Un équivalent particulaire de l'équation de Kuramoto-Sivashinsky

François James[1], Phung Thanh-Tam[1,2], & Pascal Brault[2]

[1] MAPMO, CNRS & Université d'Orléans, BP 6759, 45067 Orléans Cedex 2
[2] GREMI, CNRS & Université d'Orléans, BP 6744, 45067 Orléans Cedex 2
francois.james@univ-orleans.fr

Résumé. L'équation de Kuramoto-Sivashinsky est couramment utilisée dans divers modèles de croissance d'interface. En dimension 1 d'espace, elle prend la forme suivante : $\partial_t h + \frac{|\partial_x h|^2}{2} = -\partial_{xx} h - \partial_{xxxx} h$ où h est la hauteur de l'interface. Il est loisible d'interpréter le gradient en espace de la solution, $u = -\partial_x h$, comme un champ de vitesse, et de suivre une population de particules qui évoluent en suivant ce champ. On constate alors clairement une dynamique comportant une partie « particules collantes », couplée à des oscillations. L'enjeu est ici de proposer un système de particules dont les trajectoires sont analogues, et qui, moyennant certains scalings, redonne l'équation précédente à la limite. Un tel système peut s'obtenir à l'aide d'une force dépendant des vitesses des particules, et non de leurs positions.

Abstract. The Kuramoto-Sivashinsky equation is commonly used in various models of interface growth. In a one-dimensional space, it takes the form $\partial_t h + \frac{|\partial_x h|^2}{2} = -\partial_{xx} h - \partial_{xxxx} h$ where h is the height of the interface. It is possible to interpret the spatial gradient of the solution, $u = -\partial_x h$, as a velocity field, and to track the particles population governed by this field. We thus clearly observed a dynamical component designated by the "gluing particles", which is coupled to some oscillations. The aim is here to propose a system of particles producing similar trajectories and which, averaging some scalings, return in the limit the previous equation. Such a system can be obtained using a force depending on the particle velocity, and not on their positions.

1 Introduction

L'équation de Kuramoto-Sivashinsky est couramment utilisée dans divers modèles de croissance d'interfaces telles que les fronts de flammes [2,3], la croissance de couche minces, l'érosion/gravure de surface [4]. En dimension 1 d'espace, elle prend la forme suivante, où h est la hauteur de l'interface :

$$\partial_t h + \frac{|\partial_x h|^2}{2} = -\partial_{xx} h - \partial_{xxxx} h. \tag{1}$$

Une des propriétés caractéristiques de l'équation de Kuramoto-Sivashinsky est de générer une structure quasi-périodique [4].

Il est intéssant et utile de connecter cette équation différentielle avec une approche particulaire afin de tenter de comprendre les mécanismes élémentaires intervenant dans les phénomènes physiques proposés ci-dessus. Une approche consiste à interpréter le gradient en espace de la solution de l'equation (1), $u = -\partial_x h$, comme un champ de vitesse, et de suivre une population de particules qui évoluent en suivant ce champ, qui vérifie l'équation de Burgers modifiée

$$\partial_t u + \partial_x \frac{u^2}{2} = -\partial_{xx} u - \partial_{xxxx} u. \tag{2}$$

On constate alors clairement [7] que la dynamique comporte une partie "particules collantes".

© **Non Linéaire Publications**, Avenue de l'Université, BP 12, 76801 Saint-Etienne du Rouvray cedex

2 L'équivalent particulaire

La référence [5] propose un système de particules en interaction avec un potentiel harmonique limité aux premiers voisins :

$$\dot{x}_i = u_i, \quad \dot{u}_i = (x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}), \tag{3}$$

avec des règles de collision sans préservation de la masse, mais aussi de création de particules lorsqu'une certaine distance critique entre deux particules est atteinte. Cette longueur serait reliée à la quasi-période de (1). Même si un certain nombre de caractéristiques de l'équation macroscopique sont reproduites par ce modèle, le fait qu'il semble impossible d'en dériver une équation aux dérivées partielles (en particulier le terme d'ordre 4 de (1)) n'est pas satisfaisant. De plus, travailler avec un potentiel harmonique de ce type conduit plutôt à une équation de type ondes sur la fonction X définie par le scaling

$$\epsilon x_i(t) = X(\epsilon t, \epsilon i)$$

lorsque ϵ tend vers 0. Le paramètre ϵ est ici l'inverse du nombre de particules.

