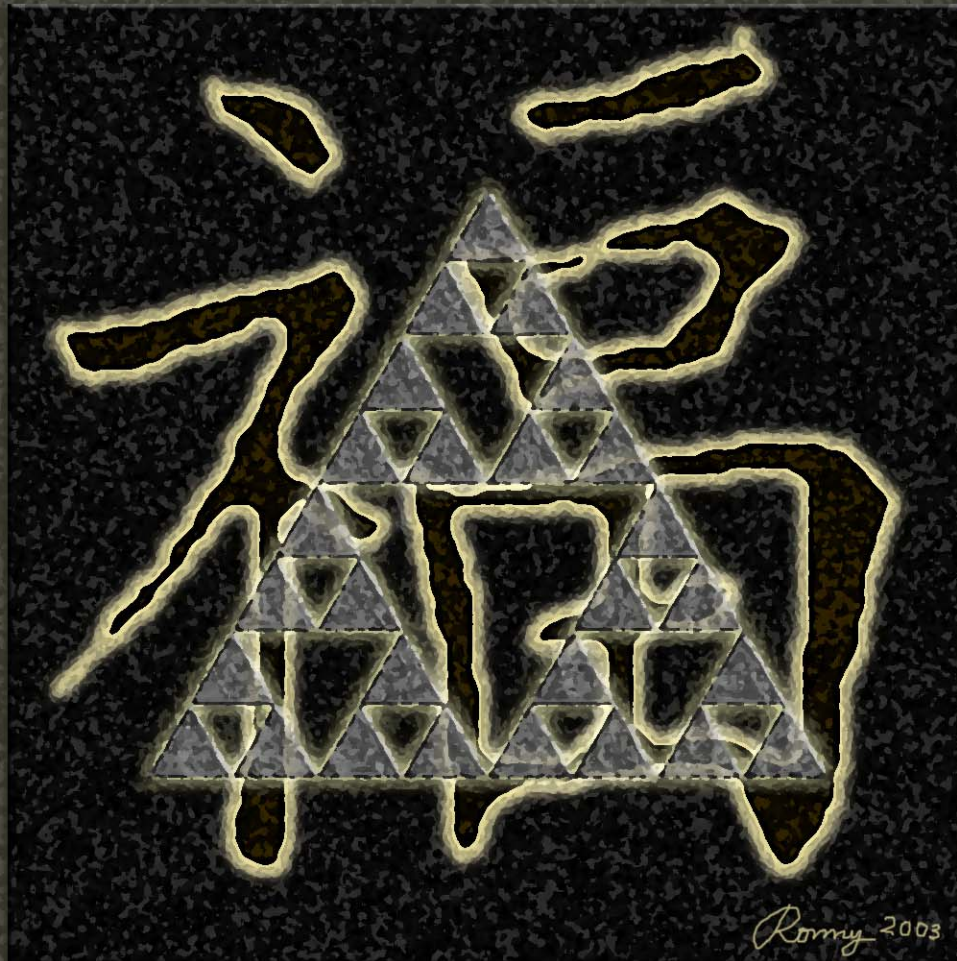


Université de Neuchâtel

Thèse de Docteur ès Sciences

Géo-Mathématiques



Modèles stochastiques de croissance surfacique :
application à la simulation des stromatolithes

Ronny Pattisina

Neuchâtel, 15 Mars 2003

Th. 1684 + CD

IMPRIMATUR POUR LA THESE

**Modèles stochastiques de croissance surfacique:
application à la simulation des stromatolithes**

de M. Ronny PATTISINA

UNIVERSITE DE NEUCHATEL

FACULTE DES SCIENCES

La Faculté des sciences de l'Université de
Neuchâtel, sur le rapport des membres du jury

MM. E. Verecchia (directeur de thèse), P. Perrochet,
C. Zollikofer (Zürich), J. Kaandorp (Amsterdam)
et J. Pallo (Dijon)

autorise l'impression de la présente thèse.

Neuchâtel, le 29 avril 2003

Le doyen:



François Zwahlen



1041178732

à A& Ω

Couverture :

*Un triangle et un caractère chinois :
Le triangle de Sierpinski (tamis de Sierpinski) est
une des figures fractales les plus connues.
Ce caractère chinois veut dire le bonheur et la paix.
C'est un assemblage de plusieurs mots :
Dieu, premier homme et jardin.*

*La fractale symbolise le thème de cette thèse.
Le bonheur, c'est mon état d'âme durant cette thèse et
ce que je souhaite également à Eric, mon directeur de thèse.*

Avant-Propos

Il m'est agréable d'exprimer ici mes profonds sentiments de gratitude à toutes les personnes qui ont participé, directement ou indirectement, à l'élaboration de cette thèse.

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein de l'Institut de géologie de l'Université de Neuchâtel en Suisse. Je voudrais donc remercier, en premier lieu, Monsieur le Professeur Eric Verrecchia, mon directeur de thèse, de m'avoir accueilli dans son équipe, de m'avoir confié un poste d'assistant, d'avoir guidé ce travail, corrigé mon français, ainsi que de toute l'attention qu'il m'a témoignée au cours de ces deux ans et demi.

Messieurs Pierre Perrochet, Jaap Kaandorp, Jean Pallo, et Christoph Zollikofer ont accepté d'examiner ce travail. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma gratitude pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'être rapporteurs de ma thèse.

C'est un plaisir, pour moi, d'exprimer ma reconnaissance envers Messieurs Alain Diou, Vincent Vajnovszki, et Christophe Dupraz pour leurs nombreux conseils avisés et pour leur disponibilité notamment lors des discussions concernant l'analyse numérique, les mathématiques discrètes, et les stromatolithes.

Ma reconnaissance s'adresse également au Fond National Suisse de la Recherche Scientifique (projet N° 2100-066853) pour son soutien financier durant six mois de ma thèse.

Bien évidemment, je tiens à remercier, pour leur sympathie et leur amabilité, toutes les personnes et membres de l'IGUN, que j'ai été amenés à solliciter ou à côtoyer :

- André (un champion du rameur, 15km/heure - record à battre) et qui fait toujours du bruit avec ses machines en face de mon bureau,
- Virginie (une artiste du film "Il était une fois dans la salle blanche"),
- Manu (j'attends toujours le tableau depuis 2 ans),
- les secrétaires et les bibliothécaires (toujours sympathiques et très disponibles),
- les professeurs et les maîtres-assistants (il était agréable de partager les pauses café avec vous),
- tous les membres de l'Aneg et les étudiants - avec lesquels, j'ai partagé de nombreux moments agréables notamment lors des déjeuners à la cafet' (poulailler - "kokotek" et "kukuruku"), le camp de ski, le voyage au Mexique, etc.
- les assistants (les futurs docteurs) : Guillaume et Olivier (les deux Irokoniens; j'espère que vous survivrez jusqu'à la fin de votre thèse, malgré, une vie commune avec des bactéries dans votre bureau),

Cyril (l'homme le plus sportif de l'Institut, avec une moyenne de 1h30 par jour), Julien (un vrai Napoléon du Risk), Marc (l'adversaire au Risk et partenaire de tennis), Claire (rédactrice en chef d'Azimut), Mary-Alix («Liloo de n éléments»), Alexey (génie russe), Laurent (wanted by Sitel, pour l'attaque informatique), Charles (Don Juan du Maroc), Séverine (maman d'Arnaud), Urs (Anti-Atlasien), JD et Bastien (les deux Français), the new entries (Alexis, Benjamin, Haydon, Pascal et Stéphane).

Un grand merci à l'ensemble du groupe de jeunes "Viens et Vois" qui ont contribué à rendre mes années à Neuchâtel inoubliables. C'est toujours un grand plaisir d'être parmi vous : les réunions du samedi soir, les camps de ski (sauf dans la poudreuse bien sûr), les activités au bord du lac, les montages vidéo (allez un coup de montage ? pour Ivan et Ermano), les tennis (avec Stéphane). Merci à Yann, Salomé, Nicole, Daniel, Olivier, Yves, Joëlle, Fabienne, Natanaël, Sylvain, Christian, Patrice, Jean, Matteo, Jean-Joël, Roxane, Yvette, Sacha, Isabelle, Maurice, Fabien, Joël, Aline, etc.

Enfin, je ne peux oublier l'accueil chaleureux, la gentillesse, et le soutien moral de la famille Renevey: Ivan, Jeanne, les grands-mères, Claire ("sayangku", un petit tour en patin jusqu'à l'île St.Pierre et une baignade? avant neuf heure, bien sûr.), Jeanph (euh.. je sais que tu aimes bien avoir la dame de pique), Anne (une infirmière sans frontière) et son cool Raoul. Sans oublier, la famille Jaccard : Georges, Marian, Ivan, Carol et Fanny (une championne de ballet), et la famille Dössegger : Heinz, Nadine, Béa (ça avance l'indonésien?), Sandra et Isa.

Je souhaiterais terminer ces remerciements en citant mes proches. Ma mère et toute ma famille en Indonésie qui m'ont soutenu par leurs encouragements, leurs prières de tous les instants et tant d'autres choses. Bref, tout ce qui fait que sans eux je ne serais pas là où j'en suis actuellement.

- o o o -

Résumé

Modèles stochastiques de croissance surfacique : Application à la simulation des stromatolithes

Les stromatolithes sont un sujet important dans la recherche en science de l'univers, car ils ont été les premiers et les principaux acteurs de la formation des plates-formes carbonatées durant près de 85% de l'histoire de la Terre. L'une des manières d'étudier la formation des stromatolithes est la simulation numérique. L'objectif de ces travaux de recherches consiste à étudier la condition de stabilité de l'équation de diffusion non linéaire de KPZ et à développer un nouveau modèle de la croissance surfacique appliqué à la formation des stromatolithes. Le modèle déterministe fondé sur l'équation de KPZ a été proposé en 1996 par Grotzinger et Rothmann. Dans cette thèse, les conditions de stabilité de cette équation ont été étudiées, afin de déterminer la limite des paramètres de simulation. Le modèle stochastique DLA-CA, est la contribution majeure de cette thèse. Il possède deux types de croissance: la croissance externe guidée par le mouvement brownien de particules selon la méthode de l'agrégation par diffusion limitée (DLA) et la croissance interne utilisant la méthode des automates cellulaires (CA).



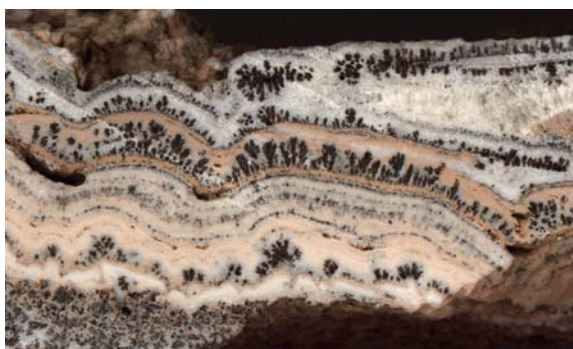
Le modèle de DLA-CA, fondé sur la méthode des automates cellulaires, peut être considéré comme un nouveau type de simulation, où la construction d'un phénomène complexe peut être effectuée à partir de règles locales simples (microscopiques) afin d'obtenir un comportement global (macroscopique). Cette approche de la simulation, fondée sur le comportement local d'un système, est différente de celle fondée sur le comportement global décrit en général par des équations mathématiques avec des paramètres *a priori*.

Mots Clés :

Automate cellulaire, DLA-CA, DLA, equation de diffusion non linéaire, KPZ, Stromatolithes, stochastique.

Stochastic model of the surface growth : Application to stromatolithes

Being the first and the principle component involved in carbonate platform development during 85% of the Earth history, stromatolites are of considerable importance for many areas of the Earth sciences. There are many methods employed for studying stromatolite formation. One of these methods involves the numerical simulation of stromatolite growth. The aim of this research is to study the stability of the KPZ equation and to develop a new model for studying stromatolite formation. A deterministic model based on the non linear diffusion equation of KPZ was proposed in 1996 by Grotzinger and Rothmann. This research attempts to identify the stable conditions of the KPZ equation by altering its limit parameters. This stability study is developed in order to determine the limit parameters of simulation. The stochastic model (DLA-CA) proposed in this thesis is characterized by two types of growth: the first is external and based on the Brownian movement of particles in agreement with the diffusion limited aggregation (DLA) methods; the second is internal and uses the method of cellular automata (CA).



The DLA-CA model, based on the cellular automata method, can be considered as a new type of simulation, in which the construction of complex phenomena can be achieved from simple local rules (microscopic) to infer a global behavior (macroscopic).

This approach based on the local behavior of the system is generally different from the approaches based on global behavior using mathematical equations.

Key words :

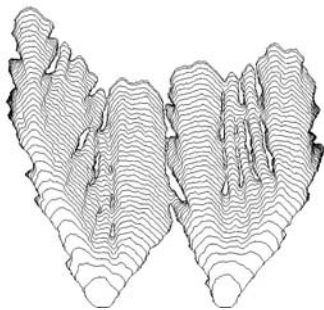
Cellular automata, DLA-CA, DLA, non linear diffusion equation, KPZ, Stromatolites, stochastic.

Table des matières

Introduction générale	iii
1 Stromatolithes	1
1.1 Importance des stromatolithes	1
1.2 Définition	2
1.3 Stromatolithes fossiles	2
1.4 Stromatolithes récents	3
2 Approche par une équation de diffusion, l'équation de KPZ	9
2.1 Introduction	10
2.2 Modèle discret de l'équation	15
2.2.1 Méthode de discrétisation semi-discrète	17
2.2.2 Méthode de discrétisation complète	17
2.3 Analyse de stabilité de l'équation discrète	21
2.3.1 Convergence	22
2.3.2 Consistance	22
2.3.3 Étude de la Stabilité	22
2.4 Simulation par l'équation de KPZ	30
2.5 Conclusion	33
3 Agrégation par diffusion limitée	35
3.1 Le modèle d'agrégation par diffusion limitée	36
3.1.1 Le facteur de « <i>Sticking probability</i> »	39
3.1.2 Probabilité de mouvement des particules	40
3.1.3 Longueur de déplacement	44
3.1.4 Généralisation du mouvement des particules	45
3.1.5 La quantité de particules	47
3.1.6 Relaxation	49
3.2 Mathématiques, DLA et nature	52
4 Automate Cellulaire	59
4.1 Définition	62
4.2 Automate cellulaire unidimensionnel	65
4.3 Matrice caractéristique des automates cellulaires	69
4.4 La croissance locale des stromatolithes	72

5	Modèle Stochastique DLA-CA	79
5.1	Croissance intrinsèque et extrinsèque	80
5.2	Paramètres du modèle	82
5.2.1	Distance d'attraction	82
5.2.2	Distance de stabilité	90
5.2.3	Masque de croissance	92
5.2.4	La variation des paramètres et la morphologie	95
5.2.5	Sédimentation	97
5.2.6	Relation entre les paramètres du modèle et ceux de la nature	102
5.3	Approche algébrique	103
5.4	Logiciel "DLA-CA Growth"	104
6	Conclusion générale	109
A	Stromatolithes fossiles et simulations I	i
B	Stromatolithes fossiles et simulations II	iii
C	Stromatolithes fossiles et simulations III	v
D	Nomenclature des résultats	vii
E	Exemple de fichier texte du en sortie de DLA-AC Growth	xv
F	Caractéristiques temporelles et géométriques	xix
G	Probabilités associées à un déplacement brownien	xxiii
H	Résultat de simulation par l'automate cellulaire	xxvii
	Table des figures	xxviii
	Bibliographie	xxxiii
	Index	xli

Introduction générale



*Computation
offers a new means of describing and investigating
scientific and mathematical systems.
Simulation by computer may be the only way
to predict how certain complicated systems evolve.*

*Stephen Wolfram,
Scientific America, 1984*

Depuis de nombreuses années, l'étude des phénomènes de croissance est un sujet qui intéresse plusieurs domaines de recherche des sciences physiques et chimiques, de la biologie, et de la géologie. Plusieurs processus naturels, tels que l'évolution de colonies de bactéries, la croissance de cristaux, l'érosion, la corrosion et la formation de dépôts électrolytiques peuvent être considérés comme des phénomènes de croissance. En étudiant ces phénomènes, il devrait être possible de déduire les facteurs, les conditions et les lois qui agissent pour produire des morphologies de croissance. Ces éléments sont nécessaires aux scientifiques afin de pouvoir « mieux comprendre la nature », y déceler les lois d'interaction et d'échange d'énergie qui s'y manifestent. La recherche a aussi un objectif de prédiction, au delà de l'interprétation.

Tous les phénomènes de croissance produisent une morphologie donnée, et celle-ci peut être considérée comme un enregistrement des conditions et des facteurs qui sont intervenus au moment de sa formation. En conséquence, l'étude sur la forme peut nous aider à comprendre les circonstances de l'événement morphologique passé. Malheureusement, l'étude sur la morphologie n'est pas toujours facile, car la connaissance *a priori* sur les phénomènes impliqués n'est souvent pas suffisante, et trop complexe du fait des multiples interactions causales.

La croissance des stromatolithes est un très bon exemple pour démontrer que l'étude de la croissance reste un domaine pluridisciplinaire : les géologues étudient la formation de la roche ou les processus sédimentaires, les biologistes examinent le rôle des microorganismes durant la formation de l'édifice, les chimistes analysent les éléments qui se trouvent piégés dans les stromatolithes, enfin les mathématiciens/informaticiens mettent en place les modèles et les simulations de croissance. Ce dernier point a pour objectif de pouvoir dresser des nomenclatures selon des paramètres qui ne sont pas nécessairement naturels, mais qui se définissent plutôt comme des paramètres mathématiques. Ces paramètres s'imposent comme des aides à l'interprétation des informations contenues dans la morphologie des stromatolithes.

La modélisation et la simulation sont des domaines de recherche faisant appel aux mathématiques discrètes et au calcul numérique. Ce type d'approche a été développée dès le 17^e siècle par Newton, Maclaurin, Euler, Laplace et bien d'autres. La découverte de la machine à calcul permit un progrès considérable dans le domaine de la simulation et du calcul numérique. La naissance de la simulation numérique sur ordinateur remonte aux années 1950 où les premiers ordinateurs purent être utilisés pour l'usage civil. En particulier, à Los Alamos, la machine MANIAC (*Mathematical Analyzer, Numerical Integrator and Computer*) a été utilisée pour la première fois en 1952 pour le calcul d'approximation d'équations aux dérivées partielles non linéaires.

Un *modèle* est une représentation simplifiée d'un processus ou d'un système réel. Quant à la *modélisation*, elle consiste en la mise en équations d'un modèle permettant d'en prévoir les évolutions. D'une manière générale, la *simulation* est l'expérimentation sur un modèle ou une technique qui permet de produire de manière explicite un processus quelconque. C'est une approche scientifique pour réaliser une reproduction artificielle (modèle) à partir du phénomène que l'on veut étudier. La simulation numérique est l'implémentation d'un modèle sous la forme de lignes de programmes, sa manipulation sur ordinateur, ainsi que l'analyse des résultats produits.

Les simulations peuvent être classées en deux grandes catégories [23] :

La simulation prédictive repose sur l'utilisation de l'ordinateur pour étudier les phénomènes ou les processus de manière détaillée, dont les déterminants sont connus et les lois sont établies ou considérées comme telles. L'une des plus connues des simulations prédictives est celle de la mécanique des fluides comme la simulation d'une aile d'avion en vol. Les

lois agissant dans ce phénomène sont bien connues, ainsi que leur expression analytique (équations de Navier-Stokes) ; pourtant nous restons incapable de prévoir de manière détaillée l'évolution du phénomène. Grâce aux méthodes de calcul numérique, comme les éléments finis, et la puissance de calcul des ordinateurs, nous sommes enfin capables de surmonter partiellement le problème.

La simulation explicative s'attache aux phénomènes où les lois qui les régissent sont au départ inconnues, et où les algorithmes introduits dans l'ordinateur simulant la réalité sont, dans certaines conditions, tenus pour des explications des phénomènes concernés. C'est-à-dire que l'on essaie de reproduire le fonctionnement d'un système dont on ne connaît que la nature des « entrées » et des « sorties ». Un exemple de simulation explicative est le modèle cognitif, où l'on essaie de concevoir un système intelligent¹ pour accomplir des tâches complexes, telle que la reconnaissance de visages.

Objectifs

Les objectifs de ce travail de thèse sont :

- *dans un premier temps*, de trouver une nouvelle approche ou un nouveau modèle capable de décrire les phénomènes de croissance surfacique de manière générale, et celle des stromatolithes en particulier ;
- *dans un second temps*, de proposer des algorithmes efficaces traduisant ce modèle et de les implémenter sous forme d'un logiciel.

Plan du mémoire

L'étude sur les modèles de croissance est souvent très spécifique au domaine de recherche. Dans le domaine de la géologie, et surtout en paléontologie, la formation des stromatolithes reste un sujet d'actualité et de débat, surtout en ce qui concerne les anciens stromatolithes. En effet, ils contiennent selon certains chercheurs, les clés du passé sur les origine de la vie. Plusieurs approches ont été envisagées, dont la simulation de leur croissance. Ce mémoire met en évidence les modèles de croissance connus, propose des améliorations à ces modèles et

¹C'est-à-dire doté de certaines propriétés ou caractéristiques plus ou moins comparables à celles du cerveau humain.

enfin présente un *nouveau modèle* de croissance stochastique « *DLA-CA* », nom venant des mots *Diffusion Limited Agregation*² et *Cellular Automata*³. Ce modèle est capable de produire une grande panoplie de morphologies de croissance, depuis la morphologie du type dendrite ou digité, jusqu'à des morphologies plus compactes.

Pour présenter ces résultats de deux ans de travail de recherche au sein de l'Institut de Géologie de l'Université de Neuchâtel, ce mémoire est développé de la manière suivante :

Chapitre un - Ce chapitre présente brièvement la définition, la formation, et la morphologie des stromatolithes. Ceux-ci sont le sujet d'étude de cette thèse, en particulier, la genèse de leurs morphologies. Les stromatolites sont à la fois les dépositaires des premières traces de vie sur Terre et les premières manifestations de cette vie. Ils sont susceptibles de nous renseigner sur l'histoire de ces organismes de la biosphère les plus abondants et les mieux adaptés à leur milieu, les bactéries. Ils sont construits de carbonate de calcium (CaCO_3) par l'action des microorganismes et se sont agglomérés en formations calcaires. Ces formations stromatolitiques ont constitué un volume impressionnant de calcaire à certaines époques du Précambrien et, en ce sens, ont constitué un réducteur important de CO_2 (gaz carbonique) en précipitant celui-ci dans le CaCO_3 , modifiant ainsi l'atmosphère en la déchargeant progressivement de ce gaz.

Chapitre deux - L'équation différentielle non-linéaire de KPZ (Kardar Parisi et Zhang), équation de diffusion, qui peut être utilisée comme un modèle de croissance de surface est discutée. Pour certains phénomènes de croissance, cette équation est capable de décrire leurs comportements au cours du temps. La discrétisation de cette équation nous oblige à faire une étude sur les erreurs approximatives qui influencent la stabilité et la consistance du modèle au cours de l'évolution. Selon les schémas de discrétisation, un schéma est plus fiable que l'autre et donne des conditions de stabilité différente. Cette condition de la stabilité est une question primordiale dans l'interprétation des résultats de la simulation. Les erreurs induites dans le calcul numérique sont en général dissociées en deux catégories : l'*erreur numérique* et l'*erreur de méthode*. Les erreurs de méthode sont liées à la technique de discrétisation et décroissent avec la précision

²En français, agrégation par diffusion limitée

³En français, automate cellulaire.

du schéma utilisé. Les erreurs numériques croissent avec le nombre de calculs à effectuer.

Chapitre trois - Il présente le modèle de l'agrégation par diffusion limitée qui est un modèle de croissance des agrégats guidée par le mouvement brownien. Ce modèle a été proposé pour la première fois par Witten et Sander en 1982, et est souvent utilisé dans différents domaines tel que la physique, la biologie et la chimie pour la simulation de divers processus de croissance ou réactifs. Il a été introduit pour la simulation de croissance des stromatolithes par Verrecchia en 1996 [103]. Une partie de cette thèse contribue à la recherche de nouvelles extensions comme *la probabilité de mouvement des particules, la longueur de déplacement des particules, et la capacité de relaxation des particules.*

Le modèle de DLA possède des caractéristiques intéressantes et souvent très implicites : le mouvement stochastique dans ce modèle est d'un certain point de vue, un objet *combinatoire*. Le système de branchement de la morphologie produite est similaire aux systèmes générateurs de végétaux ou de pattern sur animaux. Enfin ses liens avec les automates cellulaires, constituent assurément « une nouvelle forme de science » selon l'expression de S.Wolfram.

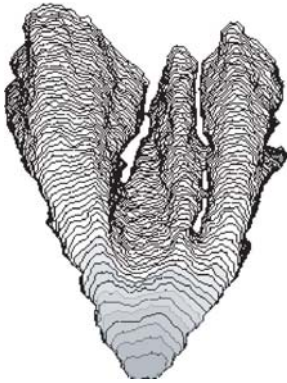
Chapitre quatre - Il est dédié aux automates cellulaires, définis par un ensemble de règles simples qui est appliqué à l'espace et à des états discrets, en temps discret. Ces règles simples sont parfois capables de reproduire les fonctionnements de systèmes complexes. Leur comportement est très imprédictible, et montre la richesse de ses propriétés sous-jacentes. Stephen Wolfram, théoricien des automates cellulaires, pense que toute la richesse du monde physique émerge de règles sous-jacentes très simples. De plus il a dit de manière très controversée qu'« *il y aurait peut-être un programme très simple, unique, qui, s'il était exécuté pendant suffisamment longtemps, reproduirait tous les détails de ce qui est survenu dans notre Univers. Ce programme constituerait donc la théorie physique ultime* ». Le modèle de l'automate cellulaire est également souvent utilisé dans la simulation de phénomènes naturels, dont les plus connus sont la reproduction des motifs qui se trouvent sur les coquilles, ou les phénomènes de turbulence. L'utilisation des automates cellulaires en tant que modèle de croissance des stromatolithes est une nouvelle approche et permet surtout de décrire la formation de

microstructures comme la morphologie en chou-fleur de certains édifices. L'automate utilisé est constitué de quatre états : vide, vivant, repos, et mort, évoluant selon des règles simples, soit déterministes, soit stochastiques.

Chapitre cinq - Il constitue la contribution majeure dans cette thèse, et est consacré à la réalisation d'un nouveau modèle de croissance stochastique (DLA-AC) fondé sur l'agrégation par diffusion limitée et les automates cellulaires. Ce modèle possède deux types d'environnement de croissance : *la croissance externe* guidée par le mouvement stochastique de particules, et *la croissance interne* agissant selon les lois de division cellulaire. Ces deux types de croissance se résument à l'expression de quatre paramètres : la distance d'attraction, la distance de stabilité, la configuration de la règle de transition, et le nombre de cellules. Les deux premiers paramètres induisent la croissance externe et les deux autres la croissance interne. Hormis ces quatre paramètres, il existe également la possibilité d'introduire un processus de sédimentation, une phase de perturbation discontinue au moment de la croissance. Cette perturbation met en évidence des événements réels de la formation de stromatolithes.

Après la mise en place du concept de modèle de croissance stochastique, l'étape suivante repose sur la réalisation d'un logiciel de simulation de croissance surfacique : ***DLA-AC growth*** sur plateforme Windows 32 bits. Ce logiciel est écrit en environnement de programmation visuelle orienté objet (C++). Dans le *DLA-AC growth*, nous retrouvons les quatre paramètres du modèle de DLA-AC et l'extension sédimentation. L'image résultante peut être enregistrée sous le format bitmap (.bmp), ainsi que tous les paramètres utilisés et les caractéristiques géométriques de la morphologie générée sous format texte (.txt).

Stromatolithes



*Entre le monde vivant et le monde inanimé,
il y a une différence
non pas de nature, mais de complexité.*

François Jacob,

La logique du vivant, 1970, Fayard, Paris

1.1 Importance des stromatolithes

Les structures sédimentaires carbonatées laminées, connues sous le nom de stromatolithes sont considérées comme les plus anciennes traces macroscopiques de vie sur Terre. Commencée déjà il y a 3.5 Ma [112], peu après l'apparition microscopique de la vie, la précipitation *in situ* de carbonate de calcium à l'intérieur de colonies microbiennes a permis la fossilisation de l'empilement successif de tapis microbiens, témoignant ainsi de la première biosphère sur Terre. Les stromatolithes ont été les premiers et les principaux acteurs de la formation des plates-formes carbonatées durant près de 85% de l'histoire de la Terre [36], avant même que toute vie multicellulaire organisée n'apparaisse. Par le développement généralisé de la photosynthèse oxygénique, les cyanobactéries, principaux responsables de la formation des stromatolithes, sont sans doute à l'origine de l'oxygène gazeux sur notre planète [42, 48]. Du fait de leur nature mixte, minérale, et organique, les stromatolithes représentent un excellent sujet d'étude pour des approches pluridisciplinaires regroupées sous la bannière des biogéosciences.

1.2 Définition

Le terme stromatolithe a été introduit par Kalkowsky en 1908 sur des formes continentales du Trias allemand. Il décrit les stromatolithes comme des structures calcaires lithifiées, laminées, produites par des colonies microbiennes benthiques. Cette définition, génétique et interprétative, a été étoffée en 1976 par Awramik et Margulis [33] qui définissent les stromatolithes comme des structures organo-sédimentaires produites par piégeage de sédiment et/ou précipitation de carbonate par des microorganismes, principalement des cyanobactéries. Semikhatov et al. (1979) [33] proposent une définition plus descriptive des stromatolithes comme étant une structure laminée résultant d'une accrétion à partir d'un point ou d'une surface limitée. Cette définition ne fait pas intervenir la genèse de formation mais plutôt les caractéristiques morphologiques et texturales des stromatolithes. Actuellement, les deux définitions sont utilisées dans la littérature suivant que l'auteur veuille souligner ou non l'origine biotique des constructions stromatolithiques.

1.3 Stromatolithes fossiles



FIG. 1.1 – Stromatolithes fossiles.

