avril
- Clarifier et corriger la méthode en fonction des premiers résultats	Alexis, Didier	17 Avril
Objectif 6 : Évaluation détaillée de la performance du code numérique		
- Évaluer l'impact des différents paramètres sur les résultats	Alexis	23 Avril
- Évaluer les limitations du code	Didier	23 Avril
- Rédiger la partie du rapport final sur les performances de la simulation	Alexis, Didier	23 Avril
Objectif 7 : Résultats de simulation, évaluation de la qualité des résultats		
- Effectuer la comparaison entre résultats du code et les données expérimentales	Alexis	25 Avril
- Écrire la discussions des résultats finaux dans le rapport	Tous	30 Avril
- Trouver une façon appropriée de présenter les résultats sous forme visuel	Arthur, Didier	1 Avril
Tâches supplémentaires		
- Préparation du Power Point pour la présentation oral	Tous	3 Avril
- S'assurer de l'homogénéité du rapport final	Didier	5 Mai


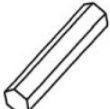

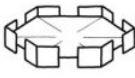




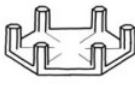


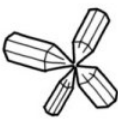





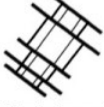





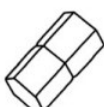





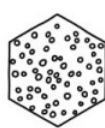



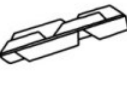

## Références

- [1] Patrick Hairy *La solidification des alliages métalliques* <https://metalblog.ctif.com/2018/09/10/la-solidification-des-alliages-metalliques/>. 2018.
- [2] Kenneth G. Libbrecht *Snow Crystals* aucune. 2019.
- [3] Kenneth G. Libbrecht, <http://www.snowcrystals.com/>
- [4] Thomas C. Halsey *DIFFUSION-LIMITED AGGREGATION : A MODEL FOR PATTERN FORMATION* PHYSICS TODAY. 2000.
- [5] Andrea C Leviy, Miroslav Kotrla *Theory and simulation of crystal growth* J. Phys. : Condens. Matter . 2018.
- [6] Kenneth G. Libbrecht *The physics of snow crystals* INSTITUTE OF PHYSICS PUBLISHING. 2005.
- [7] Futurascience, <https://www.futura-sciences.com/planete/photos/neige-flocons-neige-petits-miracles-beaute-1840/neige-flocons-tailles-variables-13338/>
- [8] Saito Y *Statistical Physics of Crystal Growth - ISBN 10 : 9810228341* World Scientific Publishing Co Pte Ltd. 1996.
- [9] Rong-Fu Xiao, J. Iwan D. Alexander, and Franz Rosenberger *Morphological evolution of growing crystals : A Monte Carlo simulation* PHYSICAL REVIEW A. 1988.
- [10] Ryo Kobayashi *Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth* PHYSICA D. 1992.
- [11] G. Demange, H. Zapolsky, R. Patte, and M. Brunel *Growth kinetics and morphology of snowflakes in supersaturated atmosphere using a three-dimensional phase-field model* PHYSICAL REVIEW. 2017.
- [12] Janko Gravner, David Griffeath *Modeling snow crystal growth II : A mesoscopic lattice map with plausible dynamics* PHYSICA D. 2007.
- [13] Norman H. Packard, Stephen Wolfram *Two-Dimensional Cellular Automata* Journal of Statistical Physics. 1985.

- [14] Kenneth G. Libbrecht *Quantitative Modeling of Faceted Ice Crystal Growth from Water Vapor Using Cellular Automata* Journal of Computational Methods in Physics. 2013.
- [15] Janko Gravner, David Griffeath *Modeling snow-crystal growth : A three-dimensional mesoscopic approach* PHYSICAL REVIEW E. 2009.

# Annexe

## A

				
Simple Prisms	Solid Columns	Sheaths	Scrolls on Plates	Triangular Forms
				
Hexagonal Plates	Hollow Columns	Cups	Columns on Plates	12-branched Stars
				
Stellar Plates	Bullet Rosettes	Capped Columns	Split Plates & Stars	Radiating Plates
				
Sectored Plates	Isolated Bullets	Multiply Capped Columns	Skeletal Forms	Radiating Dendrites
				
Simple Stars	Simple Needles	Capped Bullets	Twin Columns	Irregulars
				
Stellar Dendrites	Needle Clusters	Double Plates	Arrowhead Twins	Rimed
				
Fernlike Stellar Dendrites	Crossed Needles	Hollow Plates	Crossed Plates	Graupel

Types of Snowflakes ... SnowCrystals.com

FIGURE (7) tableau des différentes catégorie de flocon [2]