Afin de récupérer les structures quasi-périodiques sans introduire artificiellement une longueur, nous partons de la remarque suivante, basée sur des simulations Monte-Carlo dans un contexte différent [6]. Il est montré dans cette référence que si l'on prend en compte des interactions aux seconds voisins, on peut générer des structures quasi-périodiques. Compte tenu également de la remarque précédente, nous remplaçons le potentiel harmonique par des forces dépendent des vitesses et non plus des positions. Notre prototype de système de particules en interaction sera donc le suivant :

$$\begin{cases} \dot{x}_i = v_i \\ \dot{v}_i = \alpha(v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}) + \beta(v_{i-2} - 2v_i + v_{i+2}), \end{cases} \tag{4}$$

avec la dynamique sous-jacente des particules collantes : lorsque 2 particules collisionnent, elles créent une particule unique, dont la masse est la somme des deux précédentes, et la vitesse calculée de façon à préserver la quantité de mouvement. Il est classique (voir par exemple [1]) que la dynamique des particules collantes ($\alpha = \beta = 0$ ici) donne des solutions du système des gaz sans pression, où ρ est la densité, et u la vitesse du gaz

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x \rho u = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2) = 0\,. \end{cases} \tag{5}$$

Ce système se ramène à l'équation de Burgers lorsque les solutions sont régulières, et permet donc de retrouver la première partie de l'équation (2).

Si $\alpha > 0$ on a affaire à une attraction au plus proche voisin, et la différence finie correspondante donne formellement une dérivée seconde en espace, qui s'interprète comme une viscosité. Autrement dit, elle pourrait être cohérente avec un système d'Euler sans pression avec viscosité. L'interaction au second voisin peut se récrire de manière à faire apparaître une différence finie approchant une dérivée quatrième. Le système devient alors

$$\begin{cases} \dot{x}_i = v_i \\ \dot{v}_i = (\alpha + 4\beta)(v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}) + \beta(v_{i-2} - 4v_{i-1} + 6v_i - 4v_{i+1} + v_{i+2})\,. \end{cases} \tag{6}$$

Toujours formellement, pour être cohérent avec l'équation (1), il faut un coefficient négatif sur la dérivée quatrième, soit $\beta < 0$, autrement dit une répulsion au deuxième voisin, et un coefficient négatif également pour la dérivée seconde, soit $\alpha + 4\beta < 0$. On note que tout $\alpha > 0$ convient, donc répulsif au premier voisin, mais on peut également choisir une attraction (donc compatible avec une viscosité) "pas trop forte", au sens où $0 < \alpha < -4\beta$. Les valeurs des coefficients de (1), c'est-à-dire -1 et -1, sont obtenues avec $\beta = -1$, et $\alpha = 3$. Avec cette interprétation, (1) pourrait donc bien s'interpréter comme conséquence d'une attraction au premier voisin, et répulsion au second.

3 La dynamique

Ce modèle pour l'heure montre des trajectoires qualitativement compatibles avec les simulations de [7] (voir figure 1, obtenue avec un petit nombre de particules). Il permet aussi, partant d'un ensemble de particules de vitesses aléatoires uniformes centrées autour de 0, de montrer que le spectre des vitesses tend à se concentrer, donc d'obtenir une organisation plus ou moins périodique. Le réglage des paramètres reste cependant difficile, entre nombre de particules, temps de simulation et valeurs des constantes. Ainsi, pour obtenir la figure 2 (où l'échelle en temps et espace n'est pas la même que pour la figure 1), on part de 11000 particules, au temps $t = 10$ il n'en reste plus que 181.