Les stromatolithes précambriens (Fig. 1.1) se sont diversifiés dans les différentes niches écologiques qu'offraient les mers primitives (milieux intertidaux, subtidaux, lagons et peut-être même des barrières) [40, 18]. Ceci se traduit par la très grande variété morphologique trouvée. Ces morphologies peuvent être regroupées en formes branchues, en dôme, ou isopaques.

Parmi le très grand nombre de stromatolithes fossiles trouvés, seul environ 10% ont préservé sous forme de fossiles des microorganismes à l'origine de leur formation. Ce manque de traces biologiques pousse les scientifiques à trouver d'autres critères pour prouver l'origine biologique des stromatolithes fossiles (biomarqueurs, études morphométriques, modélisation). Dans cette optique, l'étude des formes récentes fournit des indications précieuses sur leur mode de formation.

1.4 Stromatolithes récents



FIG. 1.2 – Stromatolithes actuels de Shark Bay (Australie).

Les stromatolithes ne dominent plus les écosystèmes carbonatés depuis près de 600 Ma. Ce déclin reste encore en partie inexplicé, bien qu'une des causes doit sans doute être cherchée dans la compétition écologique engendrée par les organismes pluricellulaires se développant au début du Cambrien [85]. Bien que moins présents, les stromatolithes actuels colonisent une grande variété d'environnements allant de l'eau douce [29] aux domaines hypersalins [56], en passant par les sources d'eau chaude [113], et certains milieux terrestres [103]. Les seuls exemples actuels de stromatolithes se développant en milieu de mer ouverte se trouvent aux Bahamas [83].

Les stromatolithes actuels présentant une grande variété de tailles, de morphologies, et de microstructures. Selon la taille de l'édifice, les stromatolithes récents peuvent être placés en deux grands groupes :

- Les *stromatolithes de grandes tailles* - jusqu'à un mètre de hauteur - se trouvent en général dans la zone d'estran (zone intertidale, c'est-à-dire la zone de battement des marées, et dans la zone subtidale). Les plus connus sont les stromatolithes bahamiens et ceux de Shark Bay en Australie (Fig. 1.2). Ces stromatolithes sont constitués de sédiments grossiers (ooides et bioclastes), piégés par les filaments cyanobactériens associés à de la précipitation de micrite sous l'action de bactéries sulfato-réductrices.
- Les *stromatolithes fins de plus petites tailles* peuvent se trouver en domaines continentaux lacustres, palustres, fluviaux et terrestres (sols), ainsi qu'en domaines paraliques (ex. lacs hypersalins, sabkha, etc). Ces formes présentent généralement une dominance

de matériaux fins (micrite) qui provient de la précipitation *in situ* de carbonate résultant des processus de photosynthèse (milieux continentaux) et/ou de sulfato-réduction (milieux paraliques).

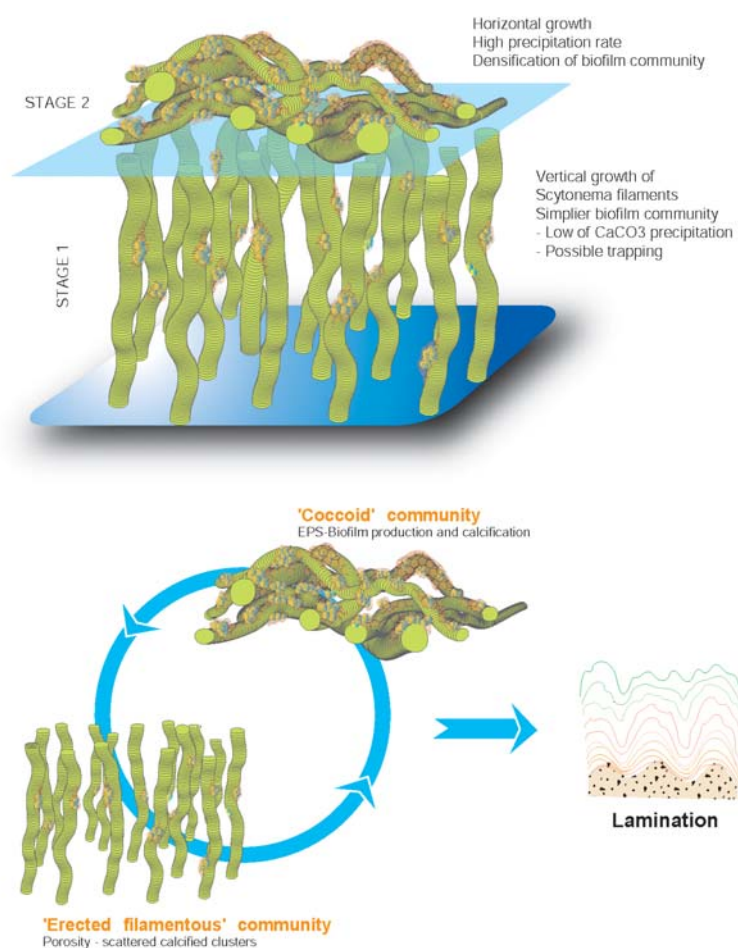
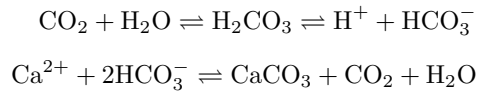


FIG. 1.3 – Cycle de croissance dans l'orientation de filaments cyanobactériens (*Scytonema* sp.) conduisant à la formation de stromatolithes. Cette formation est principalement due à la précipitation de micrite à l'intérieur du tapis microbien. Modified from Dupraz et al. (*in press*)

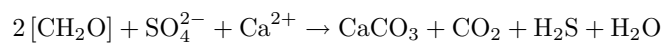
La précipitation de micrite, liée à la photosynthèse oxygénique des cyanobactéries, fait intervenir la réduction du dioxyde de carbone contenu dans l'eau, suivant le cycle :

- Cyanobactéries → Photosynthèse → Réduction de CO₂ → Précipitation de CaCO₃



Dans le cas de la précipitation de micrite liée aux bactéries sulfato-réductrices (SRB), la réduction des sulfates est associée à l'oxydation de la matière organique produite par les cyanobactéries durant la photosynthèse. Ce processus entraîne une alcalinisation du milieu et peut mener à la précipitation de carbonate [107].

- Cyanobactéries → Photosynthèse → Matière organique → Sulfato-réducteurs
→ Précipitation de CaCO₃



Dans l'un comme l'autre processus de précipitation, les cyanobactéries [75] jouent un rôle central pour expliquer la formation des stromatolithes.

Exemple de formation de stromatolithes récents.

La compréhension du mode de formation des stromatolithes passe par l'analyse des textures de lamination et des processus d'accrétion. L'étude des stromatolithes actuels permet de décrire la formation de lamines ainsi que des possibles processus d'accrétion qui peuvent être approchés par des modèles numériques.

Voici les principales étapes de formation des stromatolithes par la précipitation et le piégeage de particules sédimentaires grossières (figure 1.4) [83] :

- ***Stade pionnier*** : piégeage et « liaison » des ooides par les cyanobactéries qui sont considérées comme les micro-organismes pionniers. Les cyanobactéries utilisent le soleil comme source d'énergie et le CO₂ pour la biosynthèse. Elles produisent ainsi de la matière organique qui peut servir à alimenter des bactéries ayant d'autres métabolismes (hétérotrophes). Le piégeage des particules sédimentaires entre les filaments est possible grâce à la présence d'exopolymères (EPS) produits par les cyanobactéries.

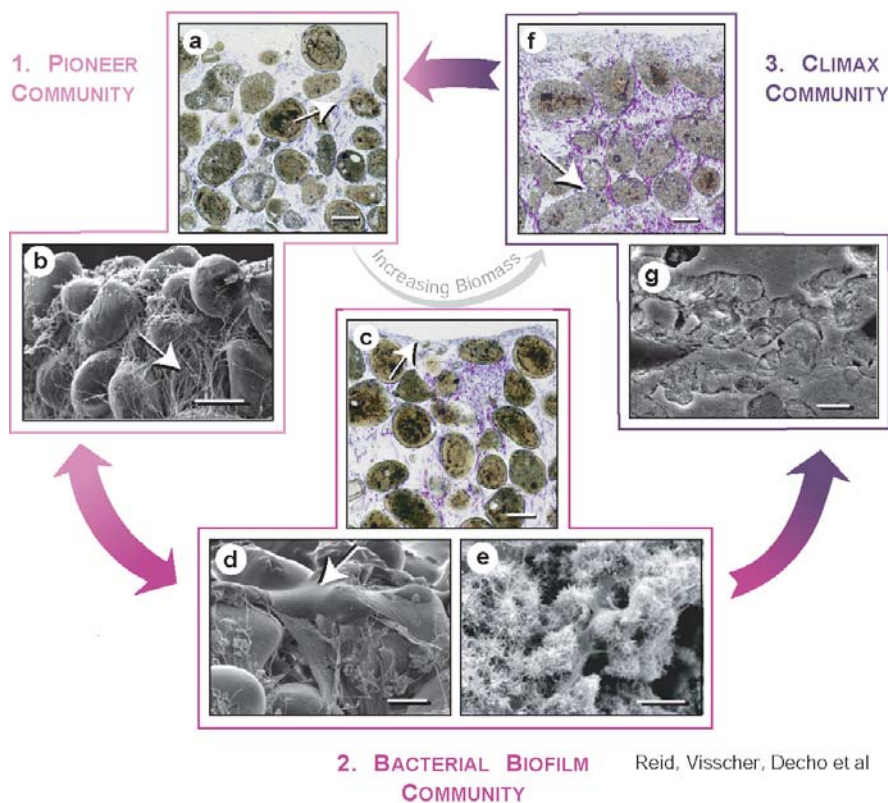


FIG. 1.4 – Les principales étapes de formation des stromatolithes par la précipitation de micrite et le piégeage de particules : (1) Stade pionnier, (2) Stade biofilm, et (3) Stade bactéries cocciformes [83].

- Stade biofilm** : développement d'un biofilm riche en EPS à la surface du stromatolithe. Le piégeage de particules sédimentaires est arrêté, soit par un « by-pass » sédimentaire, soit par une modification de la nature collante de l'EPS. Dans un premier temps, ce biofilm d'exopolymères va jouer le rôle d'éponge à Ca^{2+} à cause de sa composition biochimique (riche en groupes carboxyles liant les cations). Par la suite, les bactéries sulfato-réductrices vont décomposer le biofilm, libérant le calcium et favoriser la formation de carbonate par l'alcalinisation du milieu. Ce processus conduit à la lithification du biofilm et à la formation d'une lamine.
- Stade bactéries cocciformes** : parfois, le stade biofilm est accompagné par le développement

de cyanobactéries cocciformes (*Solentia sp.*) qui vont micritiser et fusionner les particules sédimentaires en dessous du biofilm. La conséquence est la formation d'une lamine plus épaisse et plus résistante.

La lamination est ainsi le résultat d'une succession dans le temps de différentes communautés microbiennes à la surface du stromatolithe et des apports sédimentaires. La lamination est donc le résultat d'une discontinuité de processus durant sa formation [52]. Une croissance continue du tapis microbien ne donne pas de lamination. Il est souvent difficile de trouver une cyclicité ou une périodicité dans les laminations des stromatolithes. Pour certains stromatolithes actuels, on peut trouver deux fréquences de laminations : (1) la lamination longue qui pourrait résulter de changements saisonniers et (2) la lamination rapide ou journalière, qui pourrait correspondre aux cycles solaires ou lunaires.

Approche par une équation de diffusion, l'équation de KPZ



Le savoir n'est pas une vulgaire matière première. Il ne vient jamais à épuisement. Au contraire, il s'accroît toujours grâce à la diffusion des connaissances.

Daniel Boorstin

La méthode déterministe de simulation de la croissance des stromatolithes en utilisant l'équation de différentielle de KPZ (Kardar-Parisi-Zhang) [47] a été introduite pour la première fois par Grotzinger et Rothman [37] en 1996, puis utilisée par Batchelor et al. [8] en 2000. Selon Grotzinger et Rothman, la formation des stromatolithes peut être le résultat d'un processus abiotique car leur croissance peut être décrite par l'équation de KPZ. Celle-ci est une simple équation de diffusion, qui, en ajoutant une croissance normale à la surface, intègre un terme non-linéaire. L'équation de KPZ est également utilisée comme un modèle de propagation de combustion lente des papiers [66, 59] ainsi que dans d'autres phénomènes de diffusion observés en physique.

Pour simuler un processus par l'équation différentielle, nous devons faire appel les techniques de l'analyse numérique, qui sont des méthodes approximations sur le problème continue. Ces techniques engendrent souvent des erreurs, notamment les erreurs de méthodes qui peuvent s'amplifier et perturber les systèmes. Dans ce chapitre, nous étudions la stabilité de l'équation de KPZ afin d'établir des conditions de stabilité selon les schémas de discrétisation proposés.

2.1 Introduction

L'origine de l'équation de KPZ remonte aux anciens modèles de type « *Ballistic Deposition* (BD) », « *Random Reposition* (RD) », RD avec relaxation ainsi qu'à l'équation d'Edward - Wilkinson (ED). Tous ces modèles montrent une forte ressemblance lorsque l'on se place du point de vue du générateur de croissance. Ils utilisent tous un générateur aléatoire sous contrainte. Les contraintes de chacun de ces modèles sont illustrées ci-après.

Le modèle « *Ballistic Deposition* » a été introduit au départ comme un modèle d'agrégation de colloïdes. Plusieurs études [96, 108, 109] ont été effectuées sur ce modèle, surtout concernant les porosités produites. La croissance d'une surface générée par le modèle de type « *Ballistic Deposition* » (figure 2.1) peut être décrite sous la formulation mathématique suivante :

$$h(i, t + 1) = \max \{h(i - 1, t), h(i, t) + 1, h(i + 1, t)\} \quad (2.1)$$

où $h(i, t)$ est la hauteur d'un point de la surface à l'instant t et à la position i . Les résultats de simulations [6, 63] sur une interface 2D donnent les coefficients α et β , respectivement l'exposant de rugosité et de croissance [7] :

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.47 \pm 0.02 \\ \beta &= 0.33 \pm 0.006 \end{aligned}$$

Suivant ce modèle, on peut estimer que l'évolution de la hauteur moyenne de la surface $\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h(i, t)$ est proportionnelle au temps $\bar{h}(t) \sim t$.

A partir du modèle « *Ballistic Deposition* », et en considérant que la configuration des colonnes voisines n'influence pas la croissance d'une colonne, on obtient un modèle de type « *Random Deposition* » (figure 2.2). La formulation mathématique d'évolution de ce modèle peut être écrite sous la forme :

$$h(i, t + 1) = h(i, t) + 1 \quad (2.2)$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.50 \\ \beta &= \infty \end{aligned}$$

La différence majeure entre ces deux modèles réside dans le fait que la surface produite par

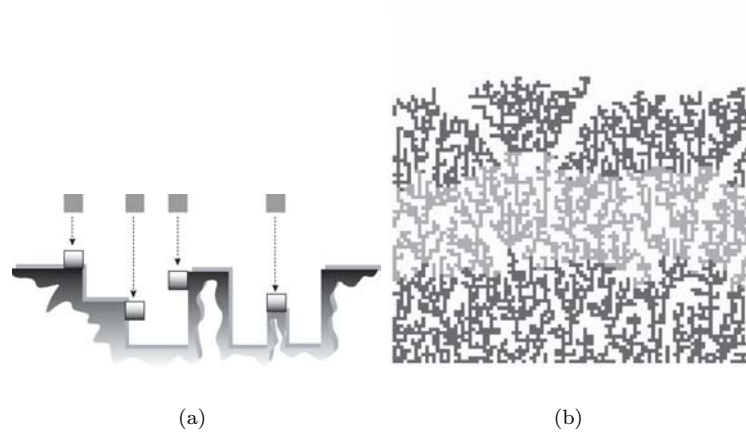


FIG. 2.1 – Modèle du type « *Ballistic Deposition* » avec une probabilité de collage sur le voisinage d'ordre 1. Ici, deux possibilités de collage de particules sont montrées. a) Principe. b) Résultat.

la simulation du modèle de type « *Random Deposition* » est non corrélée et chaque colonne croît de façon indépendante.

Le troisième modèle est de type « *Random Deposition avec relaxation* » (figure 2.3). A partir du modèle « *Random Deposition* » décrit ci-dessus, on ajoute une composante de relaxation. Mais cette contrainte de relaxation n'est pas seulement limitée au voisinage d'ordre 1, c'est-à-dire que la particule diffuse tout le long de la surface, jusqu'à ce qu'elle trouve une position dite minimale ou d'énergie minimale. Comme dans les deux modèles précédents, la formulation mathématique est la suivante :

$$\xi(C_i) = 1 \begin{cases} h(i+p, t+1) = h(i+p, t) + 1; \\ \text{si de } h(i, t) \text{ à } h(i+p, t) \text{ le chemin est descendant ou plat;} \\ -i < p < L-i \end{cases} \quad (2.3)$$

p représentant la distance sur l'abscisse entre l'endroit où la particule arrive et celle où elle diffuse. La simulation [26] donne les exposants d'échelle α et β suivants :

$$\alpha = 0.48 \pm 0.02$$

$$\beta = 0.24 \pm 0.01$$

Comme dans le modèle de type « *Ballistic Deposition* », il existe ici une forte corrélation

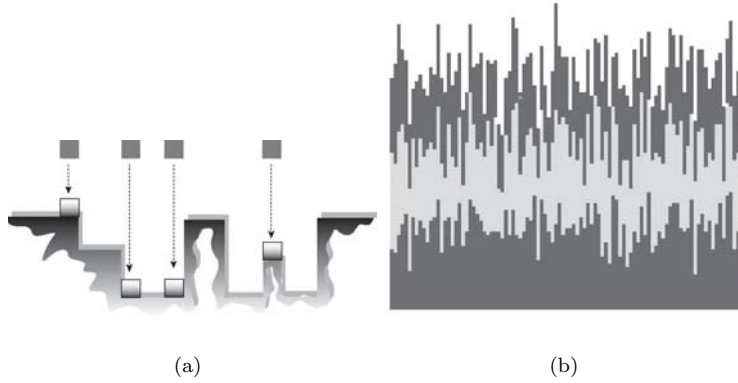


FIG. 2.2 – Le dépôt des particules se fait directement sur la position i , quelque soit la configuration de voisinage. a) Principe. b) Résultat.

entre la hauteur de la surface à un endroit donné et les colonnes voisines. En revanche, dans ce modèle, toute lacune (porosité ou case non occupée) dans les couches de la surface générée disparaît. Les surfaces engendrées par ce modèle ont des caractéristiques particulières : elles sont continues et dérivables, la limite à gauche étant presque identique à celle de droite. Par conséquent, on peut alors imaginer que la croissance d'une surface générée par ce type de modèle puisse s'écrire dans un espace discret au moyen d'une équation différentielle. En premier lieu, il faut décrire l'équation de croissance de la surface :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = G(h, x, t) + \eta(x, t) \quad (2.4)$$

où $h(x, t)$ est la hauteur de la surface, $G(h, x, t)$, une fonction qui dépend de trois paramètres (la hauteur, la position, le temps), et $\eta(x, t)$, le bruit.

En 1982, Edward et Wilkinson ont décrit la fluctuation d'une surface équilibre par l'équation suivante :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \eta(x, t) \quad (2.5)$$

où v est la tension de surface et $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ l'opérateur (ici un laplacien) conduisant au lissage de la surface. Force est de constater que cette équation n'est qu'une simple équation de diffusion avec terme source.

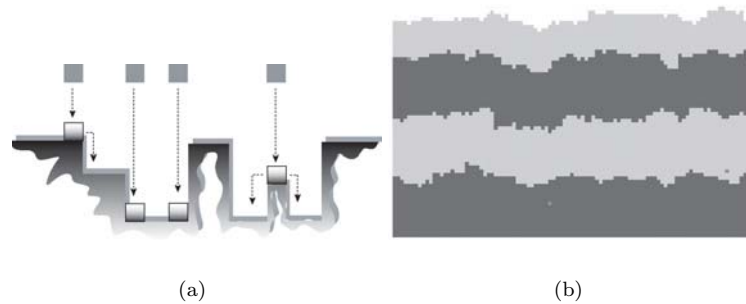


FIG. 2.3 – Le modèle de type « *Random Deposition* » avec relaxation de particules. L'image montre les quatre positions possibles d'une particule par rapport à la surface. a) Principe. b) Résultat.

L'équation d'Edward et Wilkinson est considérée comme étant le premier modèle mathématique (formulé par une équation continue) de croissance de surface par dépôt de particules. Malgré les excellents résultats de simulation obtenus par ce modèle, on peut néanmoins lui reprocher son éloignement des processus naturels qui restent pour l'essentiel de type non linéaire. L'apport d'un facteur non linéaire à cette équation a été proposé quelques années plus tard par Kardar, Parisi et Zhang (1986), et a conduit à la formulation de l'« équation de KPZ » suivant les initiales de leurs noms.

La construction du modèle de type KPZ est fondée sur celui du type « *Ballistic Deposition* » et sur l'équation d'Edward et Wilkinson. Quelle est donc la différence majeure entre le modèle de type « *Ballistic Deposition* » et celui du « *Random Deposition* » avec relaxation ? Dans le modèle de type « *Random Deposition* » avec relaxation, les particules arrivent d'abord sur la surface puis diffusent par la suite. Dans le modèle « *Ballistic Deposition* », les particules se collent directement dès le premier contact avec la surface.

Pour calculer la croissance latérale d'une surface, on doit tenir compte de quelques paramètres supplémentaires (figure 2.4), en particulier la croissance selon la normale locale à la surface produite par ∂h sur l'axe h :

$$\frac{L}{\lambda \delta t} = \frac{\partial h}{\partial x} \quad (2.6)$$

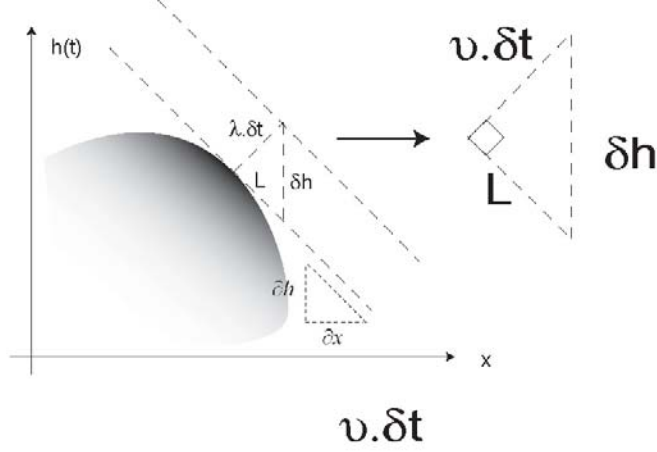


FIG. 2.4 – Calcul du terme non-linéaire de l'équation de KPZ, la croissance à l'axe de la normale locale $\lambda\delta t$.

$$L = \lambda\delta t \frac{\partial h}{\partial x} \quad (2.7)$$

D'après le théorème de Pythagore :

$$\delta h^2 = (\lambda\delta t)^2 + L^2 \quad (2.8)$$

$$\delta h = \left\{ \left[(\lambda\delta t)^2 + \left(\lambda\delta t \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} = \lambda\delta t \{1 + (\nabla h)^2\}^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

Si $|\nabla h| \ll 1$, on peut alors proposer le développement limité suivant :

$$\frac{\delta h}{\delta t} = \lambda + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \dots \quad (2.10)$$

C'est l'expression $(\nabla h)^2$ de la croissance latérale qui constitue le terme non-linéaire de l'équation de KPZ. En effet, en ajoutant ce terme non-linéaire à l'équation d'Edward et Wilkinson, on retrouve aisément l'équation de Kardar - Parisi - Zhang [47] sous la forme :

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \eta(x,t) \quad (2.11)$$

avec $h(x, t)$, hauteur de la surface partielle à la position x et au temps t , v , paramètre de tension de surface (facteur de diffusion), λ paramètre de croissance latérale et $\eta(x, t)$ le facteur bruit. L'équation 2.11 peut aussi s'exprimer comme suit :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \left(\lambda + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h(x, t)}{\partial x} \right)^2 \right) + \eta(x, t) \quad (2.12)$$

2.2 Modèle discret de l'équation

Dans cette partie, nous présentons brièvement la méthode des différences finies [12, 87, 81, 39]. Il s'agit d'une méthode simple et très efficace qui permet de résoudre des problèmes de calcul numérique. Ensuite, nous allons résoudre l'équation de KPZ en utilisant la méthode des différences finies. Enfin, nous établirons les conditions de stabilité en fonction des paramètres : la tension de surface, le coefficient de la croissance latérale, la hauteur initiale et ses pas de discrétisation.

La base de la méthode des différences finies repose sur la formule de Taylor. Cette formule permet d'analyser localement le comportement d'une fonction près du point (x_0) , en connaissant les valeurs des dérivées successives en ce point.

Théorème 1 (Formule de Taylor) Soit $n \in \mathbb{N}$, on suppose que la fonction f est $n + 1$ fois dérivable sur $I = [a, b]$. Soit $x_0 \in I$, h réel tel que $x_0 + h \in I$, alors il existe un nombre $\theta = \theta(h, n) \in]0, 1[$ tel que

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \dots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(x_0 + \theta h)$$

La formule de Taylor peut aussi s'écrire sous la forme :

$$f(x_0 + h) = \sum_{k=0}^n \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x_0) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(x_0 + \theta h) \quad (2.13)$$

En développant la formule de Taylor, nous pouvons écrire la forme discrète de la dérivée première et seconde sur un point x_0 . La dérivée première peut être écrite sous trois formes

en fonction de ses deux voisins :

forme	expression
rétrograde	$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + \varepsilon_1$
centrée	$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \varepsilon_2$
progressive	$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \varepsilon_3$

(2.14)

et la dérivée seconde :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + \varepsilon_4 \quad (2.15)$$

où ε_i est l'erreur d'approximation (erreur de troncature de la série de Taylor).

Des nombreux ouvrages [87, 81] traitent des différents schémas ou techniques de discrétisation d'une équation différentielle parabolique, elliptique et hyperbolique. A partir de ces travaux, nous essaierons d'étudier le comportement de l'équation de KPZ, afin de pouvoir l'utiliser comme modèle déterministe de simulation de la croissance des stromatolithes.

La discrétisation des variables spatiales et temporelles de l'équation de KPZ peut être opérée suivant une combinaison de différentes méthodes de discrétisation. A partir de ses expressions discrètes, les conditions de stabilité peuvent être établies et étudiées.

L'étude sur les conditions de stabilité sera présentée dans le sous chapitre 2.3. Mais avant d'explorer les conditions de stabilité, nous devons tout d'abord établir les expressions discrètes de l'équation de KPZ selon les différents schémas.

Rappelons que l'équation de KPZ est la suivante :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \quad (2.16)$$

h, η : fonctions de x et t .

2.2.1 Méthode de discrétisation semi-discrète

La méthode de discrétisation semi-discrète consiste à discrétiser les dérivées spatiales et à conserver les dérivées temporelles sous la forme originale (analytique).

A partir de l'équation 2.16, nous allons décrire les discrétisations semi-discrètes suivant les schémas progressif, centré et rétrograde présentés dans le tableau 2.14. Commençons tout d'abord par le *schéma progressif* pour l'approximation de la dérivée première spatiale de l'équation 2.16 ; nous obtenons :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \approx v \frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_x^t}{\Delta x} \right)^2 \quad (2.17)$$

Si nous utilisons le *schéma centré*, elle devient :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \approx v \frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \quad (2.18)$$

Enfin, en appliquant le *schéma rétrograde*, nous obtenons :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} \approx v \frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_x^t - h_{x-\Delta x}^t}{\Delta x} \right)^2 \quad (2.19)$$

Ces schémas de discrétisation utilisent le voisinage d'ordre 1 dans le calcul d'approximation de la dérivée. Certains schémas utilisent le voisinage d'ordre 2, 3, etc. Plus l'ordre est grand, plus le schéma est précis.

Sous la forme d'une équation semi-discrète, la stabilité de l'équation de KPZ peut être facilement calculée en utilisant la méthode matricielle que nous allons voir dans le sous-chapitre portant sur la stabilité.

2.2.2 Méthode de discrétisation complète

Après avoir vu la méthode de discrétisation semi-discrète, nous allons introduire la méthode de discrétisation complète. Il s'agit de discrétiser toutes les dérivées, spatiale et temporelle.

Il existe un grand nombre de schémas de discrétisation donnés dans les ouvrages sur le calcul numérique [87, 81], tels que : le schéma progressif, saute-mouton, de Crank-Nicholson, de Lax-Wendroff, etc. Ces méthodes sont souvent utilisées pour étudier les équations de diffusion et de propagation, linéaires ou non-linéaires. Malheureusement, jusqu'à maintenant, il n'existe aucun ouvrage qui traite de manière détaillée la discrétisation de l'équation de KPZ et de ses conditions de stabilité.

Dans cette partie, trois schémas seront utilisés pour la discrétisation de l'équation de KPZ : le schéma progressif, le schéma centré et le schéma de Crank-Nicholson.

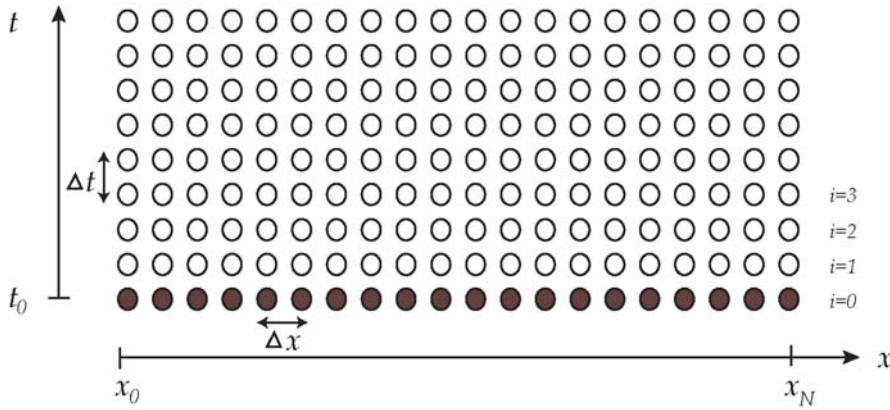


FIG. 2.5 – Maillage de points pour la méthode des différences finies dans un système de diffusion. Les cercles noirs à $t = t_0, i = 0$ sont les positions initiales de la fonction $h(x, t)$ sur l'ensemble de l'axe X . Les cercles blancs sont les valeurs potentielles de la fonction $h(x, t)$ déterminée à chaque itération.

Schéma progressif

La discrétisation de la dérivée première temporelle et les dérivées spatiales seront effectués en utilisant respectivement la méthode progressive (équations 2.14) et centrée (équation 2.15). En affectant ce type de discrétisation à l'équation 2.16, nous trouvons son expression discrète sous la forme :

$$\frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^t}{\Delta t} = v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \quad (2.20)$$

On en déduit que :

$$h_x^{t+\Delta t} = h_x^t + v\Delta t \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda\Delta t}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \quad (2.21)$$

Si nous considérons que la valeur de cellule h_x^t est la moyenne de la valeur de ses deux voisines, alors :

$$h_x^t = \frac{h_{x-\Delta x}^t + h_{x+\Delta x}^t}{2}$$

et l'équation 2.21 devient :

$$\begin{aligned} h_x^{t+\Delta t} &= \frac{h_{x-\Delta x}^t + h_{x+\Delta x}^t}{2} + v\Delta t \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) \\ &\quad + \frac{\lambda\Delta t}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Ce qui donne l'expression finale du schéma progressif de l'équation de KPZ discrète.

La figure à droite représente le schéma d'itération selon l'équation 2.22, les cercles noirs représentent les valeurs connues à la ligne i ; quant au cercle blanc, il représente une nouvelle valeur à calculer. La ligne continue symbolise la différence spatiale et la ligne pointillée la différence temporelle.

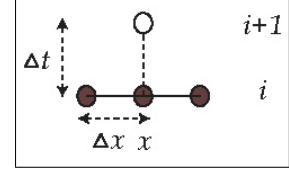


Schéma centré

Le schéma centré en temps et en espace de l'équation 2.16 se traduit par :

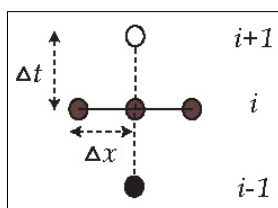
$$\frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^{t-\Delta t}}{2\Delta t} = v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2$$

ce qui donne :

$$\begin{aligned} h_x^{t+\Delta t} &= h_x^{t-\Delta t} + 2v\Delta t \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) \\ &\quad + \lambda\Delta t \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.23)$$

En remplaçant h_x^t par $\frac{h_x^{t-\Delta t} + h_x^{t+\Delta t}}{2}$, nous obtenons alors

$$h_x^{t+\Delta t} = h_x^{t-\Delta t} + 2v\Delta t \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - h_x^{t-\Delta t} - h_x^{t+\Delta t} + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \lambda\Delta t \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \quad (2.24)$$



Le schéma d'itération selon l'équation 2.24 est donné à gauche. Le résultat à l'étape $i + 1$ représentée par le cercle blanc est calculée à partir des valeurs à l'étape i et $i - 1$ représentées par quatre cercles noirs.

Schéma de Crank-Nicholson

Le schéma progressif de la dérivée première est considéré comme un *schéma explicite*, car il permet d'expliciter $h_x^{t+\Delta t}$ en fonction de h_x^t :

$$h_x^{t+\Delta t} = f(h_x^t, h_{x+\Delta x}^t, h_{x-\Delta x}^t, h_x^{t-\Delta t}, \dots)$$

Mais il existe aussi un *schéma implicite*. Ici, nous ne pouvons plus calculer explicitement $h_x^{t+\Delta t}$ car, il ne dépend pas seulement de h_x^t et $h_x^{t-\Delta t}$ mais également de $h_{x+\Delta x}^{t+\Delta t}$ et de $h_{x-\Delta x}^{t+\Delta t}$.

Les deux schémas, explicite et implicite, de l'équation de KPZ sont :

$$\begin{aligned} \text{Explicite} & : \frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^t}{\Delta t} = v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \\ \text{Implicite} & : \frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^t}{\Delta t} = v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^{t+\Delta t} - 2h_x^{t+\Delta t} + h_{x+\Delta x}^{t+\Delta t}}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^{t+\Delta t} - h_{x-\Delta x}^{t+\Delta t}}{2\Delta x} \right)^2 \end{aligned}$$

Considérons un point intermédiaire, $h_x^{t+\varepsilon\Delta t}$ sur le terme des dérivées spatiales. Alors la forme discrète complète de l'équation de KPZ devient :

$$\begin{aligned} \frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^t}{\Delta t} &= v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^{t+\varepsilon\Delta t} - 2h_x^{t+\varepsilon\Delta t} + h_{x+\Delta x}^{t+\varepsilon\Delta t}}{\Delta x^2} \right) \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^{t+\varepsilon\Delta t} - h_{x-\Delta x}^{t+\varepsilon\Delta t}}{2\Delta x} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.25)$$

Si ε tend vers 0, alors l'équation 2.25 tend vers le schéma explicite. En revanche, s'il tend vers 1, l'équation 2.25 tend vers le schéma implicite. Enfin, si $\varepsilon = \frac{1}{2}$, ce schéma est connu sous le nom du schéma de *Crank-Nicholson*.

2.3 Analyse de stabilité de l'équation discrète

La stabilité d'une solution est une question cruciale dans les méthodes d'analyse numérique [78, 15], touchant à des problèmes d'évolution.

En effet, l'étude de la stabilité d'un système consiste à déterminer les erreurs à l'état initial et à évaluer l'évolution de ces erreurs au cours du temps [100]. Cette évolution peut être avantageuse dans le cas où les erreurs décroissent en fonction du temps, impliquant une évolution vers un état stable. Dans d'autre cas, les erreurs peuvent s'amplifier au fur et à mesure et perturbent l'ensemble du système, conduisant à une évolution vers un état instable.

Dans les calculs numériques, on génère obligatoirement des erreurs, car ces calculs sont fondés sur des schémas de discrétisation ; ceux-ci possèdent toujours leur propre part d'erreur d'approximation ou de troncature (voir les équations 2.14 et 2.15). En plus de ***l'erreur de troncature***, il existe aussi ***l'erreur d'arrondi***, liée aux calculs itératifs dans la résolution d'une équation. Ces deux erreurs s'ajoutent et forment une sorte d'erreur global imputée au système.

L'évolution de l'erreur d'arrondi n'est pas évidente à prédire et souvent négligée dans les études de la stabilité d'un système. En revanche, pour l'erreur de troncature, il est tout à fait possible d'étudier et de déterminer son évolution, car une certaine relation existe entre le pas de discrétisation temporel (Δt), le pas de discrétisation spatial (Δx) et les coefficients

du système (équation différentielle).

Théorème 2 (équivalence de Lax [84]) *Pour un schéma de discrétisation consistant, la stabilité est la condition nécessaire et suffisante pour la convergence.*

Dans les paragraphes suivants, nous allons présenter brièvement les notions de convergence et de consistance.

2.3.1 Convergence

Étant donné la solution exacte $f(i\Delta x, n\Delta t)$ de l'équation différentielle et sa solution numérique f_i^n , la condition de **la convergence** [82] de la solution numérique vers la solution exacte d'une équation différentielle peut être exprimée par l'erreur :

$$\varepsilon_i^n = f(i\Delta x, n\Delta t) - f_i^n$$

et doit satisfaire la condition :

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} |\varepsilon_i^n| = 0$$

2.3.2 Consistance

En modélisation numérique, la forme analytique d'un problème est remplacée par sa forme discrète en utilisant les techniques de discrétisation. Cette représentation discrète est dite **consistante** [82] si son erreur d'approximation (sa troncature) tend vers zéro lorsque le pas d'échantillonnage tend vers zéro. Autrement dit, la consistance peut être traduite par l'évolution de l'équation discrète vers l'équation différentielle lorsque le pas d'échantillonnage tend vers zéro.

2.3.3 Étude de la Stabilité

Dans cette partie nous présentons deux méthodes d'analyse de stabilité ; la méthode de Von Neumann et la méthode matricielle. La première est fondée sur le développement en séries de Fourier [104] et la seconde sur le coefficient d'amplification. Ces deux méthodes sont

utilisées dans les études de la stabilité d'un problème linéaire. Dans le cas d'un problème non-linéaire, elles sont impraticables. Alors, pourquoi l'utiliser dans l'étude de l'équation de KPZ, bien que celle-ci soit clairement un problème de type non-linéaire, représenté par le terme quadratique de la dérivée spatiale première ? La solution réside en la recherche d'une linéarisation du problème posé par l'équation de KPZ.

Méthode de Von Neumann

La méthode d'analyse de stabilité de Von Neumann a été développée à Los Alamos pendant la Seconde Guerre Mondiale et a été classée « *top-secret* » jusqu'à ce qu'elle fût publiée par Crank and Nicholson [19] en 1947 et par Charney [16] en 1950. Cette méthode est souvent utilisée dans les différentes études de la stabilité des équations différentielles [9, 53, 94].

A partir d'une équation de perturbation, l'amplification de l'erreur sera étudiée en décomposant l'erreur en plusieurs harmoniques par la méthode de développement en séries de Fourier. Étant donnée une équation de perturbation écrite sous la forme :

$$\hat{h}_x^t = h_x^t + \varepsilon_x^t \quad (2.26)$$

où \hat{h}_x^t est la solution d'approximation/perturbation, h_x^t est la solution exacte et ε_x^t est l'erreur/perturbation. C'est à dire que la solution au point x et au temps t peut être décomposée en une composante stable (la solution exacte) et une composante de perturbation. De la même façon, nous pouvons écrire la relation de la perturbation pour le point $x \pm \Delta x$ et $t + \Delta t$ de la façon suivante :

$$\hat{h}_x^{t+\Delta t} = h_x^{t+\Delta t} + \varepsilon_x^{t+\Delta t} \quad (2.27)$$

$$\hat{h}_{x\pm\Delta x}^t = h_{x\pm\Delta x}^t + \varepsilon_{x\pm\Delta x}^t \quad (2.28)$$

Soit l'équation de KPZ discrète complète (équation 2.21) et perturbée :

$$\hat{h}_x^{t+\Delta t} = \hat{h}_x^t + v\Delta t \left(\frac{\hat{h}_{x-\Delta x}^t - 2\hat{h}_x^t + \hat{h}_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda\Delta t}{2} \left(\frac{\hat{h}_{x+\Delta x}^t - \hat{h}_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 \quad (2.29)$$

Cette équation est toujours non-linéaire. Il est donc impossible d'utiliser directement la méthode de Von Neumann. Pour cela, la linéarisation de cette équation est nécessaire, tâche

accomplie en utilisant la relation :

$$\left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 = \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \quad (2.30)$$

Si h_x^t est la hauteur d'une surface et que nous considérons qu'à l'état initial, la pente au point (x_i) est supérieure à celle du même point pendant l'évolution, ce qui implique que $\left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|$ est la pente maximale de la surface initiale, alors, l'équation 2.30 devient :

$$\left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2 = \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{t=0, \max} \frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \quad (2.31)$$

En insérant les équations 2.27, 2.28 et 2.30 dans l'équation 2.29 et en utilisant l'équation 2.21 de la forme non perturbée, nous obtenons alors l'équation de la composante perturbatrice (ou l'erreur) :

$$\varepsilon_x^{t+\Delta t} = \varepsilon_x^t + \frac{v\Delta t}{\Delta x^2} (\varepsilon_{x-\Delta x}^t - 2\varepsilon_x^t + \varepsilon_{x+\Delta x}^t) + \frac{\lambda\Delta t}{4\Delta x} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| (\varepsilon_{x+\Delta x}^t - \varepsilon_{x-\Delta x}^t) \quad (2.32)$$

Selon Von neumann, l'erreur ε_x^t peut être décomposée en séries de Fourier

$$\varepsilon_x^t = \sum_{j=-N}^N E_j^t e^{ik_j x \Delta x} \quad (2.33)$$

où E_j^t est l'amplitude de la j^{ieme} harmonique. Si la condition de stabilité est satisfaite par ε_x^t , alors elle est satisfaite pour toutes les harmoniques. Soit une erreur harmonique quelconque $E_j^t e^{i\xi x}$ de l'équation de KPZ selon le schéma numérique de l'équation 2.29, l'évolution de son élément de perturbation est déduite à partir de l'équation 2.32 :

$$E_j^{t+\Delta t} e^{i\xi x} = E_j^t e^{i\xi x} \left(1 - \frac{2v\Delta t}{\Delta x^2} \right) + \frac{v\Delta t}{\Delta x^2} E_j^t e^{i\xi x} (e^{i\xi(-\Delta x)} + e^{i\xi\Delta x}) + \frac{\lambda\Delta t}{4\Delta x} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| E_j^t e^{i\xi x} (e^{i\xi\Delta x} - e^{i\xi(-\Delta x)}) \quad (2.34)$$

En divisant par $e^{i\xi x}$, et en utilisant les formules de *De Moivre* suivantes :

$$\begin{aligned}
 e^{i\theta} &= \cos \theta + i \sin \theta \\
 \cos nx + i \sin nx &= e^{inx} \\
 \cos nx - i \sin nx &= e^{-inx} \\
 \cos nx &= \frac{e^{inx} + e^{-inx}}{2} \\
 \sin nx &= \frac{e^{inx} - e^{-inx}}{2i}
 \end{aligned}$$

on obtient :

$$E_j^{t+\Delta t} = E_j^t (1 - \sigma) + \sigma E_j^t \cos(\xi \Delta x) + i\psi E_j^t \sin(\xi \Delta x) \quad (2.35)$$

où

$$\sigma = \frac{2v\Delta t}{\Delta x^2} \quad (2.36)$$

$$\psi = \frac{\lambda \Delta t}{2\Delta x} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \quad (2.37)$$

Pour que la solution soit stable, il faut que l'évolution de l'amplitude de l'élément de perturbation soit inférieure ou égale à 1,

$$|\mathcal{A}| = \left| \frac{E_j^{t+\Delta t}}{E_j^t} \right| \leq 1 \quad (2.38)$$

ce qui implique

$$|1 - \sigma + \sigma \cos(\xi \Delta x) + i\psi \sin(\xi \Delta x)| \leq 1$$

En utilisant le module de l'équation ci-dessus, nous trouvons alors une équation d'ordre deux, donc $\cos(\xi \Delta x)$ est la variable :

$$\varpi = (\sigma^2 - \psi^2) \cos^2(\xi \Delta x) + 2\sigma(1 - \sigma) \cos(\xi \Delta x) + 1 - 2\sigma + \sigma^2 + \psi^2 \leq 1 \quad (2.39)$$

L'étude sur la variation de la valeur $\cos(\xi \Delta x)$ à partir de l'équation 2.39 est fondamentale si l'on désire établir les conditions de stabilité. En connaissant l'intervalle de la variation de la valeur $\cos(\xi \Delta x)$, nous pouvons exprimer la relation entre les variables σ et ψ et leurs

valeurs limites. La variation de la valeur $\cos(\xi\Delta x)$ est décrite par les trois cas limite suivants :

- $\cos(\xi\Delta x) = 1$

Il en résulte que $\varpi = 1$. L'équation 2.39 est donc toujours satisfaite.

- $\cos(\xi\Delta x) = -1$

Il en résulte que :

$$\begin{aligned} 4\sigma^2 - 4\sigma + 1 &\leq 1 \\ 2\sigma - 1 &\leq 1 \\ \sigma &\leq 1 \end{aligned} \tag{2.40}$$

- $\cos(\xi\Delta x) = 0$

Il en résulte :

$$\begin{aligned} 1 - 2\sigma + \sigma^2 + \psi^2 &\leq 1 \\ \psi^2 &\leq 2\sigma - \sigma^2 \end{aligned} \tag{2.41}$$

D'après l'équation 2.40, il apparaît que la valeur maximale de σ ne peut être égale qu'à 1 pour satisfaire les conditions de stabilité. En conséquence :

$$\psi \leq 1 \tag{2.42}$$

L'étude complète des conditions de stabilité par la méthode de Von Neumann, et la linéarisation du terme non-linéaire du schéma de discrétisation proposé dans l'équation 2.21, permettent d'énoncer les trois conditions nécessaires et suffisantes de stabilité 2.40, 2.41 et 2.42, à savoir :

$$\boxed{\begin{aligned} \sigma &\leq 1 \\ \psi &\leq 1 \\ \psi^2 &\leq 2\sigma - \sigma^2 \end{aligned}} \tag{2.43}$$

Méthode matricielle - coefficient d'amplification

Dans la partie précédente, nous avons étudié les conditions de stabilité en utilisant la méthode de Von Neumann, c'est-à-dire le calcul du coefficient d'amplification de l'erreur du système de l'équation de KPZ en utilisant les séries de Fourier. Cette fois, suivant la stratégie d'analyse proposée par Perrochet dans sa thèse [76, 77] pour une équation de transport, le coefficient d'amplification sera exprimé sous la forme d'une matrice à partir de l'équation différentielle semi-discrète et les conditions de stabilité spatiale seront déterminées en calculant les valeurs propres de cette matrice.

Partons de l'équation de KPZ (2.16) en linéarisant le terme non-linéaire :

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \quad (2.44)$$

La linéarisation de la dérivée première temporelle donne :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (2.45)$$

En dérivant l'équation ci-dessus par rapport au temps, nous trouvons l'équation de la dérivée seconde temporelle :

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \lambda v \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} + \frac{\lambda^2}{4} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \quad (2.46)$$

Selon Batchelor et al. (2000) [8], la solution générale de l'équation de KPZ sans source est une équation de second ordre de la forme :

$$h(x, t) = A + (v + \lambda)t - \frac{v}{\lambda} \ln(2\lambda t - B) - \frac{(x - x_0)^2}{2\lambda t - B} \quad (2.47)$$

Ceci implique que les dérivées troisième et quatrième sont nulles. L'équation 2.46 devient alors :

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = \frac{4}{\lambda^2 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^2} \frac{\partial^2 h}{\partial t^2}$$

En substituant cette équation dans l'équation 2.45, nous obtenons une forme alternative de

l'équation continue de KPZ :

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{2}{\lambda \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|} \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{8v}{\lambda^3 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^3} \frac{\partial^2 h}{\partial t^2} \quad (2.48)$$

En appliquant la méthode de discrétisation semi-discrète, nous obtenons l'équation du type :

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{2}{\lambda \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|} \left(\frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^{t-\Delta t}}{2\Delta t} \right) - \frac{8v}{\lambda^3 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^3} \left(\frac{h_x^{t+\Delta t} - 2h_x^t + h_x^{t-\Delta t}}{\Delta t^2} \right)$$

On remarque que cette équation semi-discrète peut être décrite sous la forme de l'équation matricielle suivante :

$$\frac{\partial h_i}{\partial x} = \begin{bmatrix} a & b & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ c & a & b & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & c & a & b \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & c & a \end{bmatrix} \cdot (h_i)$$

où

$$a = \frac{-16v}{\lambda^3 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^3 \Delta t^2} \quad (2.49)$$

$$b = \frac{8v}{\lambda^3 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^3 \Delta t^2} + \frac{1}{\lambda \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \Delta t} \quad (2.50)$$

$$c = \frac{8v}{\lambda^3 \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|^3 \Delta t^2} - \frac{1}{\lambda \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \Delta t} \quad (2.51)$$

L'équation matricielle ci-dessus est similaire à un système d'équations différentielles homogènes à coefficients constants. En effet, on peut exprimer la matrice ci-dessus par sa décomposition en valeurs propres et vecteurs propres. D'après la théorie de Liapounov [78, 39], la nature des solutions de cette équation dépend des valeurs propres de cette matrice des coefficients, résumées par le tableau suivant :

Valeurs propres de la matrice	Nature des solutions
Réelles négatives	Exponentielle décroissante → stable
Réelles positives	Exponentielle croissante → instable
Complexes avec partie réelle négative	Sinusoidale décroissante → stable
Complexes avec partie réelle positive	Sinusoidale croissante → instable

D'après Daus [21], si la taille (N) de la matrice ci-dessus est assez grand ($N > 15$), alors celle-ci tend vers une matrice de Tœplitz (diagonales à coefficient unique) avec ses valeurs propres obtenus analytiquement par :

$$\lambda_i = a + 2(\sqrt{bc}) \cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right); i \in [1 \dots N] \quad (2.52)$$

Selon la valeur des variables données en 2.49, 2.50 et 2.51, la nature des solutions peut être exponentielle ou sinusoidale. Elle est exponentielle décroissante si λ_i est réel positif, ce qui implique (d'après les équations 2.49, 2.50 et 2.51) :

$$\begin{aligned} \frac{8v}{\lambda^3 \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right|^3 \Delta t^2} &\geq \frac{1}{\lambda \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right| \Delta t} \\ 8v &\geq \lambda^2 \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right|^2 \Delta t \end{aligned} \quad (2.53)$$

En multipliant de part et d'autre de l'inégalité par $\frac{\Delta t}{4\Delta x^2}$, on obtient :

$$\frac{2v\Delta t}{\Delta x^2} \geq \frac{\lambda\Delta t}{2\Delta x} \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right| \frac{\lambda\Delta t}{2\Delta x} \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right| \quad (2.54)$$

En conclusion, on obtient la relation suivante d'après les équations 2.36 et 2.37 :

$$\sigma \geq \psi^2 \quad (2.55)$$

On remarque que cette condition de stabilité est assez proche de l'une des conditions établies par la méthode de Von Neumann (voir équation 2.41). Sachant que $\sigma < 1$ implique nécessairement que $\sigma \leq 2\sigma - \sigma^2$, alors la condition de stabilité énoncée par l'équation 2.41 peut être affinée par l'équation 2.55.

2.4 Simulation par l'équation de KPZ

La simulation de la croissance de stromatolithes par l'équation de KPZ a été développée en utilisant le logiciel MATLAB, logiciel spécialisé dans le calcul matriciel. Dans les bibliothèques de fonctions MATLAB, il existe déjà un grand nombre de fonctions standards, telles que, le produit matriciel, la transposition d'une matrice, la recherche des valeurs et des vecteurs propres etc. L'intérêt d'utiliser MATLAB réside dans le fait de pouvoir développer ses propres fonctions à partir de fonctions existantes. Une bonne introduction à MATLAB (en anglais) est le petit fascicule écrit par Sigmon (1993, disponible par «anonymous-ftp» à `math.ufl.edu` dans le répertoire `pub/matlab` sous le nom `primer.tex` et `primer.ps`)



FIG. 2.6 – Travertin hydrothermal renfermant des couches de calcite et d'oxydes Fe-Mn. Ce travertin (récolté par E.Verrecchia) vient du bassin de Ouarzazate au Maroc, et fait partie de la collection de l'Institut de Géologie de l'Université de Neuchâtel.

A partir de la surface initiale, illustrée par la ligne en gras dans le figure 2.6, nous essayons de simuler la formation des couches successives par l'équation de KPZ. Nous allons tout d'abord étudier l'instabilité dans ce cas pratique, en le comparant avec celui de l'étude théorique que nous avons vu dans le sous-chapitre précédent. Ensuite, nous nous intéresserons à l'analyse de la partie non-linéaire et de son influence sur l'instabilité. Enfin, nous présenterons quelques résultats de simulation.

A partir de l'équation de KPZ continue,

$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = v \frac{\partial^2 h(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \eta(x, t)$$

nous construisons un modèle discret en utilisant la différence progressive pour la dérivée

temporelle et la différence centrée pour les dérivées spatiales :

$$\frac{h_x^{t+\Delta t} - h_x^t}{\Delta t} = v \left(\frac{h_{x-\Delta x}^t - 2h_x^t + h_{x+\Delta x}^t}{\Delta x^2} \right) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{h_{x+\Delta x}^t - h_{x-\Delta x}^t}{2\Delta x} \right)^2$$

Cette équation discrète possède trois conditions de stabilité, démontrées dans le sous-chapitre précédent, à savoir :

$$\frac{\lambda \Delta t}{2\Delta x} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \leq 1 \quad (2.56)$$

$$\frac{2v\Delta t}{\Delta x^2} \leq 1 \quad (2.57)$$

$$\frac{2v\Delta t}{\Delta x^2} \geq \left(\frac{\lambda \Delta t}{2\Delta x} \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| \right)^2 \quad (2.58)$$

Durant toute la simulation, le pas d'échantillonnage temporel (Δt) est fixé à 1 et le pas d'échantillonnage spatial (Δx) est fixé à 3.

La perturbation non-linéaire de l'équation de KPZ est due au carré de la dérivée première spatiale. Durant l'étude théorique, ce terme a été linéarisé par la proposition 2.30 ; pourtant le facteur $\left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|$ n'est pas constant tout au long de la simulation. Du fait de la variation de $\left| \frac{\partial h}{\partial x} \right|$, l'évolution de la simulation peut être appréhendée suivant trois cas de figure (sachant que $\Delta t = 1$, $\Delta x = 3$ et $\left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| = 5$, les conditions de stabilité théorique nécessitent $v \leq \frac{9}{2}$ et $\lambda \leq \frac{6}{5}$) :

- d'une situation **stable** vers une situation **stable**.

Les valeurs utilisées dans la simulation sont inférieures à celles des conditions de stabilité. En respectant les conditions de stabilité théorique, l'évolution du système à partir de l'état initial est toujours stable, ce que montre la figure 2.7.a.

- d'une situation **instable** vers une situation **instable**.

La valeur v utilisée dans la simulation est grande par rapport à celle qui conditionne la stabilité du système. Le système (figure 2.7.b) est instable dès le début de la simulation jusqu'à sa fin, malgré une valeur λ conforme à la stabilité du système.

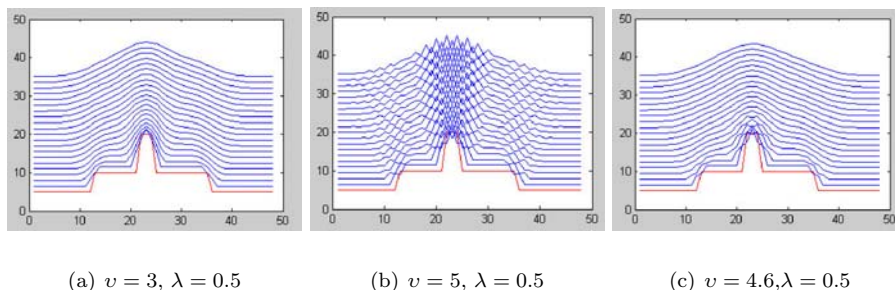
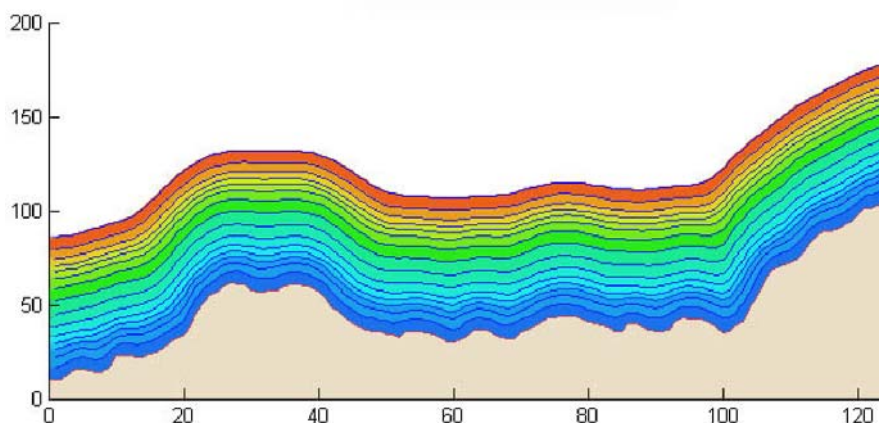


FIG. 2.7 – Trois figures d'évolution d'un système utilisant l'équation de KPZ

- d'une situation *instable* vers une situation *stable*.

Malgré une valeur v utilisée n'appartenant pas à l'intervalle des conditions de stabilité, le système évolue vers un état stable avec une petite perturbation au début de la simulation (voir figure 2.7.c). Ceci peut être expliqué par deux propriétés : 1°) la diminution de $|\frac{\partial h}{\partial x}|$ au cours du temps grâce au processus de diffusion, implique un changement des conditions de stabilité ; 2°) le phénomène de diffusion l'emporte sur la perturbation initiale au cours de la simulation.

En tenant compte des problèmes d'instabilité dans la simulation, nous donnons quelques figures résultant de la simulation de croissance de surface par l'équation de KPZ. Ces résultats nous aident à comprendre l'importance de chacune des variables (figure 2.8 et 2.9).

FIG. 2.8 – A partir de la surface initiale similaire à celle de la figure 2.6. les paramètres de l'équation de KPZ sont $v = 3, \lambda = 1$.

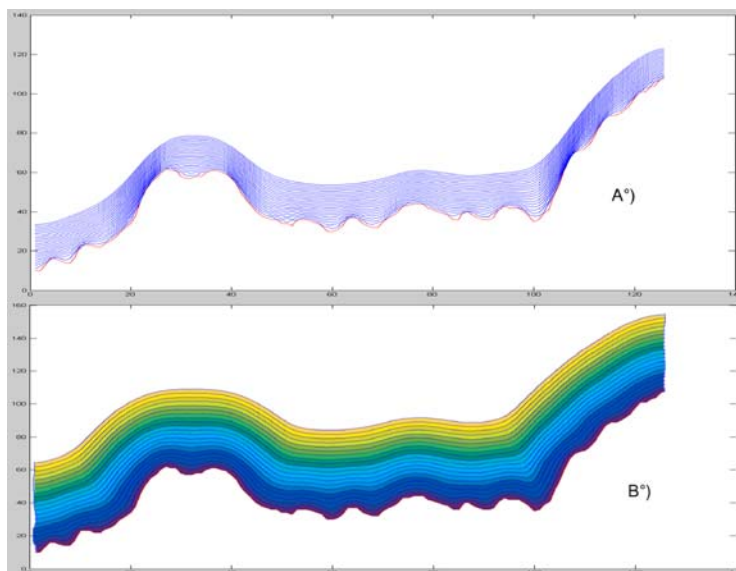
2.5 Conclusion

Les caractéristiques de la méthode de simulation de croissance d'une surface en utilisant l'équation de KPZ sont les suivantes :

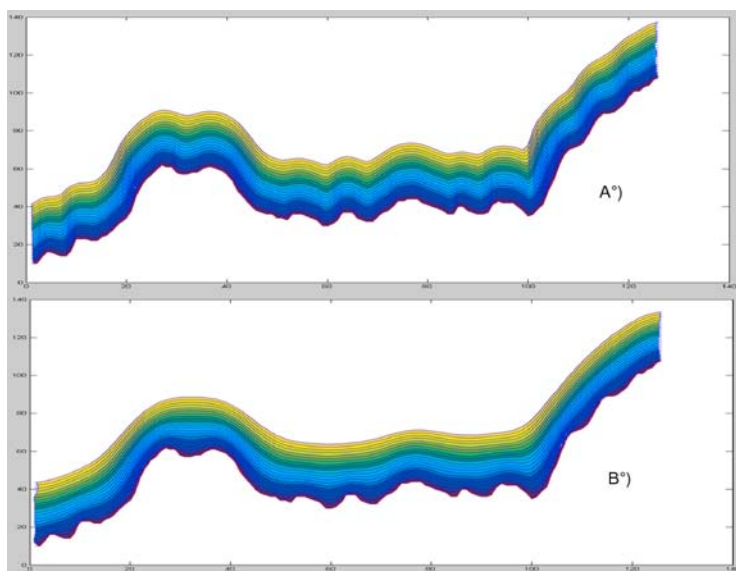
- il s'agit d'un modèle déterministe ;
- le type de croissance est local ;
- l'évolution et la forme produite dépendent des propriétés locales ;
- la croissance s'effectue couche par couche ;
- la surface formée est régulière, lissée et compacte.