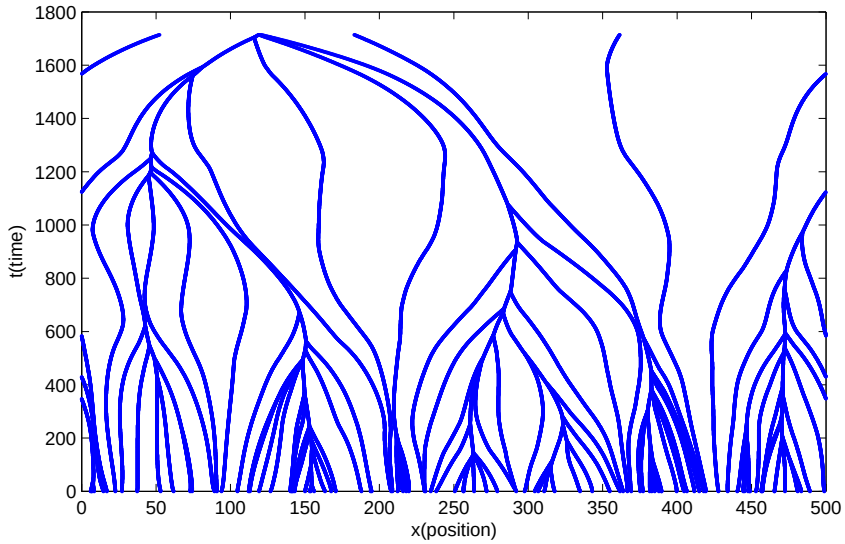

FIG. **1.** Trajectoires des particules avec le modèle (4).

4 Conclusion

Le modèle doit donc se trouver une base physique, permettant de comprendre clairement la signification et le rôle des termes de dérivées spatiales des vitesses par rapport à la dynamique des interfaces. Il convient également de bien comprendre le scaling permettant de passer à la limite lorsque le nombre de particules tend vers ∞.

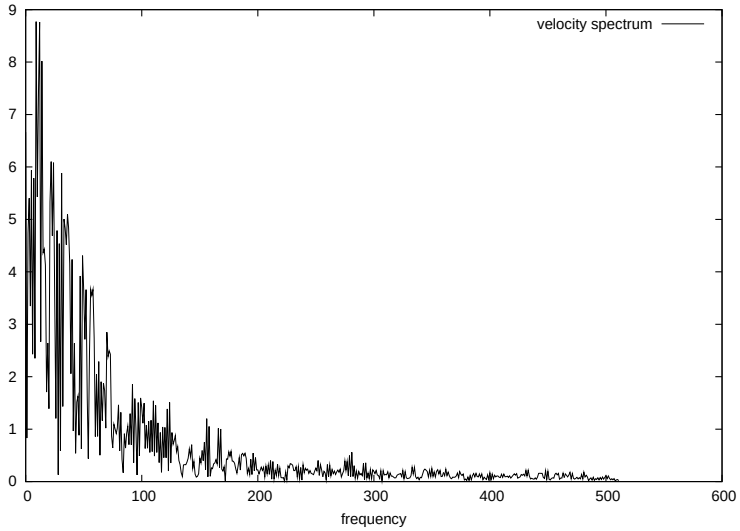

FIG. **2.** Spectre des vitesses.

Références

1. F. BOUCHUT, On zero-pressure gas dynamics, in *Advances in Kinetic Theory and Computing*, *Series on Advances in Mathematics for Applied Sciences*, **22**, pp. 171-190, World Scientific (1994).

2. Y. KURAMOTO & T. TSUZUKI, On the dormation of dissipative structures in reaction-diffusion systems, *Progress in Theoretical Physics*, **54**, 687-699 (1975).

3. G. I. SIVASHINSKY, Instabilities, pattern formation, and turbulence in flames, *Annual Review in Fluid Mechanics*, **15**, 179-199 (1983).

4. S. PARK, B. KAHNG, H. JEONG & A.-L. BARABÁSI, Dynamics of ripple formation in sputter erosion : Nonlinear phenomena, *Physical Review Letters*, **83**, 3486-3489 (1999).

5. M. ROST & J. KRUG, A particle model for Kuramoto-Sivashinsky equation, *Physica D*, **88**, 1-13 (1995).

6. E. S. HOOD, B. H. TOBY & W. H. WEINBERG, Precursor-mediated molecular chemisorption and thermal desorption : The interrelationships among energetics, kinetics, and adsorbate lattice structure, *Physical Review Letters*, **55**, 2437-2440 (1985).

7. T. BORH & A. PIKOVSKY, Anomalous diffusion in the Kuramoto-Sivashinsky equation, *Physical Review Letters*, **70**, 2892-2895 (1993).