L'étude de la stabilité de l'équation différentielle de KPZ peut être effectuée en linéarisant le terme de la croissance latérale. Le carré de la dérivée première spatiale peut être substitué par la multiplication de la pente maximale à la surface initiale par la dérivée première spatiale. Ceci est possible grâce au terme de diffusion qui permet la diminution de pente en fonction du temps.

Le modèle de croissance utilisant l'équation de KPZ est une bonne méthode pour simuler la croissance des stromatolithes ou des surfaces de type plat-dôme. Malheureusement, ce type de modèle est très limité pour simuler la croissance selon des directions latérales.



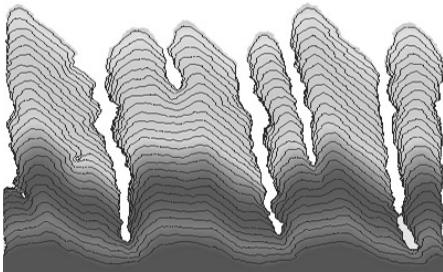
(a) Influence du paramètre λ dans la croissance de type KPZ. Ces deux figures ont la même valeur du paramètre de diffusion ($\nu = 4$). A°), $\lambda = 0$, c'est à dire qu'il n'y a pas de croissance latérale. B°), $\lambda = 1.5$, la croissance latérale est forte.



(b) Influence du paramètre ν dans la croissance de type KPZ. Ces deux figures possèdent la même valeur de croissance latérale ($\lambda = 0.5$). A°), $\nu = 0.5$, le facteur de diffusion est peu important. B°), $\nu = 4$, la diffusion est forte.

FIG. 2.9 – Quatre résultats de la simulation de la croissance de surface en utilisant l'équation de KPZ.

Agrégation par diffusion limitée

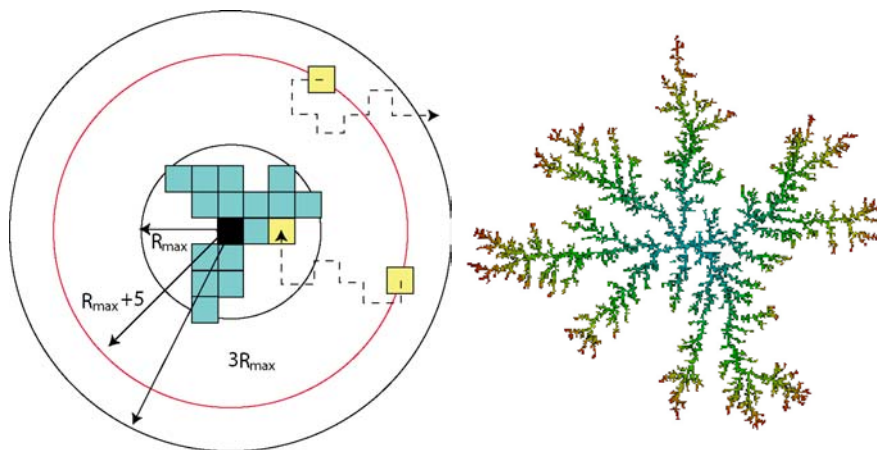


Il se pourrait donc bien que les être vivants, loin d'échapper aux lois de la physique, mettent en jeu d'autres lois de la physique, encore inconnues, mais qui, une fois révélées, feront tout autant partie intégrante de cette science.

Erwin Schrödinger
Qu'est-ce que la vie, 1986
 Ed. française, Bourgois éditeurs

DEPUIS la dernière décennie, les modèles cinétiques de croissance ont suscité une grande attention de la part des chercheurs, surtout des physiciens, en raison de leur universalité et leur capacité à simuler des processus naturels. Le modèle le plus connu et le plus étudié est certainement le modèle d'agrégation par diffusion limitée (DLA, *Diffusion Limited Aggregation model*) [116, 117] présenté en 1981 par T.A. Witten et L.M. Sander. Il s'agit d'un modèle de croissance des agrégats par mouvement « brownien » (aléatoire) de particules. Depuis quelques années, ce modèle a été utilisé pour simuler des processus naturels tels que la croissance de digitations visqueuses en hydrodynamique [11, 97], la croissance de tumeurs [32], la croissance de dendrites et de flocons de neige [49, 67, 68], et la croissance de bactéries [30, 57]. Ces modèles montrent des résultats convaincants car ils simulent à merveille, et dans des conditions opératoires contrôlées, une très grande diversité de morphologies de croissance que l'on trouve dans la nature.

Ce chapitre présente la modélisation de la croissance de stromatolithes en utilisant le modèle de DLA, commençant par le modèle standard de Witten et Sander, suivi par les extensions et enfin la modélisation de stromatolithes. Les nouvelles extensions proposés dans cette thèse sont la probabilité de mouvement des particules, la longueur de déplacement, et la relaxation.



(a) Schéma du modèle DLA, le carré noir est le germe initial. La figure montre deux trajectoires ; l'une des trajectoires s'éloigne trop de l'amas et est abandonnée.

(b) Exemple d'amas typique de Witten et Sander. La dimension fractale de cet édifice est voisine de 1.71.

FIG. 3.1 – (a) Principe du DLA , et (b) résultat produit.

3.1 Le modèle d'agrégation par diffusion limitée

Selon Jullien [44], l'*agrégation* est un processus physique *irréversible*, par lequel des unités de base (les particules ou micro-agrégats), initialement dispersées, se regroupent sous l'action de forces attractives pour constituer des édifices dont la taille croît avec le temps, les agrégats. Il ajoute également que dans la formation des agrégats, il y a deux aspects fondamentaux qui attirent l'attention de nombreux chercheurs, surtout en physique : l'*aspect cinétique* (la croissance des agrégats au cours du temps), et l'*aspect géométrique* (la structure des agrégats).

Le processus de formation des agrégats est un principe de base du modèle de DLA. Il est décrit par les étapes suivantes : une particule « n » diffuse sur un réseau, en venant d'un point suffisamment éloigné de l'amas qui se développe, et dans une direction arbitraire (cette marche aléatoire simule une diffusion brownienne). Lorsque la particule arrive au contact de l'amas, elle s'y colle définitivement. Une particule « $n + 1$ » arrive ensuite, et renouvelle le processus, ceci k fois. Si la particule s'éloigne trop de l'amas, on décide alors de l'éliminer parce que sa distance à l'amas devient si grande, que la probabilité pour qu'elle revienne sur l'amas de départ tend vers 0. En pratique, pour gagner du temps de calcul, on place la

particule au hasard à une distance de l'ordre de $R_{max} + 5$ de l'amas, où R_{max} représente la distance du point le plus éloigné du germe initial (figure 3.1 a).

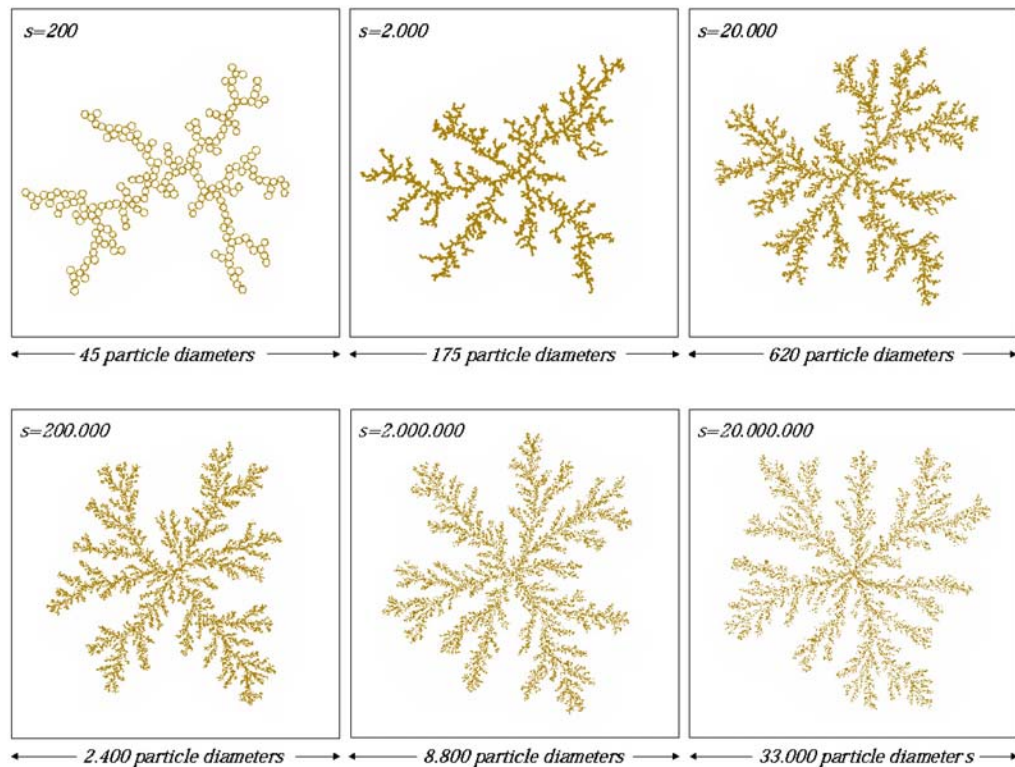


FIG. 3.2 – Six étapes de la croissance du type DLA. Chaque étape contient $s = 200$, 2.000 , 20.000 , 200.000 , $2.000.000$, et $s = 20.000.000$ particules.

Ce type de croissance des agrégats donne une morphologie similaire aux dendrites, avec la formation d'un certain nombre de branches principales (figure 3.1 b). L'effet non-local de la croissance du type DLA est le résultat de l'existence de barrières de protection créées par les branches de l'amas. Le mouvement de particules dans la figure 3.1 montre qu'une particule libre dans un réseau peut se coller sur n'importe quel endroit de l'amas. Mais la probabilité de collage sur chaque endroit de l'amas n'est pas la même. Il ne fait pas de doute que la probabilité de collage d'une particule sur les branches externes (pointes) est plus importante que la probabilité de pénétration entre les branches. Ceci explique que la croissance générée par le modèle de DLA ne dépende pas de la morphologie locale, mais de la géométrie globale de l'amas.

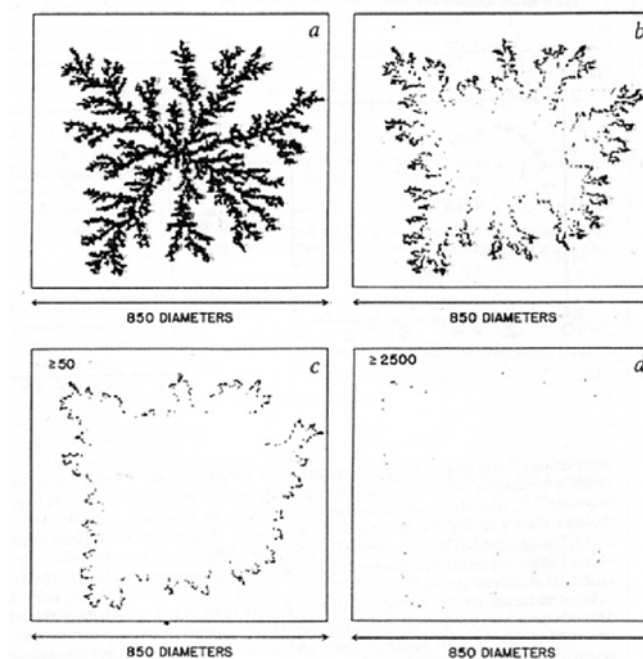
La probabilité de croissance sur le périmètre de l'amas est équivalente à la probabilité qu'une particule visite l'amas par pur mouvement aléatoire. Cette probabilité, u , suit la loi de diffusion [7] :

$$\nabla^2 u = 0$$

où $u = 1$ à l'infini, et $u = 0$ au périmètre de l'amas. La probabilité qu'un site du périmètre soit visité est proportionnelle au flux sur le site, c'est-à-dire $p \propto \nabla u$. Quant à la vitesse de croissance, V_n , elle suit l'équation continue $\nabla V_n = 0$. En conséquence, la croissance de l'amas par le modèle de DLA ne résulte pas d'un simple dépôt de particules, mais plutôt du calcul du champ du laplacien de u . De fait, de ce point de vue, la croissance de type DLA peut être considérée comme une croissance de type laplacien.

Le champ u est une représentation de différentes entités selon les domaines d'application. Dans le cas de la croissance de digitations visqueuses en hydrodynamique, il correspond au champ de pression. Dans le cas du dépôt électrolytique, il correspond au champ électrique, et dans celui de la croissance des bactéries, à la concentration de nutriments.

Les figures de droite illustrent les probabilités de contact sur l'amas par une particule en mouvement. En a) l'amas est construit par 50.000 particules. Les figures b), c) et, d), montrent respectivement la distribution de probabilité de collage de la 50.000^{ème} particule sur l'amas après un seul contact, plus de 50, et plus 2500 (Meakin et al. 1986) [62, 92].



A partir du modèle classique de DLA, nous avons introduit des extensions liés premièrement au déplacement des parti-

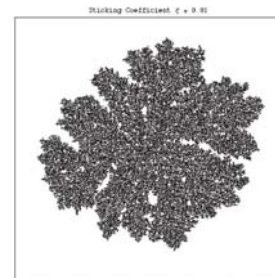
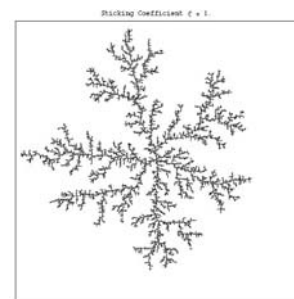
cules, deuxièmement à l'interaction entre des particules et des amas, et troisièmement à la quantité de particules en mouvement au même instant. Ces extensions sont physiquement intéressantes, car elles modifient la morphologie (géométrie) de l'amas, ainsi que la cinétique de la croissance.

3.1.1 Le facteur de « *Sticking probability* »

Dans le modèle de DLA classique, on considère qu'à chaque fois qu'une particule arrive à l'amas, elle s'y colle immédiatement. Se forme alors une nouvelle partie de l'amas (la probabilité de collage = 1). En introduisant le facteur de « *Sticking probability*¹ » (ξ) dans ce modèle, le collage n'est pas toujours immédiat : il se réalise au bout de plusieurs étapes, faisant varier ainsi sa probabilité entre 0 à 1.

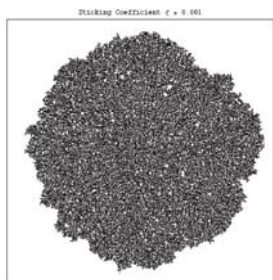
Ce facteur enrichit le modèle de DLA, car il permet de générer différentes morphologies de croissance de l'amas. Selon Gouyet, dans son livre intitulé *Physique et structures fractales* [35], le modèle de DLA avec l'extension « *Sticking probability* », montre un changement de régime (« *crossover* ») de ses caractéristiques géométriques.

Il dit qu'après un temps suffisamment grand, quand la taille de l'amas est assez importante, sa dimension fractale reste indépendante de la valeur du facteur de « *Sticking probability* » et converge vers la dimension fractale du schéma DLA classique ($\xi = 1$). En revanche, au début de la simulation, la formation de l'amas est dépendante de ξ . Plus le facteur de « *Sticking probability* » est petit



¹La probabilité de collage.

($\xi \rightarrow 0$), plus l'amas forme une structure compacte qui est similaire au *modèle d'Eden* (pour le détail voir [105]).



L'explication du changement de régime lors de la croissance de l'amas repose sur la diminution de l'équilibre de contact au périmètre de l'amas. Plus ξ est petit, plus la probabilité qu'une particule arrive aux sites voisins avant de se coller est grande. Quand la taille de l'amas devient suffisamment grande, les sites visités deviennent limités à un petit voisinage autour du premier contact.

Le modèle converge alors petit à petit vers le modèle classique de DLA de Witten et Sander.

3.1.2 Probabilité de mouvement des particules

La particule et l'amas sont les deux acteurs principaux du modèle de DLA. En modifiant leur comportement ou leurs caractéristiques, on obtient des résultats très différents. En regardant de près, le facteur de « *Sticking probability* » est lié à l'interaction entre la particule et l'amas. Ce que nous voulons dire par là, c'est que le facteur de « *Sticking probability* » est une extension du comportement de l'ensemble particule-amas. Si ce facteur est une modification des comportements de l'ensemble particule-amas, pourquoi ne pas ajouter et/ou modifier le comportement seul de la particule ou de l'amas ? Cette question nous amène à réfléchir sur les types de comportement que l'on peut ajouter au comportement initial des particules en mouvement [70].

Au départ, le mouvement de particules, selon le modèle de DLA, est un mouvement aléatoire ou mouvement brownien. Ce mouvement est lié à un processus purement stochastique, avec un déplacement équiprobable dans toutes les directions. Comme ce mouvement induit une croissance de l'amas aux points de contact avec la particule, il donne alors une croissance de type aléatoire et équiprobable de l'amas.

Dans la nature, pour certains processus physiques, le mouvement de particules dans un milieu n'est pas toujours un mouvement équiprobable. Par exemple : 1°) le mouvement des flocons

de neiges dans l'air, bien qu'il soit aléatoire, est très influencé par la force de gravité. Plus sa masse est importante, plus il tombe rapidement, et moins il est influencé par le vent ; 2°) le mouvement des ions dans le dépôt électrolytique suit toujours un déplacement de l'anode vers le cathode.

Par la suite, nous allons étudier trois possibilités de mouvement d'une particule. Nous allons commencer par le mouvement équiprobable (dans quatre directions), c'est-à-dire le mouvement dans un milieu sans flux (équiprobable) ; ensuite, nous mentionnerons le mouvement non-équiprobable dans un milieu de diffusion-convection. Enfin, nous décrirons le mouvement général d'une particule selon huit directions.

Milieu de diffusion sans flux

Si le système est considéré comme un processus purement diffusif (c'est-à-dire sans flux), la probabilité de déplacement d'une particule dans les quatre directions (est, ouest, nord, et sud) est équiprobable. Le mouvement équiprobable de la particule est facile à prouver à partir de l'équation de diffusion en utilisant sa discrétisation. L'équation de diffusion sans terme source dans l'espace \mathbb{R}^2 s'écrit :

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} - k\Delta u(x, y, t) = 0 \quad (3.1)$$

Supposons que l'amas croît lentement (la variation de la concentration de la substance diffusante (u) dans le temps est très petite)

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = 0$$

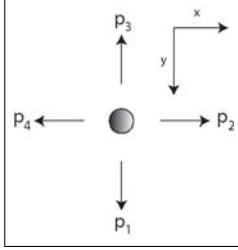
ce qui implique

$$k\Delta u(x, y, t) = 0 \quad (3.2)$$

La discrétisation spatiale selon l'axe x et y de l'équation ci-dessus donne² :

$$u_{x,y} = \frac{u_{x+1,y} + u_{x-1,y} + u_{x,y+1} + u_{x,y-1}}{4} \quad (3.3)$$

²Nous supposons que le pas de discrétisation spatiale dans la direction x et y est égal à 1, et le coefficient de diffusivité (k) = 1.



Cette équation discrète montre, à travers ses coefficients, que les probabilités de déplacement d'une particule vers les quatre directions sont égales à :

$$p_j = \frac{1}{4}; j = 1, 2, 3, 4 \quad (3.4)$$

La relation entre la probabilité et la concentration des particules voisines pour une particule donnée est décrite par :

$$u_{x,y} = \sum p_j u_j; j \in [1 \dots 4]; \begin{cases} u_1 = u_{x,y+1} \\ u_2 = u_{x+1,y} \\ u_3 = u_{x,y-1} \\ u_4 = u_{x-1,y} \end{cases} \quad (3.5)$$

Sans se référer à l'équation de diffusion, les probabilités de mouvement d'une particule peuvent être calculées en utilisant la méthode analytique. La figure ci-dessus montre les quatre possibilités de déplacement d'une particule selon les axes x et y . Si les probabilités de déplacement $p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = P$ sachant que $p_1 + p_2 + p_3 + p_4 = 1$, on en déduit alors que $p_j = P = \frac{1}{4}; j = 1, 2, 3, 4$.

Milieu de diffusion-convection

Comme les probabilités de déplacement d'une particule dans le milieu purement diffusif peuvent être déduites de l'équation de diffusion, alors dans le cas du milieu de diffusion-convection, on peut appliquer la même démarche. L'équation suivante décrit le phénomène de diffusion-convection dans l'espace \mathbb{R}^2 , avec p le **facteur de convection** :

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} - k\Delta u(x, y, t) - p\nabla u(x, y, t) = 0 \quad (3.6)$$

Supposons que la variation de la concentration de la substance diffusante (u) dans le temps est très petite et que le transport ne s'exerce que dans la direction $y+$, alors l'équation précédente devient :

$$k\Delta u(x, y, t) + p\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial y} = 0 \quad (3.7)$$

En utilisant la méthode des différences finies, la relation de propagation de la concentration entre une particule et ses voisines est décrite par l'équation suivante :

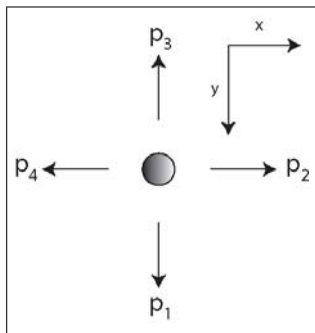
$$u_{x,y} = \frac{u_{x+1,y} + u_{x-1,y} + u_{x,y-1} + (1+p)u_{x,y+1}}{4+p} \quad (3.8)$$

D'après les coefficients de l'équation ci-dessus, la probabilité de déplacement (p_1) dans la direction de l'axe y^+ est :

$$p_1 = \frac{1+p}{4+p} \quad (3.9)$$

et les probabilités pour les autres directions sont :

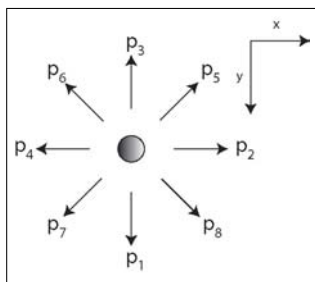
$$p_j = \frac{1}{4+p}; j = 2, 3, 4 \quad (3.10)$$



En utilisant la méthode analytique, on suppose que α est le coefficient de priorité de déplacement d'une particule vers la direction y^+ , et $p_j = P$ pour $j = 2, 3$ et 4 . On en déduit alors que p_1 est égal à $P(1 + \alpha)$. Sachant que $\sum_{j=1}^4 p_j = 1$, ceci implique $4P + \alpha P = 1$, d'où $P = \frac{1}{4+\alpha}$. On prouve alors que le facteur de convection (p) dans l'équation de diffusion-convection correspond au coefficient de priorité de déplacement d'une particule vers une direction donnée.

Dans un cas particulier, où le facteur de convection p est très important, la morphologie de l'amas devient plus compacte et sera similaire à celle produite par le modèle de « *Random Deposition* » (voir le chapitre 2).

Généralisation



Une particule peut se déplacer dans huit directions, comme montré par la figure ci-dessus. Supposons que les probabilités de déplacement d'une particule dans chaque direction ne soient pas équiprobables et mais qu'elles soient symétriques et se dégradent par rapport à l'axe vertical (y^+) du fait d'un flux selon la direction y^+ . Nous pouvons

alors décrire la relation de toutes les probabilités de déplacement de la particule (p_i) par :

$$\begin{aligned} p_3 &= p_5 = p_6 = P; \\ p_2 &= p_4 = (1 + \alpha_1) P; \\ p_1 &= p_7 = p_8 = (1 + \alpha_2) P; \\ 0 &\leq \alpha_1 \leq \alpha_2 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Sachant que $\sum_{j=1}^8 p_j = 1$, on déduit alors la probabilité de déplacement vers le *nord*, le *nord-est* et le *nord-ouest* par :

$$p_i = \frac{1}{3 + 2(1 + \alpha_1) + 3(1 + \alpha_2)}; i = 3, 5, 6 \tag{3.12}$$

la probabilité de déplacement vers l'*est* et l'*ouest* par :

$$p_j = \frac{1 + \alpha_1}{3 + 2(1 + \alpha_1) + 3(1 + \alpha_2)}; j = 2, 4 \tag{3.13}$$

et enfin la probabilité de déplacement vers le *sud*, le *sud-ouest* et le *sud-est* par :

$$p_k = \frac{1 + \alpha_2}{3 + 2(1 + \alpha_1) + 3(1 + \alpha_2)}; k = 1, 7, 8 \tag{3.14}$$

En faisant varier la valeur de α_1 et de α_2 , on obtient ainsi une grande panoplie de morphologies d'amas. Elles sont très différentes les unes des autres au niveau de leur compacité ou de leur porosité.

3.1.3 Longueur de déplacement

Jusqu'à maintenant, le mouvement aléatoire des particules est généré par un générateur aléatoire avec une fréquence égale à 1, c'est-à-dire que pour chaque mouvement inter-sites, une nouvelle direction est calculée de manière aléatoire. La longueur de déplacement moyen (λ) d'une particule est alors égale à la distance inter-sites [35]. L'augmentation de la longueur de parcours moyen consiste à diminuer la fréquence du générateur aléatoire. Dans certains type de processus d'agrégation, la longueur de déplacement peut être non négligeable et varie à cause du changement des conditions d'environnement. Si la longueur de déplacement devient très grande, alors, le mouvement de la particule devient un mouvement *ballistique* décrit par

la trajectoire rectiligne dans une direction aléatoire. La variation de longueur de déplacement moyen joue un rôle important dans la compacité et la dimension fractale de l'amas. Plus la longueur de déplacement est grande, plus la morphologie de l'amas est compacte et plus la dimension fractale est grande. Si la longueur de déplacement est très grande, la dimension fractale de l'amas est égale à 1.94 pour une diffusion dans le plan. En trois dimensions, l'amas formé a une dimension fractale de 2.8 ; démontrant une compacité très importante (pour le calcul de la dimension fractale, voir l'annexe).

La longueur de déplacement joue également un rôle dans la croissance des sites entre deux branches principales. Si la longueur de déplacement augmente, la probabilité de croissance sur les sites se trouvant entre deux branches principales diminue. Elle se comporte donc, en quelque sorte, comme une barrière de protection pour la croissance entre deux branches.

3.1.4 Généralisation du mouvement des particules

Les deux extensions du modèle de DLA, la *probabilité de mouvement* et la *longueur de parcours*, sont liées au comportement de la particule en mouvement dans un champ équipotentiel ou non-équipotentiel.

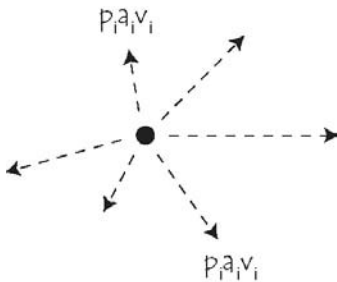


FIG. 3.3 – Déplacement d'une particule décrit par trois composantes (\mathbf{v} , \mathbf{a} et \mathbf{p}).

De manière générale, le mouvement d'une particule peut être exprimé par trois composantes (\mathbf{v} , \mathbf{a} et \mathbf{p}), décrites par la figure de gauche. \mathbf{p} représente la probabilité de déplacement de la particule, \mathbf{a} représente son coefficient ou sa longueur de déplacement et \mathbf{v} représente le vecteur ou la direction de déplacement de la particule. En n -dimensions, l'ensemble de déplacement (\mathcal{D}) de la particule est un ensemble du produit de deux composantes³ : la composante scalaire, la longueur, et la composante vectorielle, la direction.

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_i \vec{\mathbf{v}}_i \quad (3.15)$$

avec, i , le nombre de vecteurs de déplacement possibles. Cette équation peut être exprimée

³ $\mathbf{d} \in \mathcal{D}$, \mathbf{d} est un déplacement.

sous la forme matricielle suivante :

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_i [\mathbf{v}_{i1} \dots \mathbf{v}_{ij} \dots \mathbf{v}_{in}]^T \quad (3.16)$$

Pour que la longueur du vecteur de déplacement ne dépende que de la variable \mathbf{a} (la longueur de déplacement), il faut que le vecteur \mathbf{v} soit un vecteur unitaire⁴, c'est-à-dire que chaque composante du vecteur sera divisée par son module. Donc l'équation d'ensemble du déplacement sous la forme matricielle devient :

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_i \left[\frac{\mathbf{v}_{i1}}{|\vec{\mathbf{v}}_i|} \dots \frac{\mathbf{v}_{ij}}{|\vec{\mathbf{v}}_i|} \dots \frac{\mathbf{v}_{in}}{|\vec{\mathbf{v}}_i|} \right]^T \quad (3.17)$$

En séparant le module du vecteur de la matrice vectorielle, on obtient :

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_i \frac{1}{|\vec{\mathbf{v}}_i|} [\mathbf{v}_{i1} \dots \mathbf{v}_{ij} \dots \mathbf{v}_{in}]^T \quad (3.18)$$

En général, l'ensemble de déplacement est un ensemble fixe, c'est-à-dire que le coefficient (la longueur) de déplacement (\mathbf{a}) est une constante, et les vecteurs de déplacement ($\vec{\mathbf{v}}$) sont déterminés au début de la simulation. Le seul facteur qui donne un mouvement aléatoire est la probabilité de déplacement (\mathbf{p}). « \mathbf{p} » représente la fréquence de chaque composante au sein de l'ensemble \mathcal{D} (par exemple, l'équation 3.19), composante utilisée comme vecteur de déplacement. La probabilité (\mathbf{p}) peut être équiprobable, dans le cas où il n'y a pas de flux qui influence le déplacement des particules. Elle peut être non-équiprobable, dans le cas où les particules ont tendance à se déplacer dans une certaine direction, grâce à la présence d'un flux.

Pour enrichir le modèle de DLA, on peut imaginer que l'ensemble de déplacement \mathcal{D} est un ensemble varié, c'est-à-dire que les deux composantes (la longueur (\mathbf{a}) et le vecteur ($\vec{\mathbf{v}}$) de déplacement) sont des composantes aléatoires. Elles sont alors déterminées (calculées) à chaque nouveau déplacement inter-site. En utilisant un ensemble varié de déplacement, on suppose que le système est très instable, la condition d'environnement varie très fréquemment et la formation de l'amas est beaucoup plus longue à se réaliser que les changements de

⁴Le module du vecteur unitaire est égal à 1.

condition de l'environnement. Jusqu'à présent, on n'a jamais utilisé un ensemble varié de déplacement comme modèle de simulation. On n'a pas la moindre idée de la morphologie de l'édifice formé par ce modèle. Pour l'instant ce modèle n'est qu'une idée de l'auteur, et pourrait être mis en pratique dans un temps à venir.

Dans le cas du modèle original de DLA, l'ensemble de déplacement d'une particule est un ensemble fixe de quatre éléments, représenté par :

$$\mathcal{D} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (3.19)$$

3.1.5 La quantité de particules

Avec une seule particule en déplacement à la fois, le modèle classique de DLA peut être considéré comme un véritable modèle de croissance des agrégats par mouvement brownien de particules. Si le nombre de particules en déplacement augmente, le mouvement des particules n'est plus considéré comme un vrai mouvement brownien, car le déplacement de chaque particule est influencé par la présence des autres particules. Le modèle qui utilise plusieurs particules en mouvement à la fois est appelé MBDLA (« *Multiparticle biased diffusion-limited aggregation* ») [91, 69]. Dans ce modèle, le nombre de particules en mouvement correspond à la concentration des particules (c) dans le réseau. Si c tend vers 0, alors le modèle de MBDLA tend vers le modèle classique de DLA.

Le figure 3.4 montre le tableau d'évolution des morphologies des agrégats obtenues par le modèle de DLA, avec le facteur de convection (p) compris entre 0 et 5, et le facteur de « *Sticking probability* » (s) compris entre 0.01 et 0.5. Quant à la concentration des particules (c), elle est fixée à 0.05. L'augmentation du facteur de convection induit une augmentation de la compacité de la structure de l'amas. Cette augmentation de la compacité peut être également influencée par la diminution du facteur de « *Sticking probability* ». Du point de vue de la morphologie, l'augmentation de la compacité due à la variation du facteur de convection ou à celle du facteur de « *Sticking probability* » n'est pas la même. La variation

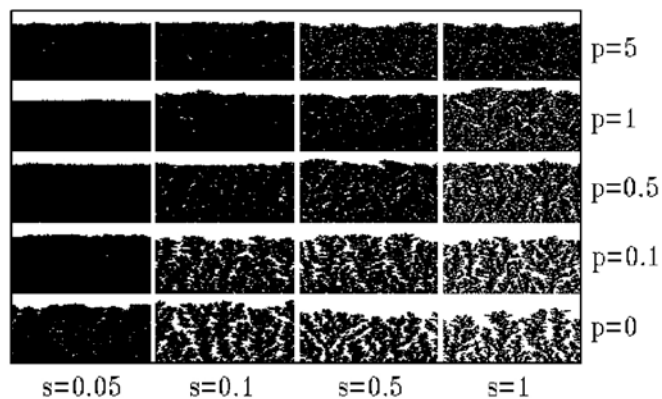


FIG. 3.4 – Morphologies des agrégats obtenues en utilisant le modèle de MBDLA [14] dans le réseau 256×400 avec le facteur de concentration $c = 0.05$. p est le *facteur de convection*, et s est le facteur de « *Sticking probability* ».

du facteur de « *Sticking probability* » montre une agglomération de particules autour des branches principales, ce qui n'est pas le cas pour la variation du facteur de convection.

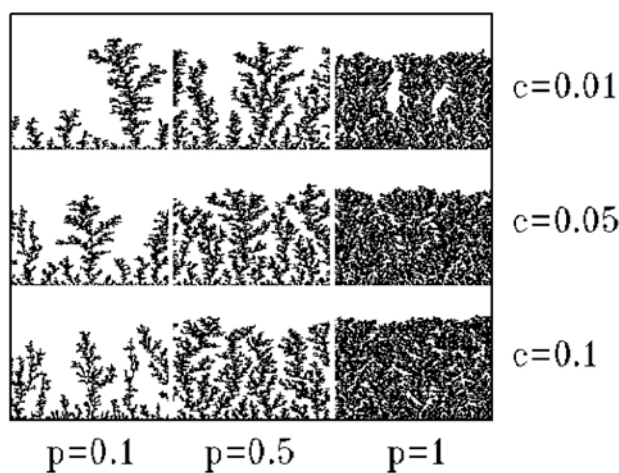


FIG. 3.5 – Morphologies des agrégats obtenues en utilisant la méthode MBDLA [14] avec le facteur de « *Sticking probability* » ($s = 1$). La concentration des particules varie selon l'axe vertical et le facteur de convection varie selon l'axe horizontal.

La concentration des particules influence donc la rugosité de la surface de l'amas formé. La figure 3.5 montre que plus la concentration est grande, moins la rugosité est importante. Ceci est facile à comprendre, car dans un réseau ayant un grand nombre de particules en mouvement, toute la surface dispose de presque la même probabilité de croissance, puisque

l'augmentation du nombre de particule induit une augmentation de la capacité de pénétration des particules entre les branches. Ceci implique que ce modèle tend vers une croissance qui ne dépend pas de la géométrie globale de l'amas.

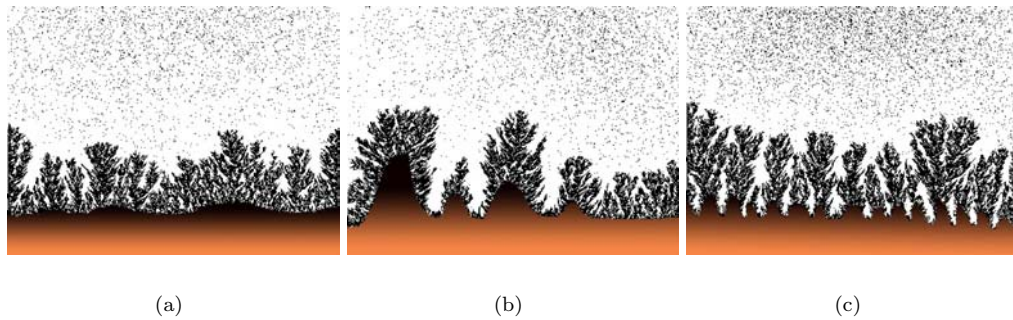


FIG. 3.6 – Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.

En observant la figure 3.6, on peut conclure que la surface initiale joue un rôle important dans la formation de l'amas (la morphologie de l'amas dépend de la géométrie globale de l'amas) car la croissance est plus importante aux branches externes (pointes) qu'aux endroits compris entre deux branches. Ceci ne contredit pas nécessairement ce que l'on vient de dire, c'est-à-dire que le modèle MBDLA ne dépend pas de la géométrie globale. La formation de l'amas dépend encore de la géométrie globale car la concentration des particules n'est pas suffisamment grande, de l'ordre⁵ de 0.1041667 ce qui reste trop petit pour augmenter la force de pénétration des particules entre les branches.

3.1.6 Relaxation

A partir du modèle de MBDLA, on peut ajouter une composante de relaxation. Dans un premier temps, cette contrainte de relaxation est limitée au voisinage d'ordre 1 selon l'axe horizontal, c'est-à-dire que chaque particule qui vient de se coller à l'agrégat subit une force qui la tire vers le centre dans le cas d'un réseau circulaire ou vers le bas dans le cas d'un réseau rectangulaire.

⁵Si on considère que la surface initiale représente 20% du réseau.

La figure 3.7 montre que la morphologie de l'édifice formé est plus compacte que celle sans relaxation (voir figure 3.6). La croissance de l'édifice induite par ce modèle dépend fortement de la surface initiale. Sur les sites externes (pointes), la croissance est beaucoup plus importante que sur les sites internes (entre deux branches), ce qui implique la formation de structures en colonnettes. La hauteur des colonnettes augmente en fonction du temps, ce qui donne une augmentation de la rugosité de la surface. La largeur des colonnettes s'élargit également au fur à mesure que la hauteur augmente. Après un certain temps, la croissance latérale se stabilise, alors que la croissance verticale se poursuit avec le temps.

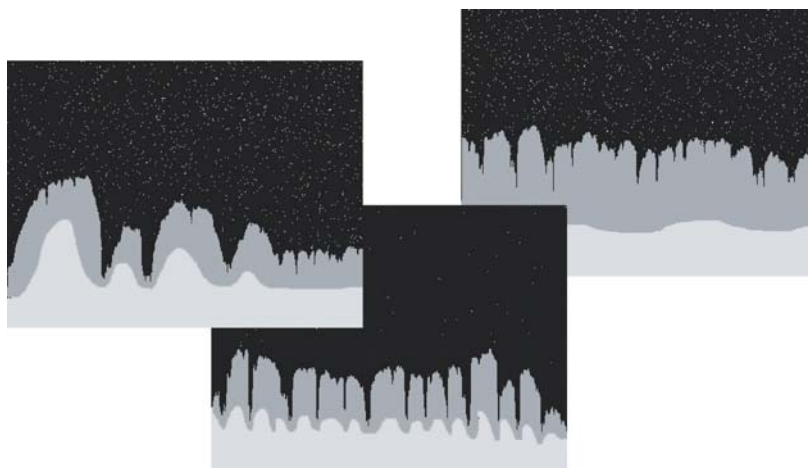


FIG. 3.7 – Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA avec relaxation (au voisinage d'ordre 1) à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.

La croissance latérale dépend de deux facteurs : premièrement, la configuration de l'édifice voisin, c'est-à-dire, une présence de branches (colonnettes) voisines diminue la vitesse de la croissance latérale, deuxièmement, la longueur de parcours des particules en mouvement. Plus la longueur de parcours est importante, plus la croissance latérale se stabilise rapidement, plus la largeur de colonnette est fine.

Dans un deuxième temps, on peut augmenter la distance de relaxation des particules. Cette fois, la distance de relaxation est fixé au voisinage d'ordre 2 selon l'axe horizontal. Cet augmentation permet à des particules d'atteindre plus facilement des sites isolés. La figure 3.8 montre qu'à cause de l'augmentation de la distance de relaxation, la surface de l'édifice de-

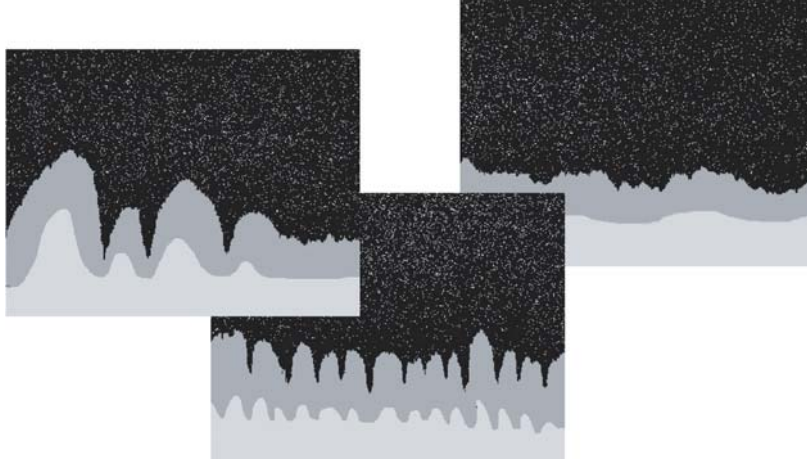


FIG. 3.8 – Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA avec relaxation (au voisinage d'ordre 2), avec un nombre de particules au départ égal à 10000.

vient plus lisse, et la rugosité de la surface est moins importante que le premier modèle. La vitesse de la croissance latérale augmente grâce à la capacité de relaxation horizontale plus importante des particules.

Enfin dans un dernier temps, on peut utiliser une distance de relaxation de taille infinie, c'est-à-dire qu'une particule qui arrive en contact de l'amas, diffuse vers les sites voisins jusqu'à ce qu'elle trouve un site minimal.

D'après la figure 3.9, les sites entre deux branches inscrites dans une surface de rugosité importante possèdent une vitesse de croissance plus importante que ceux qui se trouvent sur les branches externes (pointes) ou sur une surface plus aplanie. Ceci implique un comblement rapide des sites entre deux branches ce qui donne une surface beaucoup plus lisse que dans les modèles précédents. Le mécanisme de ce modèle est similaire à celui du processus de sédimentation. D'ailleurs, les résultats montrés par le modèle possèdent une forte ressemblance avec les figures de sédimentation de sables dans un milieu non-agité.

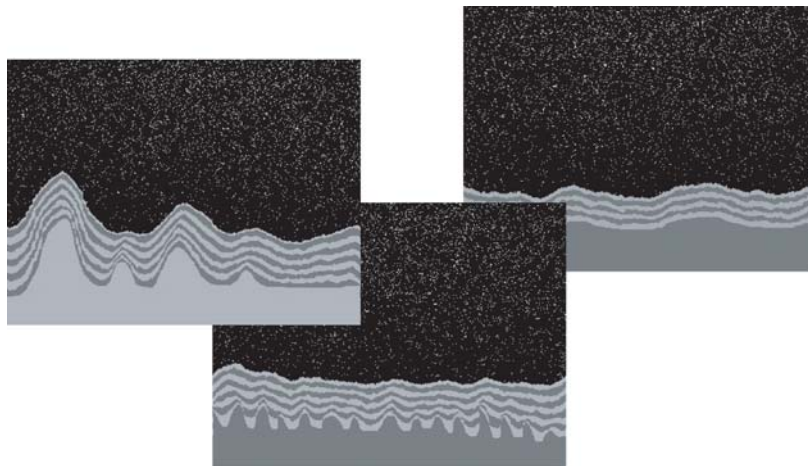
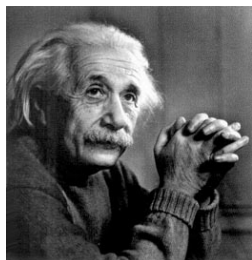


FIG. 3.9 – Résultats de simulations utilisant le modèle MBDLA à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.

3.2 Mathématiques, DLA et nature



God does not play dice ...

Albert Einstein

Le processus d'agrégation par diffusion limitée est souvent utilisé comme modèle de simulation de processus naturels. Sa capacité à imiter les processus de croissance dans les domaines de la physique, de la chimie, et de la biologie, montre qu'il peut être accepté comme un des modèles de base décrivant les processus d'interaction dans le monde vivant, tout comme dans le monde minéral, et à l'interface de ces deux mondes.

Hormis le modèle d'agrégation par diffusion limitée, il existe d'autres nombreux modèles capables de produire des morphologies trouvées dans la nature. On peut alors se poser les questions suivantes : est-ce que tous ces modèles sont interdépendants ?, est-ce qu'il y a un lien entre leurs règles de fonctionnement ou les morphologies produites ?, ou encore, est-ce qu'il y a une règle ou une loi universelle qui règne dans notre univers et qui traduise ces

modèles ?, tous les processus dans la nature ne sont ils que le fruit du hasard ?...

Sans avoir d'idées préconçues pour répondre à toutes ces questions, qui restent philosophiques et hors de portée des capacités de l'auteur, nous voulons simplement présenter quelques résultats d'observations intéressantes sur les morphologies produites par le modèle d'agrégation par diffusion limitée (DLA). La figure 3.10 montre les morphologies fractales engendrées par le modèle de DLA. Les lettres **A** et **B** sont les branches qui sont générées à partir de la branche mère. Les figures 3.10.(a) et 3.10.(b) montrent qu'une branche du type **A** génère deux branches filles chacune du type **A** et **B**. Une branche de type **B** ne génère qu'une seule branche fille de type **A**. La branche de type **A** est la branche mère principale au début de la ramification. Cette série générant l'alphabet n'est ni plus ni moins que la grammaire de la génération d'une suite de Fibonacci (équation 3.23 à la page 56).

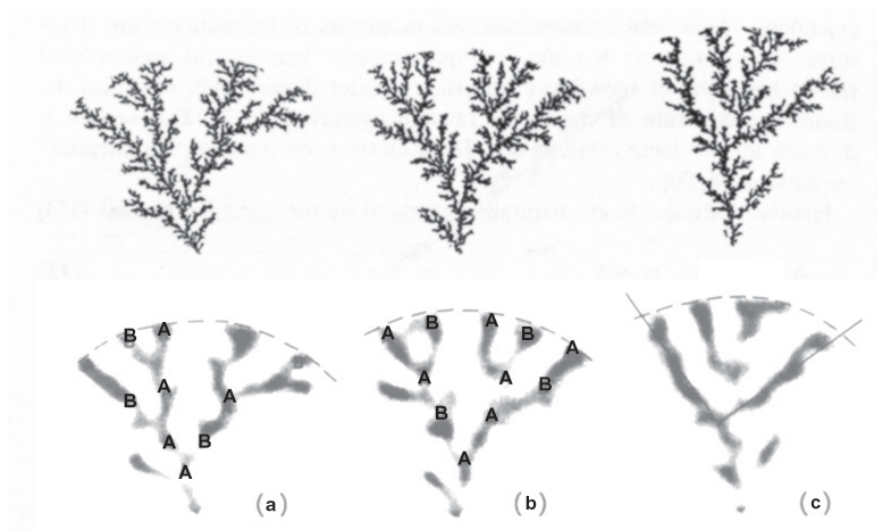


FIG. 3.10 – Trois édifices formés par 10^6 particules selon le modèle de DLA . Les figures (a) et (b) montrent une formation de branches selon le processus récursif de Fibonacci (images de Arneodo et al. [3])

Leonardo Fibonacci est un mathématicien italien, né à Pise en 1180. Il est connu également sous le nom de Léonard de Pise. Fils d'un commerçant toscan (Bonaccio, d'où son surnom), il est amené à voyager beaucoup, notamment au Proche-Orient. Fasciné par la numérotation arabe qu'il découvre, il décide de l'introduire dans le monde occidental en rédigeant à son retour un ouvrage d'explication (*Liber abaci*). Ceci lui permet d'étudier plus facilement les équations d'ordre 1 et 2 et de calculer quelques décimales de π . Fibonacci est resté très

célèbre grâce à sa suite et au fait qu'il soit presque le seul mathématicien occidental de talent de cette époque.

Sa suite était censée résoudre le problème suivant : possédant au départ un couple de lapins, combien de couples de lapins obtient-on en douze mois si chaque couple engendre tous les mois un nouveau couple à compter du second mois de son existence ?.

C'est ainsi qu'on est conduit à la célèbre suite de Fibonacci :

0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, ... Cette suite peut alors être écrite sous la forme :

$$\begin{aligned} f(0) &= 0 \\ f(1) &= 1 \\ f(n) &= f(n-2) + f(n-1); n > 1 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{rcl} f(0) & = & 0 \qquad \qquad \qquad 0 \\ f(1) & = & 1 \qquad \qquad \qquad 1 \\ f(2) & = & 1 + 0 \qquad \qquad \qquad 1 \\ f(3) & = & 1 + 0 + 1 \qquad \qquad \qquad 2 \\ f(4) & = & 1 + 0 + 1 + 1 + 0 \qquad \qquad \qquad 3 \\ f(5) & = & 1 + 0 + 1 + 1 + 0 + 1 + 0 + 1 \qquad \qquad \qquad 5 \\ f(6) & = & 1 + 0 + 1 + 1 + 0 + 1 + 0 + 1 + 1 + 0 + 1 + 1 + 0 \qquad \qquad \qquad 8 \end{array}$$

Une méthode encore bien plus efficace de calcul de $f(n)$ consiste à réécrire la relation définissant la suite sous la forme d'une relation linéaire matricielle :

$$\begin{pmatrix} f(n) \\ f(n-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f(n-1) \\ f(n-2) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

On en déduit que (pour $n > 1$) :

$$\begin{pmatrix} f(n) \\ f(n-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n-1} \times \begin{pmatrix} f(1) \\ f(0) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Le rapport entre les nombres successifs dans la série de Fibonacci peut être calculé de la manière suivante ; prenons les trois nombre successifs a , b et $a + b$. La relations de ces trois

nombre est décrite par :

$$\frac{b}{a} \cong \frac{a+b}{b}$$

$$\frac{b}{a} \cong \frac{a}{b} + 1$$

Considérons $\phi = \frac{b}{a}$, alors l'équation précédente devient :

$$\phi = \frac{1}{\phi} + 1$$

$$\phi^2 - \phi - 1 = 0$$

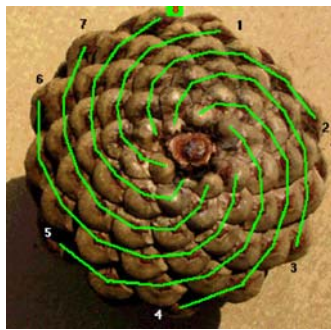
ce qui donne $\phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618$. La relation entre le nombre ϕ , connu sous le nom de **nombre d'or** et la suite de Fibonacci est :

$$f(n) = \frac{(\phi)^n - (-\phi)^{-n}}{2\phi - 1} \quad (3.22)$$

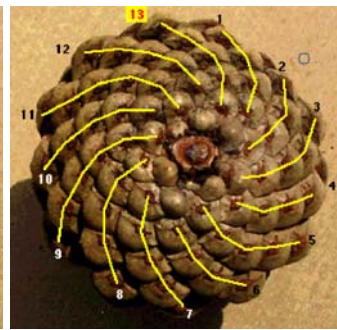
Le nombre d'or se retrouve au delà des mathématiques et des ouvrages d'origine humaine, que ce soit dans l'art ou dans l'architecture. Dans la nature sa présence est bien réelle, et on le trouve dans différentes formes naturelles et dans des domaines divers (figure 3.11), telles la botanique, la paléontologie, ou l'astronomie. Est-ce que sa présence ne relève que du simple hasard, ou est-ce une preuve de l'existence de lois sous-jacentes ?



(a) La spirale formée par le nautilus suit la courbe $r = e^{\frac{1}{\pi} \cdot \ln(1.618) \cdot \theta}$ en coordonnée polaire ; le rapport de deux rayons vecteurs opposés est le nombre d'or (1.618)



(b) La pomme de pin avec 8 spirales dans le sens anti-horaire.



(c) La pomme de pin avec 13 spirales dans le sens horaire. 8 et 13 sont deux termes consécutifs dans la suite de Fibonacci.

FIG. 3.11 – Quelques exemples du nombre d'or et de la suite de Fibonacci trouvés dans la nature.

La séquence de Fibonacci peut être générée également par le processus récursif [31] suivant :

$$a \rightarrow ab, b \rightarrow a \quad (3.23)$$

b	0
a	1
ab	1+0
aba	1+0+1
abaab	1+0+1+1+0
abaababa	1+0+1+1+0+1+0+1
abaababaabaab	1+0+1+1+0+1+0+1+1+0+1+1+0

Cette séquence de Fibonacci peut être considérée comme un D0L-système. Celui-ci est le plus simple des L-systèmes. Le L-système ou Lindenmayer-système [54] a été développé par Aristid Lindenmayer en 1968. C'est une théorie mathématique du développement des plantes. Elle est fondée sur la création d'objets complexes par remplacement de parties d'un objet initial en utilisant un ensemble de règles de production [80, 79, 86].

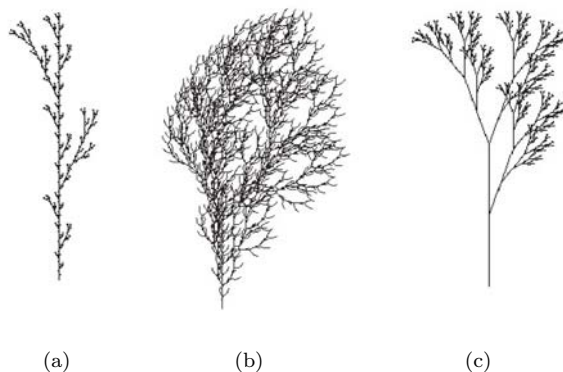


FIG. 3.12 – Quelques exemples d'images générées par L-système.

Le L-système est défini de la manière formelle suivante :

- Soit V : un alphabet $\{a, b, c, \dots, z\}$
- \mathcal{V} : ensemble des mots sur l'alphabet V $\{r, jfk, igun, aa \dots\}$
- $\omega \in \mathcal{V}$: mots de départ ou axiome

- $P \subset V \times \mathcal{V}$: ensemble fini de production $\{(a, jfk), (a, igun), (c, aa) \dots\}$
- D0L-Système est un langage algébrique sur ω généré par la grammaire non ambiguë $G = \{V, \omega, P\}$.

Par exemple, un D0L système se définit par :

$$G = \{\{a, b, ab\}, b, P\} \quad (3.24)$$

avec P , la série de production de : $P = \{p_1, p_2\} = \{(b, a), (a, ab)\}$

$$\begin{aligned} p_1 &: b \rightarrow a \\ p_2 &: a \rightarrow ab \end{aligned}$$

Nous avons alors l'ensemble de l'itération :

$$b \rightarrow a \rightarrow ab \rightarrow aba \rightarrow abaab \rightarrow abaababa \rightarrow \dots$$

Le L-système peut être vu comme un modèle de croissance par une technique d'auto-reproduction. Ce type de croissance est également le fondement de la méthode des automates cellulaires [93, 2].

Ce bref épilogue nous montre l'existence de liens étroits entre DLA, certaines des morphologies de la nature, les L - systèmes ainsi que les automates cellulaires. Ce dernier type de modèle est considéré comme une nouvelle forme de science, fondé sur la famille de programmes dits « *simples* » ou « *élémentaires* » [121]. Le chapitre suivant décrit de manière plus détaillée ce qu'est un automate cellulaire, ses propriétés, ses applications et son utilisation comme modèle de simulation de la croissance de surface.

Automate Cellulaire

*Toute la richesse du monde physique émerge de règles sous-jacentes très simples [...] je crois qu'il y a peut-être un **programme simple**, unique, qui, s'il était exécuté pendant suffisamment longtemps, reproduirait tous les détails de ce qui est survenu dans notre Univers. Ce programme constituerait donc la théorie physique ultime.*

S. Wolfram

La recherche 356, septembre 2002

L'idée d'un automate auto-reproducteur a été lancée pour la première fois en septembre 1948 par John Von Neumann au travers de son article intitulé « *Theory of automata* », publié dans un symposium à Pasadena, en Californie [110]. L'une de questions fondamentales qui avait été posée, était de savoir s'il était possible de construire une machine capable de s'auto-reproduire.



Stanislaw Ulam, l'inventeur de la méthode dite de Monté-Carlo, est surtout connu par ses travaux sur la fusion nucléaire. Il est également un collègue de John Von Neumann au laboratoire de Los Alamos (États-Unis), et propose une solution sur la question de la machine auto-reproductrice de Von Neumann. L'expérience d'Ulam sur des méthodes récursives dans la construction de formes géométriques à partir de règles simples construites dans un univers cellulaire¹ donne l'idée à Von Neumann de concevoir son automate sous la forme cellulaire plutôt que sous la forme d'un circuit logique.

Ulam a décrit en 1965 le concept d'auto-reproducteur en écrivant [101] : « *Un champ d'application intéressant pour des modèles qui sont constitués d'un nombre infini d'éléments*

¹Une matrice infinie où les cellules, régulièrement réparties dans une dimension finie, avec des états déterminés : passif ou actif.

interagissant peut être trouvé dans les théories récentes des automates. Un modèle général, proposé par Von Neumann et l'auteur, serait comme suit : étant donné un réseau infini de points, chacun possédant un nombre fini de connections à certains de ses voisins, chaque point a la possibilité de se trouver dans un nombre fini d'états. Les états des voisins au temps t_n induit l'état du point au temps t_{n+1} . Un des objectifs de la théorie est de prouver l'existence de sous-systèmes qui sont capables de se multiplier, c'est-à-dire de créer d'autres systèmes identiques à eux-mêmes. ». Arrivé à ce terme, le nom d'automate cellulaire n'est pas encore apparu, mais l'idée et le concept sont clairs et bien définis. Ce n'est qu'en 1966, à travers une publication sur l'auto-reproduction qu'Arthur Burks propose le nom d'« automate cellulaire ».

En 1970, John Conway, un mathématicien anglais de l'université de Cambridge invente le célèbre automate cellulaire connu sous le nom de « *Game of Life* »². Ce jeu a connu tout de suite un grand succès du fait de sa mise en œuvre informatique aisée, la richesse des configurations qu'il produit, et surtout la simplicité de ses règles d'évolution. Le jeu de la vie est un ensemble de cellules où une cellule peut se trouver dans deux états : vivant ou mort. L'évolution d'une cellule au temps $t + 1$ est déterminée par son état et l'état de ses voisines (N_v = nombre de cellules voisines vivantes) au temps t , selon les règles de transition suivantes :

- une cellule vivante meurt, si $N_v \leq 1$, ce qui correspond à un état d'isolement de cellule,
- une cellule vivante meurt, si $N_v \geq 4$, ce qui correspond à un état de surpeuplement autour de la cellule,
- une cellule morte peut devenir vivante, si $N_v = 3$ ce qui correspond à une reproduction « trisexuée ».

Conway a consacré deux ans de recherche et d'expérimentation avant d'arriver à établir les règles simples du « *Game of Life* » ; était-ce dû au manque de connaissances concernant les automates cellulaires ou était-ce vraiment difficile de trouver des règles simples qui conduisent à des comportements riches, imprévisibles, et complexes ?

Stephen Wolfram, l'inventeur du logiciel « *Mathematica* », a publié son premier article à l'âge de 15 ans, et un certain nombre d'articles sur la physique des particules alors qu'il n'était

²En français, « Jeu de la vie ».

encore qu'un adolescent. Il obtint son doctorat au *Cal-Tech* en 1980 à l'âge de 20 ans. En effectuant une recherche sur l'origine de la complexité dans la nature et en recherchant des modèles sur la façon dont les galaxies s'étaient formées à partir d'un état initial chaotique, il s'intéressa aux automates cellulaires.

En 1982, il publie son premier article sur les automates cellulaires « *Cellular Automata as Simple Self-Organizing Systems* ». De 1982 à 1988, il publie en tout 20 articles sur la théorie, la complexité et l'application des automates cellulaires. Le point fort de la recherche de Wolfram est d'avoir proposé une classification des automates cellulaires en quatre catégories, en s'inspirant de la théorie des systèmes dynamiques. En 2002, il sort un livre sur l'énorme potentialité des automates cellulaires « *A new kind of science* », qui retrace ses années de recherches

et parle de sa certitude qu'un jour, les automates cellulaires deviendront une science fondamentale tout comme les mathématiques. Enfin, Goujon [34] a écrit qu'« *il semble donc qu'un nouveau paradigme scientifique se soit développé, ses caractéristiques principales étant de traiter les problèmes selon une approche ascendante (du simple vers le complexe), parallèle et en déterminant les comportements des entités élémentaires de façon local* ».

Au niveau pratique, les automates cellulaires sont appliqués à divers domaines, depuis la biologie [25, 90], les neurosciences [106], la physique [1, 99] jusqu'à la chimie [38]. Ces diverses applications des automates cellulaires montrent qu'ils possèdent des capacités à répondre

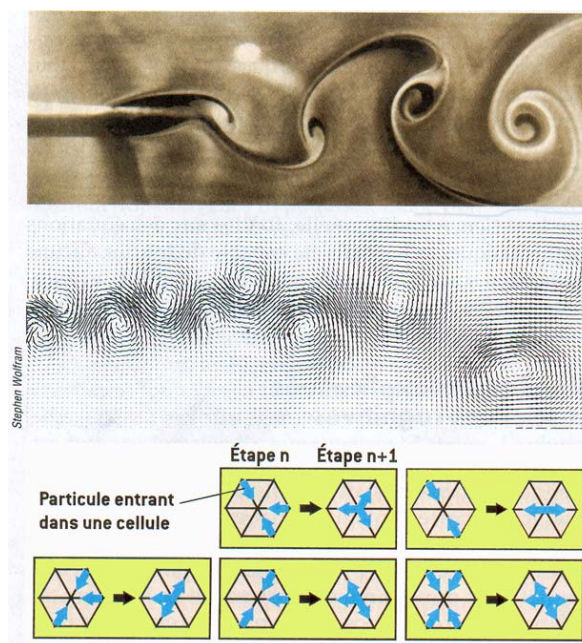


FIG. 4.1 – Les phénomènes de turbulence simulés par des automates cellulaires. En haut, les turbulences produites à cause d'un obstacle. Au milieu, la simulation par des automates qui sont décrits par 5 règles simples données en bas. (image prise dans le magazine « Pour la Science », octobre 2002, page 158).

à une grande diversité de problèmes posés ; il suffit d'interpréter les mécanismes de fonctionnement d'événements du problème en fonctionnement discret (temps, espace et état) de l'automate cellulaire. C'est ainsi que les automates cellulaires nous ont convaincu par leur simplicité de mise en place et leurs résultats imprévisibles qu'ils pourraient être utilisés comme modèle de simulation de la croissance des stromatolithes.

4.1 Définition

Wolfram [118, 119, 120] définit un automate cellulaire comme un système de cellules interagissant localement de manière simple et qui manifeste un comportement global complexe. Jen [43] a par ailleurs souligné une autre propriété importante : il s'agit de modèles dynamiques où espace, temps, et états sont discrets. Ceci signifie que l'espace est divisé en cellules considérées comme des entités individuelles, que celles-ci peuvent se trouver dans un état pris dans un ensemble fini appelé *ensemble d'états* de l'automate, et enfin, qu'elles sont susceptibles de changer d'état à des moments fixes selon une *règle de transition* fondée sur la configuration d'états au voisinage de chaque cellule.

Les éléments de base d'un automate cellulaire sont les cellules. Une cellule peut être considérée comme une mémoire unitaire souvent qualifiée d'état. Dans le modèle le plus simple d'un automate cellulaire, les états sont binaires, c'est-à-dire qu'ils contiennent les valeurs 0 ou 1. En revanche, dans des modèles plus complexes, les cellules peuvent prendre plusieurs états différents (≥ 2).

Informellement, un automate cellulaire est un ensemble de cellules, disposées sur un réseau borné. Un instant donné, toute cellule se trouve dans un état particulier, ou « état de l'automate ». La données des états de l'ensemble des cellules forme une configuration. A chaque coup d'horloge, les cellules changent leur état en fonction de leur propre état et de l'état de leur voisins par une application de règle de transition. De manière formelle, l'automate cellulaire forme un langage algébrique défini par la grammaire suivante :

Définition 1 (Automate cellulaire) *Un automate cellulaire A de dimension d , est un 4-uplet (d, S, B, δ) tel que :*

- S est un ensemble fini non vide, dont les éléments sont les **états**, noté :

$$S = \{s_k; k \in \{0, \dots, |S| - 1\}\},$$

- B est un sous-ensemble fini de \mathbb{Z}^d , appelé le **voisinage** et défini par :

$$B = \{v_j = (x_{1j}, \dots, x_{dj}); j \in \{0, \dots, |B| - 1\}\},$$
- δ est une fonction de $S^{|B|}$ dans S , appelée la **fonction de transition locale**.

Définition 2 Une **configuration** C_A de l'automate cellulaire \mathcal{A} est une application de \mathbb{Z}^d dans S . Pour tout t appartenant à \mathbb{N} , la configuration C_A^t devient la configuration C_A^{t+1} définie par :

$$\forall (x_{1j}, \dots, x_{dj}) \in \mathbb{Z}^d$$

$$C_A^{t+1}(x_{1j}, \dots, x_{dj}) = \delta(C_A^t(x_1 + x_{11}, \dots, x_d + x_{d1}), \dots, C_A^t(x_1 + x_{1|B|}, \dots, x_d + x_{d|B|}))$$

La fonction $F : S^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow S^{\mathbb{Z}^d}$ qui à C_A^t associe C_A^{t+1} est appelée la **règle de transition globale** de \mathcal{A} .

La définition ci-dessus signifie que l'état d'une cellule au temps $t+1$ est déterminé par l'état des cellules voisines au temps t . La fonction F peut être une fonction classique, dans ce cas, l'automate est dit **déterministe**, ou une fonction faisant intervenir des variables aléatoires; on dit alors que l'automate est **probabiliste** ou **stochastique**.

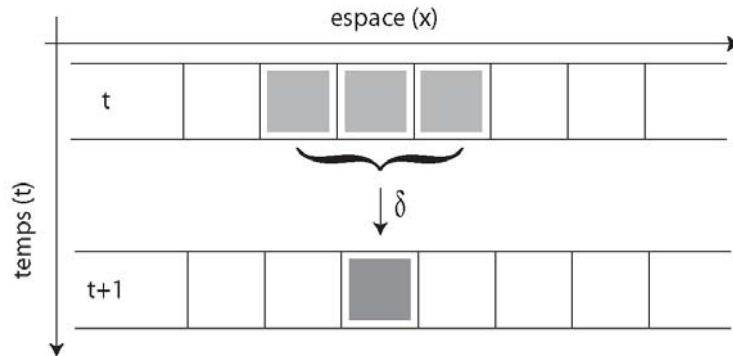


FIG. 4.2 – Processus d'évolution d'une cellule à partir de son état et de l'état des cellules voisines au temps t selon une règle de transition δ .

La règle de transition globale donne la notion sur l'évolution en temps discret, où à partir d'une configuration initiale C_A^0 d'un automate cellulaire \mathcal{A} , une nouvelle configuration C_A^n peut être déduite en appliquant successivement sur $C_A^0, C_A^1, \dots, C_A^{n-1}$ une règle de transition globale.

Afin de continuer plus avant, il est nécessaire de fixer quelques éléments de la théorie des automates cellulaires. Les définitions suivantes permettent de dessiner le cadre dans lequel les simulations seront opérantes³.

Définition 3 (Accessibilité) Une configuration $C_{\mathcal{A}}^n$ d'un automate cellulaire \mathcal{A} de règle de transition globale δ est accessible depuis la configuration $C_{\mathcal{A}}^0$, s'il existe un entier n strictement positif tel que $C_{\mathcal{A}}^n = \delta^n(C_{\mathcal{A}}^0)$.

La définition d'accessibilité de l'automate cellulaire permet d'introduire la notion de la configuration sans précédent. Celle-ci est connu sous le nom de « Jardin d'Eden », symbolisant le début de la création.

Définition 4 (Jardin d'Eden) Une configuration $C_{\mathcal{A}}$ d'un automate cellulaire \mathcal{A} est un jardin d'Eden de \mathcal{A} si elle n'est accessible depuis aucune configuration de \mathcal{A} .

Définition 5 (État quiescent) Un automate cellulaire avec la règle de transition δ est dit à état quiescent s'il existe un état e de cet automate, tel que $\delta(e, \dots, e) = e$.

Définition 6 (Automate cellulaire conjugué) Un automate cellulaire \mathcal{A} d'ensemble d'états $\{0, 1\}$ et de règle de transition δ est le conjugué de l'automate cellulaire \mathcal{A}° d'ensemble d'états $\{0, 1\}$ et de règle de transition δ° et de même voisinage que \mathcal{A} si

$$\forall (s_1, \dots, s_n) \in \{0, 1\}^n, \delta(s_1, \dots, s_n) \equiv \delta^\circ(s_1, \dots, s_n) + 1$$

avec \equiv la relation d'équivalence modulo 2

Définition 7 (Automate cellulaire symétrique) Un automate cellulaire \mathcal{A}° de règle de transition δ° est le symétrique de l'automate cellulaire \mathcal{A} de règle de transition δ si

$$\forall (s_1, \dots, s_n) \in \{0, 1\}^n, \delta(s_1, \dots, s_n) = \delta^\circ(s_n, \dots, s_1)$$

³Tous les définitions à propos des automates cellulaires et leurs caractéristiques sont des définitions de base détaillés dans différentes articles, entre-autres [115, 61, 22, 70, 24], et Ils sont adaptés à la notation que nous utilisons dans cette thèse

Définition 8 (Période d'une configuration) Une configuration C a une période k si pour tout $i \in \mathbb{Z}$ nous avons $c_i = c^{i+k}$. Pour tout automate cellulaire \mathcal{A} , une configuration $c \in C_{\mathcal{A}}$ est périodique s'il existe un k , tel que c a une période k .

4.2 Automate cellulaire unidimensionnel

Informellement, un automate cellulaire unidimensionnel peut être considéré comme une ligne discrète de sites, où chaque site a une valeur spécifique. Cette valeur de site varie dans un temps discret (t) selon une règle de transition précise, et son état se définit par rapport aux états des sites avoisinants au temps ($t - 1$).

De manière formelle, l'automate cellulaire unidimensionnel se définit comme suit :

Définition 9 (Automate cellulaire unidimensionnel) Un automate unidimensionnel de rayon r est un couple (S, δ) où S est un ensemble fini d'états et $\delta : S^{2r+1} \rightarrow S$ est une fonction de transition. Une configuration $c \in S^{\mathbb{Z}}$ de (S, δ) est une fonction de \mathbb{Z} dans S et sa fonction de transition globale $G_{\delta} : S^{\mathbb{Z}} \rightarrow S^{\mathbb{Z}}$ est telle que $(G_{\delta}(C))(i) = \delta(C(i-r), \dots, C(i), \dots, C(i+r))$.

A partir de cette définition, on peut construire un grand nombre d'automates cellulaires unidimensionnels. Parmi les plus connus et les plus souvent étudiés, on trouve les automates cellulaires élémentaires définis par :

Définition 10 (Automate cellulaire élémentaire) Un automate cellulaire élémentaire est un automate cellulaire linéaire possédant un ensemble fini d'états $S = \{0, 1\}$ et de voisinages $B = \{-1, 0, 1\}$.

Avec le **nombre d'états** (k) égal à 2 et l'**ordre de voisinage** (r) égal à 1, l'automate cellulaire élémentaire possède alors :

- 8 (k^{2r+1}) configurations possibles,
- 256 ($k^{k^{2r+1}}$) règles de transition, et
- 32 $\left(k^{\frac{k^{(r+1)(k^r+1)}}{2}} - 1 \right)$ règles de transition légales.

Le tableau 4.1 illustre les 8 configurations possibles d'un automate cellulaire élémentaire, avec une règle de transition dite 150⁴.

111	110	101	100	011	010	001	000
1	0	0	1	0	1	1	0

TAB. 4.1 – Exemple de la règle de transition 150 pour un automate cellulaire élémentaire.



FIG. 4.3 – Évolution d'une cellule active par l'application de la règle 150.

La combinaison de données dans le tableau 4.1 est formée par les règles de transition d'un automate cellulaire élémentaire ($k = 2$, $r = 1$). La valeur de chaque site est soit 0, soit 1. La première ligne donne la configuration d'une cellule (site) et de ses deux voisins adjacents. La deuxième ligne fournit le résultat de l'application de la règle de transition sur la configuration des cellules. À partir de la règle de transition, la représentation de l'évolution des cellules peut

être décrite sous la forme d'une fonction booléenne ou par une opération logique. La règle de transition 150 du tableau 4.1 peut être traduite par la fonction booléenne suivante :



FIG. 4.4 – Évolution de plusieurs cellules actives par l'application de la règle 150.

$$C_x^{t+1} = C_{x-1}^t \oplus C_x^t \oplus C_{x+1}^t$$

$$C^+ = C_- \oplus C \oplus C_+$$

Par exemple, la règle 18 (00010010) est définie par :

$$C^+ = \bar{C} \cap (C_- \oplus C_+)$$

et la règle 90 (01011010) par :

$$C^+ = C_- + C_+$$

⁴10010110₂ = 150₁₀

La règle 18 et la règle 90 donnent exactement la même morphologie d'évolution, à condition qu'à l'état initial, il n'y ait qu'une seule cellule active. La morphologie de l'évolution d'une cellule active par l'application de la règle 18 ou de la règle 90 de l'automate cellulaire élémentaire restitue la même hiérarchie que celle observée dans le triangle de Pascal, lorsque l'on remplace les nombres impairs par des cellules actives.

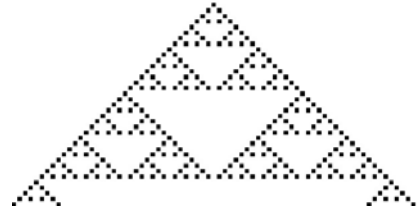


FIG. 4.5 – Évolution d'une cellule active par une application de règle 18 et 90.

Il est évident que parmi les 256 règles de transition de l'automate cellulaire élémentaire, il n'y en a seulement que quelques unes qui soient « *légales* ». Les conditions de détermination de la légalité d'une règle de transition sont les suivantes [118] :

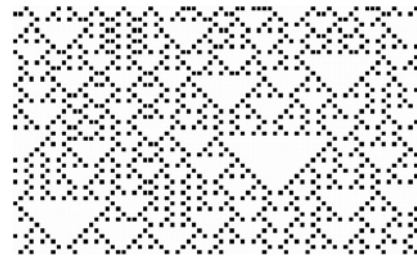


FIG. 4.6 – Évolution des cellules actives par une application de règle 18.

1°) La configuration vide ne peut pas engendrer une cellule active, ou l'application de la règle de transition sur l'ensemble vide est toujours vide :

$$\begin{aligned} C_A^t &= \{0, 0, 0\} \\ \delta(C_A^t) &= 0 \end{aligned}$$

2°) Une configuration isotrope donne le même résultat d'évolution de l'automate cellulaire élémentaire :

$$\left. \begin{aligned} C_A^t &= \{0, 0, 1\} \\ C_{A'}^t &= \{1, 0, 0\} \end{aligned} \right\} \delta(C_A^t) = \delta(C_{A'}^t)$$

et

$$\left. \begin{aligned} C_A^t &= \{0, 1, 1\} \\ C_{A'}^t &= \{1, 1, 0\} \end{aligned} \right\} \delta(C_A^t) = \delta(C_{A'}^t)$$

Grâce à ces deux conditions, le nombre de règles de transition se réduit à 32 règles légales.

Les résultats des automates cellulaires montrent qu'à partir des règles ou des programmes simples et de conditions initiales élémentaires, on peut obtenir des motifs très complexes. Certains motifs montrent des caractéristiques semblables à ceux qui sont produits par la nature. Par exemples, les motifs générés par la règle 18 de l'automate élémentaire, forment des triangles de tailles variées qui peuvent évoquer les motifs sur des coquilles de mollusques. L'autre modèle décrivant à merveille les motifs sur des coquilles est présenté par Meinhard [64] à travers son livre qui s'intitule « *Algorithmic Beauty of Sea Shells* ». Ce modèle est fondé sur une équation différentielle partielle qui produit un système activateur-inhibiteur :

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= s \left(\frac{a^2}{b} + b_a \right) - r_a a + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= s a^2 - r_b + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + b_b\end{aligned}$$

$a(x, t)$ étant la concentration auto-catalytique de l'activateur, $b(x, t)$ la concentration de l'antagoniste

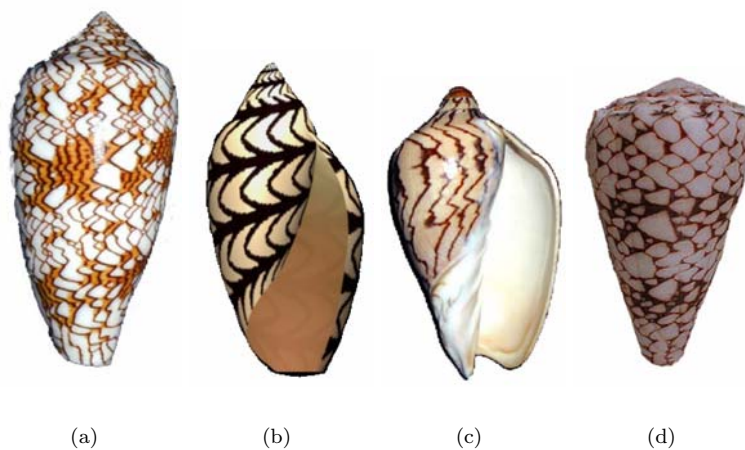


FIG. 4.7 – Les motifs sur les coquilles peuvent être générés par l'application de certaines règles de l'automate cellulaire élémentaire.

4.3 Matrice caractéristique des automates cellulaires

Ce paragraphe décrit les caractéristiques des automates cellulaires, en particulier les règles de transition en utilisant l'algèbre des « matrices caractéristiques » [17, 20].

Définition 11 Une règle est dite **additive** si elle est de la forme (XOR) suivante :

$$s_i^{(t+1)} = \sum_{j=-r}^r s_{i+j}^{(t)} \alpha_j$$

avec $\alpha_j \in \{0, 1\}$ pour $-r \leq j \leq r$. Le vecteur $(\alpha_j)_{j=-r}^{j=r}$ s'appelle le **type** de la règle.

Par cette définition, on dit alors que la règle 90 de l'automate cellulaire élémentaire est du type « 101 », et que la règle 150 est du type « 111 ».

Soit un automate cellulaire (\mathcal{A}) unidimensionnel, où s_i est la cellule par application d'une règle du type $(\alpha_j)_{j=-r}^{j=r}$, l'ensemble de l'application du type de règle sur toutes les cellules peut être décrit sous la forme d'une matrice, appelé la **matrice caractéristique circulaire** de l'automate cellulaire :

$$\begin{bmatrix} \alpha_0^1 & \alpha_1^1 & \dots & \alpha_{-2}^1 & \alpha_{-1}^1 \\ \alpha_{-1}^2 & \alpha_0^2 & \dots & \alpha_{-3}^2 & \alpha_{-2}^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \alpha_2^{n-1} & \alpha_3^{n-1} & \dots & \alpha_0^{n-1} & \alpha_1^{n-1} \\ \alpha_1^n & \alpha_2^n & \dots & \alpha_{-1}^n & \alpha_0^n \end{bmatrix}$$

Si l'ordre de voisinage de l'automate cellulaire est deux fois moindre que l'ensemble des cellules susceptibles d'évoluer, alors la matrice précédente devient la **matrice caractéristique à bord nul** de l'automate cellulaire :

$$\begin{bmatrix} \alpha_0^1 & \alpha_1^1 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_{-1}^2 & \alpha_0^2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_0^{n-1} & \alpha_1^{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_{-1}^n & \alpha_0^n \end{bmatrix}$$

Par exemple, l'application des règles 90, 150, 150, 150, 90 dont les types sont « 101 », « 111 », « 111 », « 111 », et « 101 » sur l'ensemble de cellules à évaluer donne la matrice caractéristique circulaire suivante :

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

et la matrice caractéristique à bord nul :

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

La fonction de transition pour un automate cellulaire élémentaire additif peut être exprimée à partir de la matrice caractéristique :

$$f_{t+1} = T f_t \quad (4.1)$$

et plus généralement,

$$f_{t+n} = T^n f_t \quad (4.2)$$

n étant le nombre d'applications successives sur l'ensemble des cellules susceptibles d'évoluer.

L'automate cellulaire élémentaire possède également le complément additif qui peut être aussi représenté sous la forme d'une matrice. On dit qu'une règle a un complément additif si elle est de la forme :

$$s_i^{(t+1)} = \overline{\sum_{j=-r}^r s_{i+j}^{(t)} \alpha_j} = \sum_{j=-r}^r s_{i+j}^{(t)} \alpha_j + 1 \quad (4.3)$$

où « $\overline{\quad}$ » est l'opération de module 2. Par exemple, la règle 195, qui est du type « $\overline{110}$ », peut être écrite sous la forme :

$$s_i^{(t+1)} = 1 + s_{i-1}^{(t)} + s_i^{(t)} \quad (4.4)$$

celle-ci étant le complément de la règle 60 du type « 110 » :

$$s_i^{(t+1)} = s_{i-1}^{(t)} + s_i^{(t)} \quad (4.5)$$

La fonction de transition du complément d'un automate cellulaire élémentaire additif peut être exprimée par :

$$f_{t+1} = \bar{T}f_t = F + Tf_t \quad (4.6)$$

où F est un vecteur de taille égale au nombre de cellules, et où tous les éléments de F sont égaux à 1.

Lemme 1 Soit \bar{T}^p l'application p fois de la transition \bar{T} pour un automate cellulaire élémentaire complétement, alors

$$\bar{T}^p f_t = (I + T + T^2 + \dots + T^{p-1}) F + T^p f_t \quad (4.7)$$

où T correspond à la matrice caractéristique non-complémentée de l'automate cellulaire.

Preuve :

$$\begin{aligned} \bar{T} \cdot f_t &= F + T \cdot f_t \\ \bar{T}^2 \cdot f_t &= F + T \cdot [F + T \cdot f_t] \\ &= (1 + T) \cdot F + T^2 \cdot f_t \end{aligned}$$

On peut alors déduire que :

$$\bar{T}^p f_t = (I + T + T^2 + \dots + T^{p-1}) F + T^p f_t \quad (4.8)$$

L'étude sur l'algèbre de matrices caractéristiques des automates cellulaires est intéressante, car elle montre que l'on peut faire un calcul inverse pour déterminer l'état et la configuration initiaux en connaissant l'état et la configuration présents. Évidemment, cette étude n'est valable que pour un automate cellulaire de type déterministe.

Après ce passage rapide sur l'étude théorique des automates cellulaires, nous allons voir maintenant, l'utilisation des automates cellulaires comme outil de modélisation de la croissance locale des stromatolithes.

4.4 La croissance locale des stromatolithes

Jusqu'à présent, l'origine de la formation des stromatolithes reste une question ouverte. Certains paléontologues pensent que la formation des stromatolithes est d'origine abiotique alors que d'autres pensent que l'origine est plutôt biotique. Dans le cas de la formation par les processus biotiques, la croissance de la structure laminée des stromatolithes est due pour l'essentiel à l'activité microbienne de tapis symbiotiques mêlant cyanobactéries et bactéries. Les procaryotes croissent de manière très rapide en fonction des conditions environnementales telles que la quantité de nutriment, la luminosité, l'oxygénation etc. et ainsi peuvent occuper l'ensemble d'une niche écologique. Cette prolifération se répète jusqu'à ce que les conditions environnementales deviennent critiques puis léthales. Certaines bactéries peuvent alors prendre des formes de résistance et s'enkystent dans des enveloppes polysaccharidiques en attendant des jours meilleurs.

Les cyanobactéries que l'on trouve dans la nature, comme celles, montrées par la figure de droite, ont la capacité de se minéraliser et de fixer du sédiment dans des tapis d'accrétion phototrope, formant ainsi des lamines stromatolithiques. Ces lamines correspondent à des lignes de croissance (figure 4.10), montrées par la variation des couleurs de l'édifice. Ces lignes représentent des variations dans la vitesse d'accrétion, liées par exemple à la saisonnalité, ou à toute variation des conditions environnementales. Quant à la morphologie de l'édifice, elle lie conditions d'environnementales au moment de la formation et écologie du tapis microbien. Nous pouvons alors dire que les morphologies des stromatolithes sont le résultat complexe de l'interaction entre monde vivant (écosystème microorganique) et monde minéral (son environnement). Cette interaction ne peut être décrite simplement ni par des équations mathématiques, ni par des lois physiques, ni même par des réactions chimiques. D'ailleurs, nous sommes incapables de dire si les facteurs environnementaux mesurés sont exhaustifs ou pertinents. Comment alors simuler de telles constructions organominérales ?.

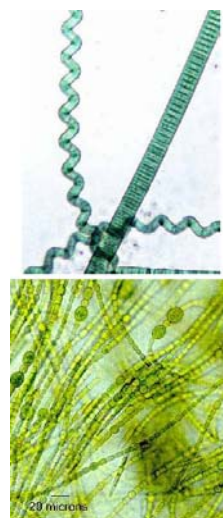


FIG. 4.8 – Deux « *Spirullina* » en tire-bouchon et une « *Oscillaria* » (haut). « *Nostoc* » ou crachat du diable (bas).

Inspirés par l'idée de Wolfram sur l'utilisation des automates cellulaires dans la simulation de phénomènes complexes à partir des règles simples, par exemple les phénomènes de turbulence (voir figure 4), nous décrirons alors la croissance des stromatolithes par des automates cellulaires à quatre états [70]. Du point de vue du mécanisme d'évolution, la croissance de tapis microbiens est similaire à celle des automates cellulaires. Il reste donc à déterminer les règles de transition. Dans cette partie, nous considérons que la formation des stromatolithes par l'activité organique est un processus « local », c'est-à-dire, que le processus de division cellulaire ne dépend que de l'état des cellules mères, et non pas des influences de la variation globale des conditions environnementales sur les cellules. Dans un premier temps, nous considérons que toutes les cellules évoluent par une application de la règle de transition de manière déterministe. Ensuite, nous établirons une règle de transition probabiliste, où chaque cellule ne possède pas la même capacité de division (reproduction), la capacité de division n'étant pas héréditaire. C'est-à-dire, une cellule active C au temps $t + 1$, résultat d'une application de la règle de transition δ^* sur la même cellule au temps t , évoluera à son tour avec une règle de transition qui n'est pas forcément celle de δ^* , mais avec une nouvelle règle construite aléatoirement. Quant au nombre de configurations, il reste inchangé au cours de l'évolution. Nous pouvons alors considérer que cet automate est un automate cellulaire probabiliste ou stochastique.

Comme la reproduction d'une bactérie est une reproduction asexuée (scissiparité) alors le voisinage de l'automate cellulaire que l'on utilise est d'ordre 1 (reproduction lente) ou d'ordre 2 (reproduction plus rapide) et dépend de l'état d'une seule cellule voisine. L'automate cellulaire que nous proposons pour décrire la croissance locale des stromatolithes est un ensemble de quatre états $C \in \{0, 1, 2, 3\}$:

- espace-vidé $\rightarrow 0$,
- vivant (actif) $\rightarrow 1$,
- repos $\rightarrow 2$, et
- mort (se fossilise) $\rightarrow 3$.

Après une reproduction, une cellule vivante meurt et se fossilise immédiatement. Les nouvelles cellules produites sont soit à l'état vivant (active) - dans ce cas elles sont prêtes à se reproduire donc se diviser -, soit à l'état de repos où elles attendent un certain temps pour

s'activer. La règle de transition que nous admettons est donc définie comme suit :

$$C_{x,y}^{t+1} \in \{1, 2, 3\} \text{ si :}$$

- $C_{x,y}^t = 0$, et
- Au moins une des conditions suivantes est satisfaite

$$\begin{aligned}
 & - C_{x+1,y-1}^t = 1, \text{ ou} \\
 & - C_{x,y-1}^t = 1, \text{ ou} \\
 & - C_{x-1,y-1}^t = 1, \text{ ou} \\
 & - C_{x,y-2}^t = 1.
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

Cette règle de transition montre de manière implicite que chaque cellule active possède une capacité de la reproduction égale à 4, et que toutes les cellules considérées comme les cellules phototropiques, reçoivent la même quantité de lumière dans le sens vertical y^- sans être influencées par la structure ou la configuration globale. Ceci implique une priorité de la croissance des cellules vers l'axe y^+ .

La cellule peut être à l'état de repos indiqué par une valeur « 2 », ou à l'état actif, indiqué par une valeur « 1 ». Le nombre de cellules filles (N_c) peut être une constante ; dans le cas étudié N_c est toujours égal à 4. Mais, il peut s'agir également d'un nombre aléatoire compris entre 1 et λ . Ce dernier est déterminé par la règle de transition.

La figure 4.10.b montre un résultat de simulation de croissance de stromatolithes en utilisant l'automate cellulaire de règle de transi-

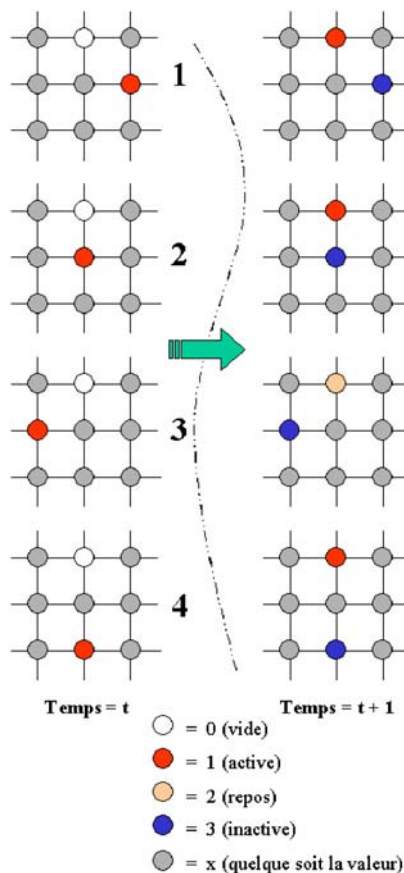
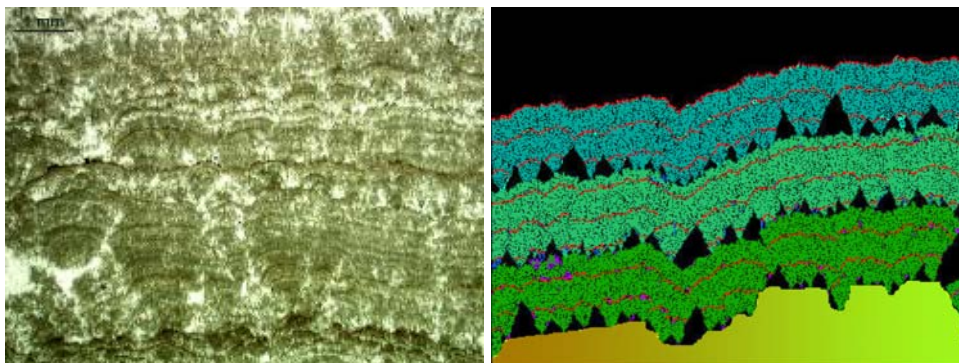


FIG. 4.9 – La représentation graphique de la règle de transition décrite par l'équation 4.9. Les états à $t + 1$ sont tirés aléatoirement à partir de la règle.

tion décrite par l'équation 4.9, avec la variable S égale à 1 (active). Dans cette simulation, nous avons trois périodes de croissance représentées par des couleurs différentes. La fin de chaque période représente un arrêt total de l'activité (léthargie) de toutes les cellules. Après un certain temps, une nouvelle croissance commence, par la ré-activation aléatoire de certaines cellules léthargiques se trouvant sur la surface de l'édifice. Les lignes quasi-continues (représentées par la couleur rouge) que l'on trouve sur l'édifice indiquent des repères temporels de la formation du stromatolithe. Ces lignes sont séparées par un intervalle presque constant dans le temps, montrant que la vitesse de la croissance sur l'ensemble des cellules est invariante et indépendante du temps et de l'espace. La morphologie locale en forme d'éventail est due à la règle de transition que l'on a établie au départ de la croissance. Cette morphologie montre une priorité de la croissance verticale et latérale.



(a) Stromatolithe pléistocène montrant différentes étapes de croissance. Les formes sont similaires à des éventails.

(b) Résultat de la croissance en utilisant l'automate cellulaire avec la règle de transition décrite par l'équation 4.9.

FIG. 4.10 – Simulation de la formation de stromatolithes par automate cellulaire selon la règle de transition décrite par l'équation 4.9.

Le second exemple d'automate cellulaire proposé pour simuler la croissance de stromatolithes possède également quatre états (vide, actif, au repos et mort), similaires au premier. En revanche, le nombre de règles de transition augmente de quatre à huit, et donne une croissance uniforme (dans toutes les directions). Cette règle s'exerce dans le voisinage de *Moore* et est décrite par l'équation ci-après :

$C_{x,y}^{t+1} \in \{1, 2, 3\}$ si :

- $C_{x,y}^t = 0$, et
 - Au moins une des conditions suivantes est satisfaite
 - $C_{x-1,y}^t = 1$, ou
 - $C_{x-1,y-1}^t = 1$, ou
 - $C_{x,y-1}^t = 1$, ou
 - $C_{x+1,y-1}^t = 1$, ou
 - $C_{x+1,y}^t = 1$, ou
 - $C_{x+1,y+1}^t = 1$, ou
 - $C_{x,y+1}^t = 1$, ou
 - $C_{x-1,y+1}^t = 1$.
- (4.10)

L'équation 4.10 décrit l'évolution d'une cellule par rapport aux cellules voisines à la distance 1. L'état d'une cellule au temps $t + 1$ ne dépend que de son état et de l'état d'une cellule voisine au temps t ; il peut être soit actif ($= 1$), soit au repos ($= 2$), ou déterminé de manière aléatoire. Cette équation peut être représentée sous la forme de tableaux d'évolution de l'automate cellulaire contenant huit règles de transition, montrées par la figure 4.12.

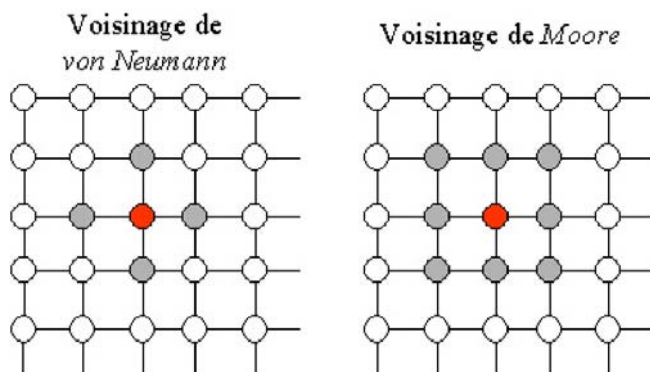


FIG. 4.11 – Voisinages d'ordre 1 de von Neumann et de Moore

La figure 4.13 (haut) montre la morphologie d'un stromatolithe de type « *flat-dome* » ainsi que le résultat de la simulation utilisant l'automate cellulaire avec les règles de transition décrites par l'équation 4.10 (figure 4.13 bas). La morphologie générale (figure 4.13) se retrouve dans la simulation de l'édifice par l'automate cellulaire (figure du bas), surtout en

début de croissance. Les lignes blanches sur le résultat de la simulation représentent des lignes-temps. L'intervalle des lignes-temps est constant et indique que la croissance sur toute la surface est uniforme avec une cinétique constante.

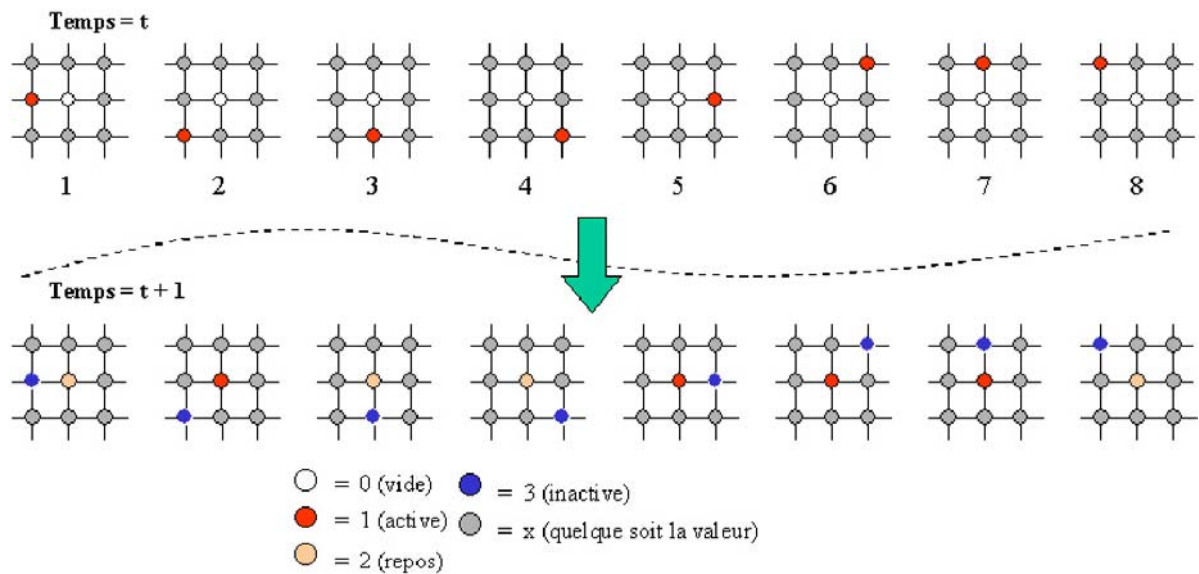


FIG. 4.12 – Processus d'évolution d'une cellule au temps $t+1$ à partir de son état et de l'état des cellules voisines au temps t selon des règles de transition décrites par l'équation 4.10. On trouve ainsi huit conditions de changement d'état de la cellule de départ.

Les deux modèles d'automates cellulaires que nous venons de présenter appartiennent aux automates dits probabilistes ou stochastiques du point de vue des états ; par exemple dans nos modèles, l'état d'une cellule après l'application d'une règle de transition peut être soit active, soit au repos, soit déterminé de manière aléatoire. En revanche, la configuration des voisinages aux alentours d'une cellule est déterminée au départ de la simulation, et reste inchangée tout au long de la croissance. On dit alors que l'automate possède un état final stochastique et une configuration déterministe.

A partir des automates cellulaires que nous avons présentés, nous pouvons construire de nouveaux automates cellulaires aux états finaux déterministes, et aux configurations stochastiques. Au début de la simulation, l'ensemble de la configuration de voisinage doit être définie. A chaque étape, les nouvelles règles de transition sont redéfinies à partir de sous-ensembles de configurations de voisinage et d'états déterministes. L'évolution des cellules par ces nou-

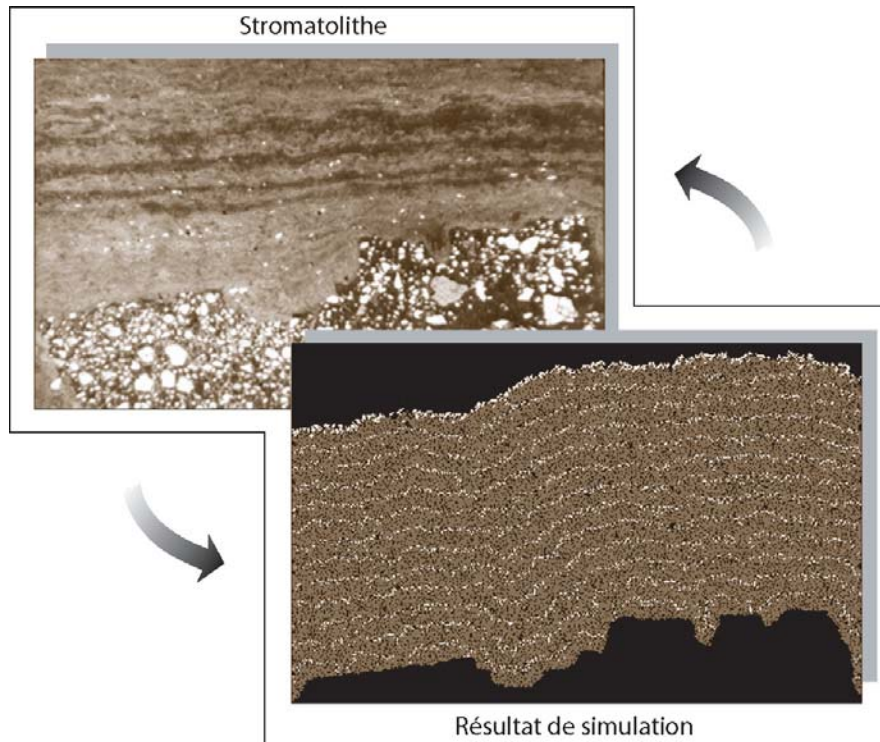
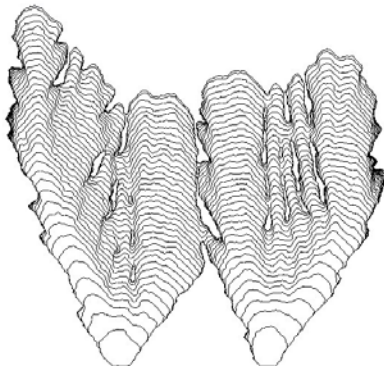


FIG. 4.13 – Simulation de la formation de stromatolithes par automate cellulaire selon la règle décrite par l'équation 4.10.

veaux automates cellulaires donnent des morphologies moins compactes, moins régulières et parfois on peut observer la présence de structures dendritiques. Quelques résultats de ces modifications des règles de simulations se trouvent dans l'annexe.

Modèle Stochastique DLA-CA



”La modélisation et la simulation sont des méthodes quantitatives fondamentales destinées à la compréhension de systèmes/phénomènes complexes et un complément à l’approche théorique et expérimentale.”

Nous présentons ici, un nouveau modèle stochastique de la simulation de croissance de surface appelé « **DLA-CA** » [72]; ce terme vient des mots « *Diffusion Limited Aggregation* » et « *Cellular Automata* ». Comme son nom l’indique, ce modèle est fondé sur le modèle d’agrégation par diffusion limitée et celui des automates cellulaires¹. Au départ, ce modèle a été dédié au domaine de la géologie et a été développé en particulier pour simuler la croissance de stromatolithes de morphologies diverses, qu’elles soient branchues, planes, en dôme, ou isopaques. Mais après une observation sur les résultats produits par le modèle, nous constatons qu’il est plus universel. Il semble capable de reproduire les caractéristiques essentielles de la croissance du type dendritique trouvée en physique, chimie et biologie : formes digitées instables durant la combustion [55], récifs formés par les squelettes des coraux [45, 46], etc. La richesse de morphologies produites est-elle une preuve de la capacité de ce modèle à répondre à la question de l’existence d’un modèle simple et général associé à un événement particulier, la croissance surfacique ?

¹Ces deux modèles sont présentées indépendamment dans les chapitres 3 et 4.

La source de croissance de l'édifice morphologique utilisée par le modèle **DLA-CA** résulte de la combinaison entre la croissance extrinsèque, par *random walking* de particules, et la croissance intrinsèque par division cellulaire de cellules actives. Ces deux types de croissance sont caractérisés chacun par deux paramètres. Les deux paramètres de la croissance extrinsèque sont liés au comportement propre des particules en mouvement et de leur interaction avec les particules elles-mêmes et l'édifice. Quant aux deux paramètres de la croissance intrinsèque, ils sont liés à l'état des cellules et leur loi d'évolution.

5.1 Croissance intrinsèque et extrinsèque

La croissance extrinsèque du modèle DLA-CA est guidée par le mouvement de particules libres dans l'espace selon le modèle d'agrégation par diffusion limitée (DLA). Quant à la croissance intrinsèque, elle repose sur le modèle d'évolution cellulaire, animée par l'automate cellulaire. Nous pouvons dire alors que le moteur de la croissance du modèle DLA-CA met en jeu des particules qui diffusent sur un réseau bi-dimensionnel selon un mouvement brownien (ou une marche aléatoire) et des règles d'évolution des cellules autour d'une particule (« active ») venant de se coller à l'édifice en formation.

Le mouvement brownien désigne le mouvement aléatoire d'une particule. Il est incessant, isotrope, et de plus se décrit comme un processus « *markovien* », c'est-à-dire que le mouvement à venir est indépendant du mouvement passé. L'idée de l'utilisation du mouvement brownien dans ce modèle ne vient pas seulement du fait qu'il est le fondement du modèle de DLA, mais aussi du fait de son existence généralisée dans la nature. Soulignons que le mouvement brownien décrit également l'agitation de particules (molécules), qui en thermodynamique, explique les variations de température. La température est un facteur essentiel de la dynamique organique, incluant les cyanobactéries qui sont les acteurs de la formation des stromatolithes. Une propriété statistique intéressante du mouvement brownien d'une particule est la moyenne des positions de la particule centrée sur sa position initiale. Mathématiquement, nous considérons que la moyenne du déplacement est nulle ; en revanche la distance euclidienne entre la position initiale (N) et la position à un instant donné de la particule (x) augmente linéairement en fonction du temps, selon la loi de probabilité pour le déplacement d'une particule dans un espace à une dimension suivante (voir l'annexe « Probabilités associées à un déplacement brownien » [10]) :

$$P_t(x) = \frac{1}{2N} \sqrt{\frac{2}{\pi N}} e^{-\frac{x^2}{2N}}$$

où N est le nombre de mouvements de la particule et x , la position de la particule au temps t .

Nous avons déjà décrit le modèle d'agrégation par diffusion limitée (DLA ; voir chapitre 3), ainsi que ses extensions telles que le facteur de « *Sticking probability* », la probabilité de mouvement des particules, la longueur du chemin de parcours des particules, la quantité de particules, et la capacité de relaxation. En combinant ces extensions, le modèle d'agrégation par diffusion limitée donne une grande panoplie de morphologies à l'édifice formé. Ces morphologies possèdent des dimensions fractales très variées, avec un ensemble de compacités étendu. Le modèle d'agrégation par diffusion limitée est utilisé comme le facteur de croissance extrinsèque, car il représente en quelque sorte le flux des substances externes qui participent à la formation des édifices. Celui-ci dépend de la structure globale de l'édifice, c'est-à-dire, que chaque partie de l'édifice ne possède pas la même probabilité de croissance ; les parties externes sont privilégiées par rapport aux parties internes, ce qui donne un avantage à la formation de l'édifice sous la forme digitée (dendrites), et une augmentation de la rugosité de surface au cours du temps.

Le modèle d'automate cellulaire a été décrit dans le chapitre 4 de manière suffisamment complète, reprenant son histoire, ses caractéristiques et son utilisation comme modèle de croissance des stromatolithes. Dans ce chapitre, nous re-utilisons les mêmes types d'automates cellulaires présentés dans la dernière partie du chapitre 4 comme modèle de la croissance extrinsèque. Ces automates seront présentés sous la forme d'un *masque d'évolution* qui décrit la position relative entre une cellule active au temps t et les autres cellules, auxquelles elle contribue à leurs changement d'états au temps $t + 1$. La croissance donnée par le modèle d'automate cellulaire est de type « local », c'est-à-dire qu'elle ne dépend pas de la structure globale de l'édifice, mais des règles de transition qui sont déterminées de manière locale selon l'état d'une cellule et celui de ses voisines. Contrairement au modèle d'agrégation par diffusion limitée, la croissance produite par ce modèle donne une croissance uniforme ; toute la surface de l'édifice croît avec une probabilité égale², ce qui donne une rugosité constante au cours de la formation de l'édifice.

²Si toutes les cellules se trouvant sur la surface sont actives.

En ajoutant le modèle d'automate cellulaire au modèle d'agrégation par diffusion limitée, nous obtenons des résultats plus riches en diversité au niveau des morphologies de l'édifice. Alors nous pouvons dire, en termes d'automate cellulaire, que le modèle automate cellulaire porte ou donne de l'information au modèle d'agrégation par diffusion limitée, car il arrive à modifier le comportement du modèle et les résultats produits.

Au niveau des extensions (paramètres) du modèle **DLA-CA**, nous présenterons quatre paramètres : deux paramètres liés à la croissance externe de l'édifice et deux autres liés à la croissance interne. Toutefois ces nouveaux quatre paramètres peuvent être complétés par les autres paramètres présentés dans les chapitres 3 et 4.

5.2 Paramètres du modèle

Commençons tout d'abord avec le processus de croissance induit par les facteurs externes, décrits selon le modèle d'agrégation par diffusion limitée (**DLA**). A partir du modèle classique (standard) de Witten et Sander, nous ajoutons deux nouveaux paramètres agissant sur les particules libres en mouvement, le premier étant la *distance d'attraction*, et le second, la *distance de stabilité* par rapport à l'édifice en construction.

Ensuite, le processus de croissance interne est introduit en reposant sur le modèle d'automate cellulaire (**CA**). Il nécessite une nouvelle notion, celle de *masque d'évolution* qui réunit la *configuration des règles de transition* et le *nombre de cellules*, ce qui est, ni plus ni moins, que la représentation implicite du nombre de règles de transition utilisées.

5.2.1 Distance d'attraction

Le modèle d'agrégation par diffusion limitée standard est fondé sur le mouvement des particules dit « à pas unitaire », c'est-à-dire qu'à chaque coup d'horloge, une particule se déplace d'un site à l'autre dans un voisinage d'ordre 1, selon huit ou quatre directions en deux dimensions. Le déplacement d'une particule est décrit dans le chapitre précédent par deux composantes : la *direction* (vecteur unitaire) et la *longueur* de déplacement, et il peut être

représenté par une matrice :

$$d = \mathbf{a} \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{v}_1}{|\mathbf{v}|} & \cdots & \frac{\mathbf{v}_i}{|\mathbf{v}|} & \cdots & \frac{\mathbf{v}_n}{|\mathbf{v}|} \end{bmatrix}^T$$

où n est la dimension du réseau.

Pour faciliter l'écriture du déplacement, nous utiliserons par la suite la représentation indiciaire sous la forme suivante :

$$\vec{d}_{(j,k)}; j \in [1, p]; k \in [1, \infty[\quad (5.1)$$

où j est l'indice du vecteur de déplacement dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, à partir de l'« est », k , le module du vecteur de déplacement, et p , le nombre de directions possibles.

Selon la représentation indiciaire, l'ensemble des déplacements unitaires d'une particule selon les huit directions peut être écrit sous la forme :

$$\mathcal{D} = \left\{ \vec{d}_{(1,1)}, \vec{d}_{(2,1)}, \vec{d}_{(3,1)}, \vec{d}_{(4,1)}, \vec{d}_{(5,1)}, \vec{d}_{(6,1)}, \vec{d}_{(7,1)}, \vec{d}_{(8,1)} \right\}$$

De manière plus générale, nous pouvons écrire :

$$\mathcal{D} = \left\{ \vec{d}_{(j,1)} \right\}; j \in [1 \dots p]; p = \text{nombre de directions}. \quad (5.2)$$

Le déplacement unitaire du point « A » au point « B » selon le vecteur j est noté :

$$\vec{d}_{(j,1)}^{(A,B)}$$

Une particule se déplaçant du point initial jusqu'au point final, construira un chemin de parcours, qui peut être représenté par une liste de déplacements. Cette liste est construite à partir de l'ensemble de déplacement. Supposons qu'une particule effectue 8 déplacements unitaires d'un point A au point B selon les directions 2, 6, 5, 1, 3, 1, 6, et 3, alors le chemin de parcours $\mathbf{P}(A, B)$ de cette particule peut être décrit sous la forme de la *liste ordonnée* suivante :

$$\mathbf{P}(A, B) = \left\{ \vec{d}_{(2,1)}, \vec{d}_{(6,1)}, \vec{d}_{(5,1)}, \vec{d}_{(1,1)}, \vec{d}_{(3,1)}, \vec{d}_{(1,1)}, \vec{d}_{(6,1)}, \vec{d}_{(3,1)} \right\}$$

Le chemin de parcours est défini formellement par :

Définition 12 (Chemin de parcours) *Le chemin de parcours d'une particule du point « A » au point « B » noté $P(A, B)$ est une suite ou une liste ordonnée des déplacements de la particule, telle que :*

$$P(A, B) = \left\{ \vec{d}_{(j,1)}^{A,k_0}, \vec{d}_{(j,1)}^{k_0,k_1}, \dots, \vec{d}_{(j,1)}^{k_i,k_{i+1}}, \dots, \vec{d}_{(j,1)}^{k_{N_v-2},k_{N_v-1}}, \vec{d}_{(j,1)}^{k_{N_v-1},B} \right\}; \quad (5.3)$$

$$i \in [0 \dots N_v - 1]; N_v \geq 1$$

où N_v est le nombre de sites visités avant d'arriver au point final.

La longueur du chemin de parcours peut être déduite à partir de la liste de déplacement ; par exemple, si un ensemble de déplacements d'une particule est constitué par des déplacements unitaires, alors la longueur du chemin de parcours est égale au nombre d'éléments de la liste de déplacements. De manière plus générale, la longueur du chemin de parcours est définie comme :

Définition 13 (Longueur du chemin de parcours) *La longueur de parcours (l_p) d'une particule est la somme totale du module des déplacements de la particule ($|\vec{d}_{(i,j)}|$) depuis la position initiale jusqu'à la position finale, soit :*

$$l_p = \sum_{i=1}^{N_d} |\vec{d}_{i(j,k)}|; j \in [1 \dots p]; k \in [1, \infty[\quad (5.4)$$

N_d est le **nombre de déplacements**.

A partir des définitions 12 et 13, on peut déduire facilement la relation entre le nombre de sites visités (N_v) et le nombre de déplacements (N_d) pour les déplacements unitaires :

$$N_v = N_d - 1$$

Définition 14 (Distance de déplacement) La distance de déplacement (d_d) d'une particule d'un point A au point B est définie par :

$$d_d(A, B) = |x_A - x_B| + |y_A - y_B|$$

Cette distance est connue sous le nom de « *city block distance* » ou la distance de deux points dans un réseau carré. Selon les définitions de la longueur parcourue et de la distance de déplacement, nous constatons que :

Lemme 2 Pour tous les mouvements de particules, on aura toujours

$$l_p \geq d_d$$

Selon les valeurs de la longueur du chemin de parcours (d_d) et la valeur de la distance de déplacement (l_p), nous pouvons définir trois types de trajectoires :

- trajectoire **balistique**, si $d_d \rightarrow l_p$,
- trajectoire **semi-balistique**, si $d_d \rightarrow \frac{l_p}{2}$.
- trajectoire **à attracteur initial**, si $d_d \rightarrow 0$.

Une particule suit la trajectoire *balistique* si elle s'éloigne très rapidement de sa position initiale, ou, la distance de déplacement augmente en fonction du nombre de déplacements. En revanche, si elle fait des déplacements autour de sa position initiale, nous considérons alors qu'elle suit une trajectoire *à attracteur initial*.

Définition 15 (Coefficient du mouvement semi-balistique) Le coefficient du mouvement semi-balistique (ψ) est le rapport entre la distance de déplacement maximal $(d_d)_{max}$ et la longueur du chemin de parcours (l_p) décrit par :

$$\psi = 1 - 2 \left| \frac{(d_d)_{max}}{l_p} - \frac{1}{2} \right| \quad (5.5)$$

Si ψ tend vers 0, alors le mouvement de la particule est, soit un mouvement de type balistique, soit un mouvement de type attracteur initial, et dépend alors du rapport $\frac{(d_d)_{max}}{l_p}$.

En revanche, si ψ tend vers 1, le mouvement évolue alors vers un mouvement de type semi-balistique, c'est-à-dire que le *coefficient de transport*³ (p) est égal à :

$$\frac{1+p}{4+p} = \frac{1}{2} \Rightarrow p = 2.$$

En raison de l'optimisation du temps de calcul durant la simulation, nous utiliserons le mouvement de particules de type semi-balistique ($\psi = 1$) vers l'édifice. Ce mouvement assure à la fois la rapidité de la croissance de l'édifice et la marche aléatoire des particules. De plus, la présence de la zone d'attraction (que nous allons voir tout de suite) créée par l'ensemble des vecteurs d'attraction, diminue l'influence du type de mouvement des particules durant la formation de l'édifice. Ceci est expliqué par le fait que la rugosité de la zone d'attraction est moins importante que celle de l'édifice. Donc, la probabilité de croissance sur une partie de l'édifice ne dépend pas trop du type de mouvement des particules, mais plutôt de la position initiale des particules en mouvement.

La figure 5.1 montre une zone d'attraction enveloppant un amas, la frontière de la zone d'attraction étant formée par l'ensemble des vecteurs définissant la *distance d'attraction* (d_A). Dans le cas réel, ces distances ne sont pas identiques sur toute la surface de l'amas ou de l'objet, mais dépendent de la forme de l'objet et la nature de la force. Dans ce modèle, nous considérons que la frontière de la zone d'attraction est formée par des distances d'attraction de taille identique, ce qui donne une zone d'attraction équi-potentielle. De plus, nous considérons que la force d'attraction est nulle à l'extérieur et égale à un à l'intérieur de la zone d'attraction.

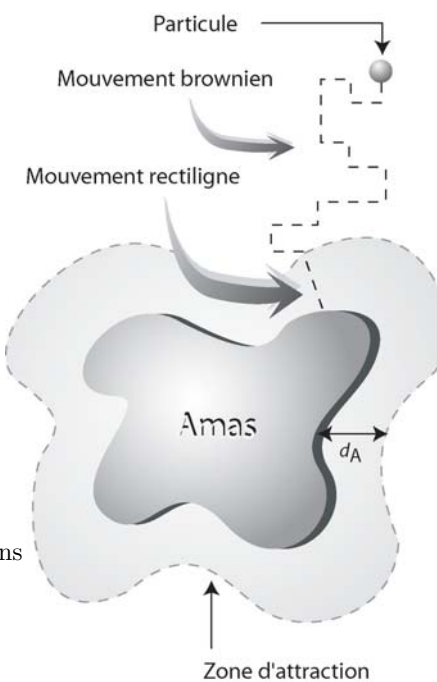


FIG. 5.1 – Le mouvement d'une particule sous l'influence d'une zone d'attraction.

La présence de la zone d'attraction provoque un changement de régime (« *crossover* ») au

³Ce facteur est décrit par l'équation 3.7 à la page 42.

niveau du mouvement des particules. Au départ, toutes les particules se déplacent selon le mouvement semi-balistique à l'extérieur de la zone d'attraction. En franchissant la barrière de la zone d'attraction, les particules sont attirées par la partie de l'amas (objet) la plus proche, et elles suivent une trajectoire balistique (mouvement rectiligne) jusqu'à l'amas.

Le parcours des particules dans ce modèle est une liste ordonnée des mouvements semi-balistiques et des mouvements rectilignes sous influence de la force d'attraction. Cette liste peut être décrite formellement de la manière suivante :

$$D = \left\{ (d_{(j,1)})^{N_d-1}, (d_{(j,d_A)}) \right\}$$

$$j \in [1 \dots p];$$

$$d_A = \text{distance d'attraction};$$

$$N_d = \text{nombre de déplacements.}$$

Le parcours d'une particule peut être décrit sous la forme d'un « *chemin positif* » [71] dans le plan $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$, avec l'axe horizontal (x) représentant le nombre de déplacements, et l'axe vertical (y) représentant la distance de déplacement (« *city block distance* ») de la particule à partir de la position initiale. Toute la zone des déplacements probable d'une particule se trouve forcément dans le quadrant (x^+, y^+) et plus exactement dans la région $0 \leq y \leq x; x \in \mathbb{N}^*$. Si une particule effectue un mouvement semi-balistique, alors le chemin qu'elle trace dans le plan $\mathbb{N} \times \mathbb{N}$ est une courbe oscillante sur la ligne $y = \frac{1}{2}x$. En revanche, si elle effectue un mouvement brownien, le chemin qu'elle trace, au moment où elle revient au point de départ, est un *chemin de Motzkin*.

Lemme 3 *Le nombre de chemins positifs construits par une particule effectuant n mouvements browniens selon 4 directions en $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ est égale à c_n , avec*

$$c_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n}$$

Nous pouvons alors considérer que le mouvement brownien d'une particule, du point de vue

du *code de direction de mouvement* (Fig. 5.2) et de *chemin positif*, est un *objet combinatoire*, donc il peut être listé exhaustivement.

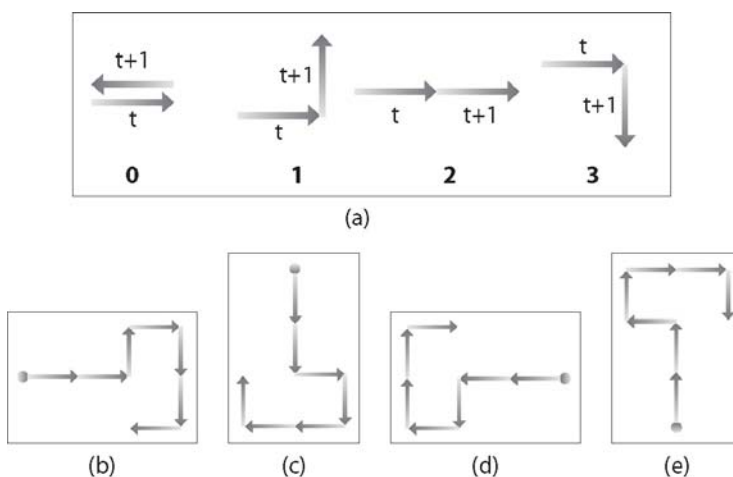


FIG. 5.2 – Ces quatre mouvements possèdent le même code de direction de mouvement, 213323, et le même chemin positif. (a) définition de la règle. (b,c,d,e) quatre chemins positifs identiques.

La présence de la force d'attraction exercée par l'amas (l'édifice) induit également la présence de zones (barrières) de protection sur une certaine partie de l'édifice. La taille de la zone de protection dépend étroitement à la morphologie de l'édifice et de la grandeur de la force d'attraction. Plus la surface est rugueuse, plus le nombre et la taille des zones de protection sont grands.

Également, plus la force est grande, plus la zone de protection est grande. La figure 5.3 montre la zone d'attraction formée par les vecteurs d'attraction, ainsi que la présence d'une zone de protection limitée par une certaine partie de la surface et par deux vecteurs d'attraction.

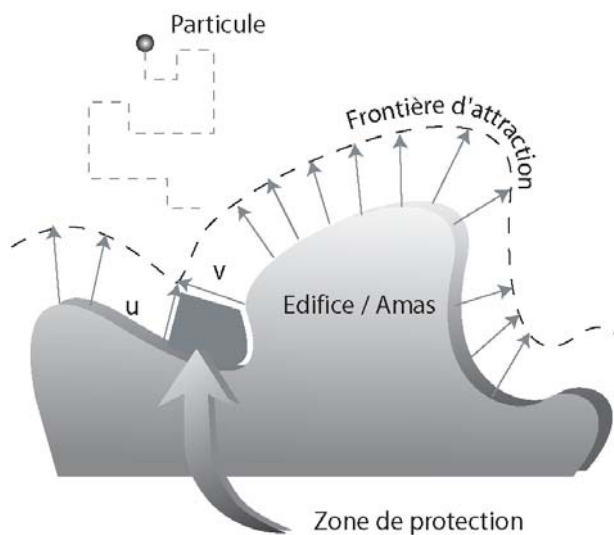


FIG. 5.3 – Le rencontre entre deux vecteurs d'attraction forme une barrière de protection pour la région qui se trouve entre ces deux vecteurs.

Dans la construction des algorithmes, la rapidité du temps de traitement et la compacité des instructions sont des points essentiels. Pour construire l'algorithme d'attraction des particules, il y a deux approches que l'on peut admettre; et suivant le nombre de particules en mouvement, une approche est plus efficace que l'autre. Conformément au modèle de DLA-CA, la zone d'attraction est formée par la force (distance) d'attraction selon la morphologie de la surface de l'amas. Ceci implique la mise à jour de la zone d'attraction à chaque changement de la morphologie de l'amas (à chaque nouveau collage de particule). Dans le cas de l'utilisation des multi-particules (MBDLA) en mouvement, il est peut être plus judicieux de calculer la position de la zone d'attraction à partir de la surface de l'amas. En revanche, si on utilise qu'une seule particule (dans le cas du modèle de DLA), il est plus justifié de calculer l'attraction vers l'amas à partir de la particule en mouvement, car le nombre de particules est beaucoup plus petit que le nombre de particules agrégées sur la surface de l'amas. L'algorithme ci-dessous décrit la procédure de calcul d'attraction à partir de la particule en mouvement.

```

FONCTION attraction (v_distance_attraction,v_particule,v_reseau)
{
  Visiter tous les site de rayon v_distance_attraction, à partir
  du point v_particule jusqu'à la rencontre de l'amas;
  SI(v_particule rencontre l'amas)
    La position de v_particule est sur la surface de l'amas;
  SINON
    La position v_particule ne change pas;
}

```

Lors de la simulation, l'attribution de valeurs à la distance d'attraction (d_a) obéit à certaines conditions. Soit un réseau de taille $m \times n$ dont la hauteur maximale de la surface résultante souhaitée est égale à h , alors, l'intervalle de la variable d_a est décrit par la relation suivante :

$$0 \leq d_a \leq m - h$$

5.2.2 Distance de stabilité

Dans le chapitre 2, nous avons présenté le modèle de croissance du type « *Random Deposition* » et « *Random Deposition* » avec *relaxation*. La différence entre ces deux modèles est la capacité de relaxation des particules au moment du dépôt. Cette relaxation peut être vue comme un événement produit par les conditions de stabilité du milieu. La condition de stabilité dans le modèle de « *Random Deposition* » avec *relaxation* est la force de gravité exercée sur les particules. Ceci implique qu'une particule venant au contact de l'édifice, cherche l'endroit le plus bas localement, dans un certain rayon imposé, pour se coller ou se déposer.

Selon le modèle de la croissance d'agrégats par DLA de Witten et Sander, une particule venant au contact de l'amas se colle immédiatement au point de contact de manière irréversible. La morphologie produite par ce modèle est une agrégation de particules sous la forme de dendrites avec une dimension fractale voisine de 1.71. C'est de cette façon que le modèle DLA-AC se comporte au moment du contact avec l'amas. Mais dans le modèle DLA-CA, nous ajoutons un facteur de stabilité des particules, ce facteur induisant un collage non immédiat au moment du contact avec l'amas. Une particule venant en contact ne se colle pas forcément à l'endroit du contact ; elle cherche l'endroit le plus stable. Pour déterminer quel endroit est le plus stable pour que la particule puisse s'agréger, nous devons déterminer la règle de stabilité. Pour des raisons d'optimisation en temps de calcul, les règles de stabilité seront déterminées de manière locale par les procédures suivantes :

- chaque particule possède une *distance de stabilité* (d_s) qui représente le rayon dans lequel elle se déplace sur la surface de l'amas pour trouver un endroit stable ; l'intervalle de d_s est défini par :

$$0 \leq d_s \leq \frac{\max(m, n)}{2}$$

où m est la hauteur du réseau, et n est la largeur du réseau ;

- un site est considéré comme le plus stable quand la force d'attraction par l'amas sur ce site est la plus grande. Si nous considérons que chaque unité (particules agrégées) de l'amas possède une force d'attraction, alors le site le plus stable est le site ayant le

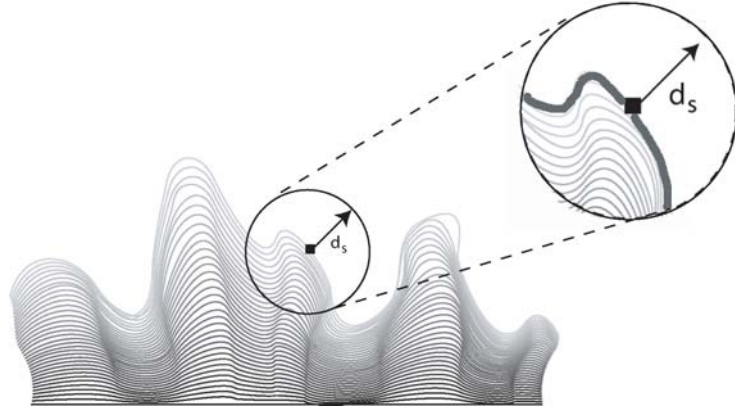


FIG. 5.4 – Une particule venant au contact de l'amas possède une distance de stabilité d_s .

maximum de contacts avec l'amas⁴ (le maximum de *poinds de stabilité*; Fig. 5.5);

- si on considère que la gravité joue également un rôle dans les conditions de stabilité du modèle DLA-CA, alors deux sites ayant un même poids de stabilité, seront départagés par leur position par rapport à l'axe ox (l'altitude 0).

L'algorithme suivant traduit le processus de calcul de la stabilité des particules décrite par les trois conditions que nous venons de présenter. En connaissant la distance (rayon) de stabilité, la position de la particule venant au contact à l'amas, et la configuration du réseau (la morphologie de l'amas), nous pouvons déterminer la position de l'endroit (le site) le plus stable sur la surface de l'amas.

```

FONCTION Stablit (v_rayon,v_particule,v_reseau)
{
  POUR(v_dr de 0   v_rayon){
    POUR(v_angle de 0   360){
      Calculer les coordonn es des sites   examiner(SE)
      en fonction de v_dr, v_angle et v_particule;
      SI(SE se trouve dans le v_reseau et VIDE){
        Calculer le nombre de voisins de type "amas" (NV);
        Un site est stable si NV est maximal. Dans le
        cas de deux sites ayant le m me NV, c'est l'ordonn e
        qui d termine, sinon la d cision est al atoire;
      }
    }
  }
}

```

⁴Le maximum de voisins de type « amas » particules agr g es.

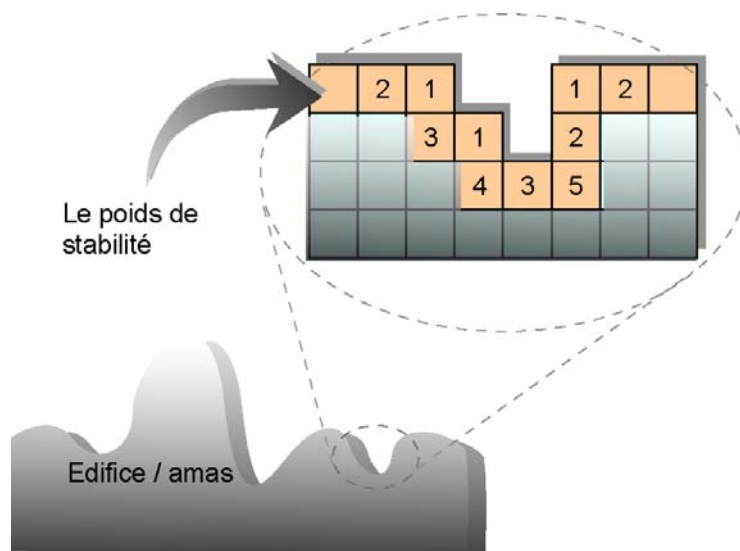


FIG. 5.5 – Les poids de stabilité calculés selon les nombres de sites voisins de type « amas ».

Après avoir vu les deux paramètres (extensions) liés à l'interaction entre les particules en mouvement et l'amas, c'est-à-dire les paramètres liés à la croissance externe du modèle, nous allons aborder les deux autres paramètres de croissance interne, décrits par la méthode des automates cellulaires.

5.2.3 Masque de croissance

L'évolution d'état des cellules suivant la méthode des automates cellulaires dépend des règles de transition (règles d'évolution) et de l'état des cellules. Ces deux éléments sont définis par un nombre fini au début de l'évolution des cellules.

Le méthode d'évolution des cellules utilisée ici est fondée sur les automates cellulaires et permet de réunir toutes les règles de transition en une seule règle générale appelée « masque de croissance ». Toutefois, dans la méthode des automates, il n'est pas toujours possible d'arriver à grouper toutes les règles de transition en une seule règle générale. Notre modèle en revanche permet de grouper toutes les règles de transition, car l'évolution des cellules au temps « $t + 1$ » ne dépend que d'une seule cellule active (voisinage 0) au temps t .

Comme pour l'automate cellulaire, le masque de croissance peut être caractérisé par deux

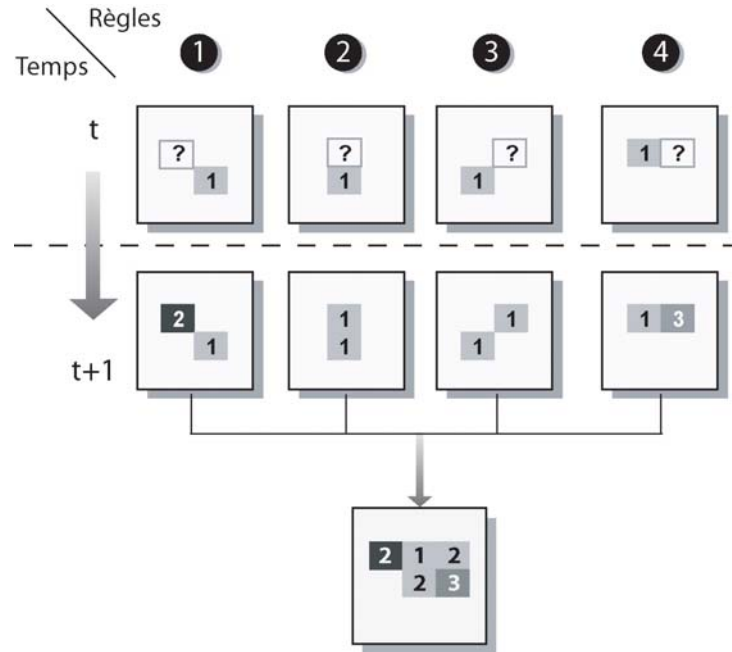


FIG. 5.6 – Construction du masque de croissance déterministe à partir des règles de transition.

types d'évolution : une évolution de type *déterministe* et une de type *probabiliste*. Ces deux types d'évolution se distinguent par l'attribution de l'état d'une cellule au temps $t + 1$ en fonction de la configuration et l'état des cellules au temps t . Si l'état est déterminé de manière exacte selon la configuration des cellules, alors le masque est considéré comme un masque déterministe (Fig. 5.6). En revanche, si l'état de la cellule au temps t est déterminé par un tirage aléatoire dans sur un ensemble d'états possibles, alors le masque de croissance est dit probabiliste. La figure 5.7 montre la construction d'un masque probabiliste avec un ensemble d'états à trois éléments.

Les figures 5.6 et 5.7 possèdent chacune quatre règles de transition. Avec ces quatre règles de transition, nous construisons un masque de croissance des cellules selon l'équation

$$\left. \begin{aligned} C_{x-1,y+1}^{t+1} &= 2, \\ C_{x,y+1}^{t+1} &= 1, \\ C_{x+1,y+1}^{t+1} &= 1, \\ C_{x+1,y}^{t+1} &= 3 \end{aligned} \right\} \text{si } C_{x,y}^t = 1 \quad (5.6)$$

pour la figure 5.6, et selon l'équation

$$C_{x+i,y+1}^{t+1} = s, C_{x+1,y}^{t+1} = s; \text{ si } C_{x,y}^t = 1, s \in \{1, 2, 3\}, i \in \{-1, 0, 1\} \quad (5.7)$$

pour la figure 5.7

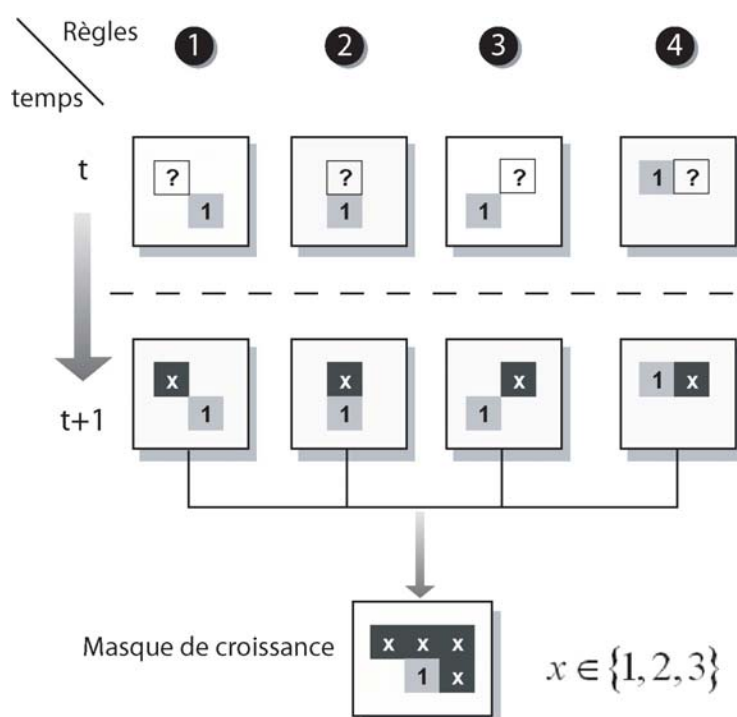


FIG. 5.7 – Construction du masque de croissance probabiliste à partir des règles de transition.

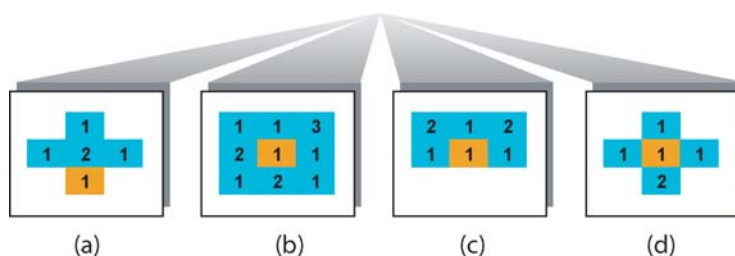


FIG. 5.8 – Quatre exemple de configuration de règles de transition. (a) et (d) contiennent 4 règles de transition, (b) contient 8 règles, et (c) 5 règles.

Configuration des règles de transition (c_r)

La configuration des règles de transition détermine la position des sites (cellules) après évolution d'un site (ou cellule) actif, et l'état des cellules après évolution, qu'elles soient déterministes ou aléatoires (probabilistes).

Nombre de cellules (n_c)

Le nombre de cellules représente de manière implicite le nombre de règles de transition utilisées dans le modèle. Le nombre de règles de transition peut être défini de manière déterministe ou probabiliste. Dans le cas d'un nombre de règles de transition probabiliste, nous établissons au départ, un ensemble de règles à appliquer (\mathcal{D}_r contenant n règles); ensuite au moment de l'application des règles de transition, nous n'utilisons que k règles ($k \leq n$), prises aléatoirement sur l'ensemble \mathcal{D}_r . Le nombre de types de masques peut être construit à partir d'un masque de n règles de transition (cellules) et est défini par :

$$s_n = \sum_{i=0}^n C_i^n$$

La probabilité de construire des masques de m cellules à partir d'un masque principal de n cellules ($m \leq n$) est donnée par :

$$p(m, n) = \frac{C_m^n}{\sum_{i=0}^n C_i^n}$$

5.2.4 La variation des paramètres et la morphologie

Le modèle de croissance présenté ici repose essentiellement sur quatre paramètres : la distance d'attraction (d_a), la distance de stabilité (d_s), la configuration des règles de transition

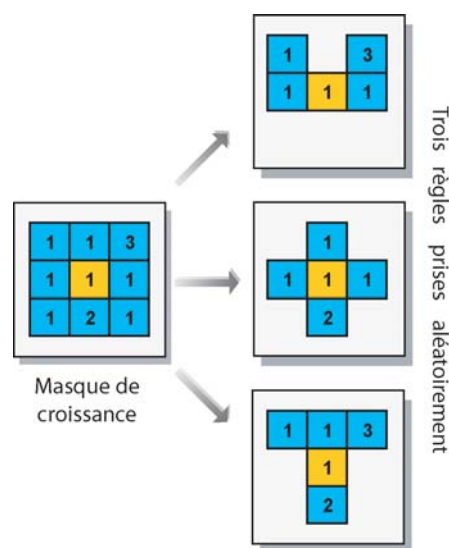


FIG. 5.9 – Le masque de croissance est formé de 8 règles de transition. Trois types de masque sur 255 possibles sont utilisés dans l'évolution des cellules.

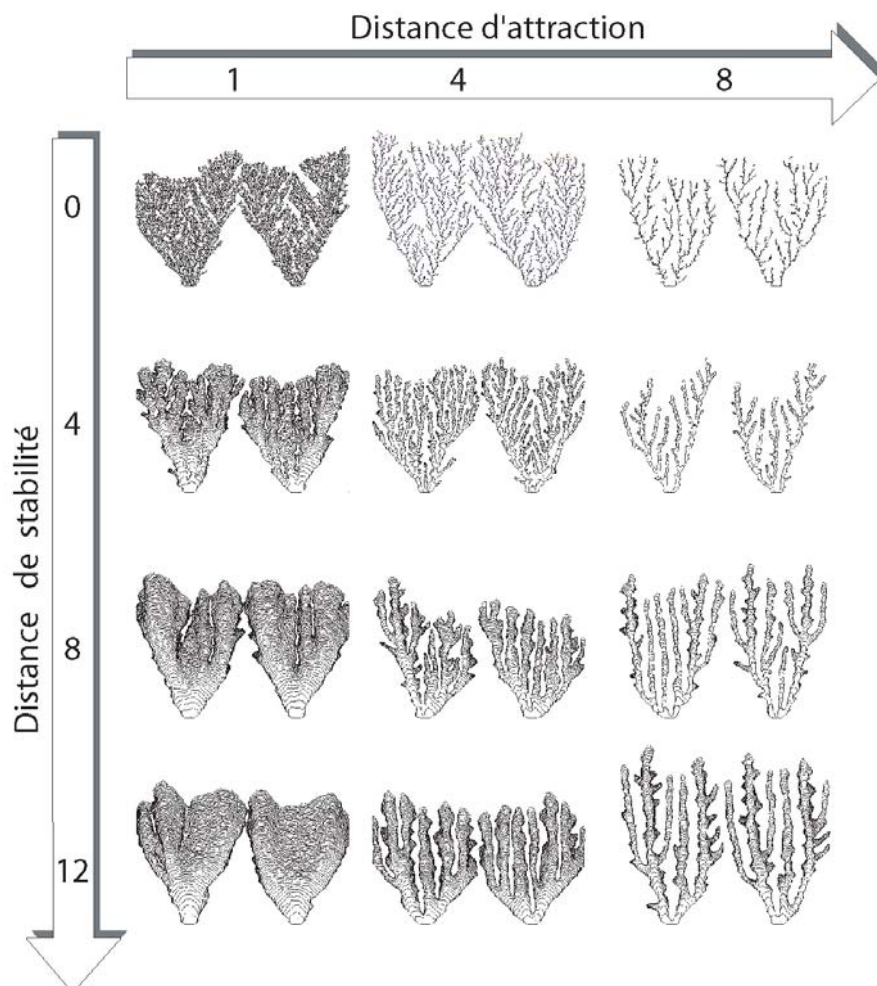


FIG. 5.10 – Nomenclature des morphologies de l’amas selon la distance d’attraction et la distance de stabilité.

(c_r) et le nombre de cellules (n_c) .

Chaque paramètre joue un rôle fondamental dans la formation de l’amas. Néanmoins, il se trouve que deux variables peuvent jouer le même rôle pendant la croissance de l’amas : par exemple, l’agrandissement de la taille des branches peut être due à l’augmentation de la distance de stabilité, tout comme à la croissance du nombre de nouvelles cellules. Toutefois, la variation dans la taille des branches produites par ces deux paramètres ne suit pas la même morphologie : l’augmentation de la distance de stabilité donne des branches plus lisses et plus compactes par rapport à celles produites par l’augmentation du nombre de nouvelles cellules.

Quelles sont par conséquent les influences des quatre paramètres lors de la construction de l'amas, durant la phase de mouvement des particules (modèle du type DLA) comme durant celle de division des cellules (modèle du type automate cellulaire)? Le premier paramètre retenu décrit la distance d'attraction (d_a) des particules par l'amas. L'augmentation de cette distance provoque une augmentation de l'écart entre deux branches de l'amas de façon linéaire. Elle induit également une augmentation de la taille et du nombre des cavités de la structure, ce qui implique une formation structurale poreuse, moins compacte. L'augmentation de la distance d'attraction lors de la formation de l'amas tend à construire des morphologies de type colonnette, avec un écart entre deux colonnes proportionnel à la distance d'attraction. La limite formée par l'ensemble des points correspondant à la distance d'attraction implique la présence d'une zone de protection entre deux branches vers leur base : cette zone est inhibée pour la croissance.

Le second paramètre décrit la distance de stabilité (d_s) de la particule qui vient au contact de l'amas. L'allongement de cette distance entraîne une diminution du nombre de cavités dans la structure de l'amas, impliquant la formation d'une structure plus compacte. Il conduit également à une augmentation de la taille des branches et à une diminution du nombre de branches.

Enfin les troisième et quatrième paramètres (n_c et c_r) qui relèvent de la partie automate cellulaire du modèle, conduisent à une augmentation de l'effet branchu (ou dendritique) sur la structure de l'amas, et à un élargissement de l'épaisseur des branches produites. La croissance suivant le modèle de l'automate cellulaire peut être considérée comme une croissance locale : en effet, l'apparition d'une nouvelle cellule sur l'amas dépend du nombre et de la configuration des cellules voisines (c_r) qui forment ce que l'on appelle la règle de transition.

5.2.5 Sédimentation

La simulation du dépôt de sédiments est un problème assez complexe dans le milieu granulaire ; elle nécessite à elle seule un travail de recherche. Sans vouloir entrer dans le détail de toutes les méthodes de simulation du dépôt de sédiments existantes, nous voudrions

néanmoins présenter des méthodes fondées sur les automates cellulaires. Commençons par le modèle le plus connu, celui du tas de sable ou modèle de BTW (Bak, Tang et Wiesenfeld) [5]. Ce modèle est utilisé pour illustrer le phénomène physique appelé « *états critiques auto-organisés* ». Dans ce modèle, les grains venant de tomber, au début, restent proches du site où ils sont tombés. Au cours du temps, la pente formée par les grains devient raide, et provoque une avalanche de taille diverse et de durée variée. Ceci signifie qu'une petite perturbation locale d'un système peut à tout moment provoquer une autre perturbation, soit locale à ce phénomène, soit globale à tout le système. La règle d'évolution du modèle de BTW est par exemple la suivante : un site possédant 4 grains au temps t donnera 1 grain à chaque voisin au temps $t + 1$, et ainsi de suite. Cette évolution est décrite par la figure 5.11.

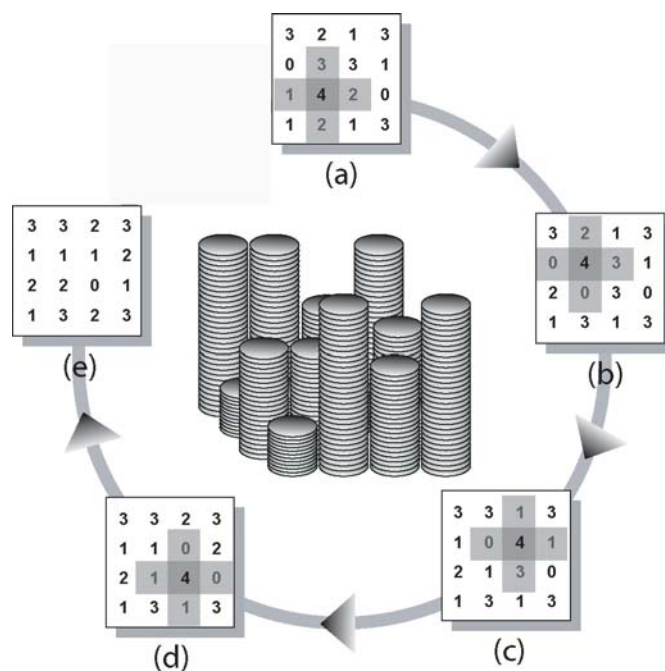


FIG. 5.11 – Les étapes successives (a à e) de l'évolution d'un tas de sable selon le modèle de BTW.

Le dépôt de sédiments dans notre modèle est un paramètre important puisqu'il agit comme un facteur de perturbation dans la croissance de l'amas stromatolithique. La réalisme de la morphologie du dépôt n'est pas l'objectif que nous voulons traiter ici. Toutefois, l'algorithme que nous proposons est suffisamment réaliste dans les résultats produits, et surtout très efficace en du temps de calcul. L'idée est qu'une particule venant de sédimenter ne perturbe pas

l'état des autres particules qui ont sédimenté auparavant. Par conséquent, nous ne traitons qu'une seule particule à la fois, ce qui optimise le temps de calcul.

```

FONCTION Sedimentation(v_particule,v_reseau,v_nbr_relaxe){
    TANT QUE v_particule ne rencontre pas l'amas{
        Déplacer v_particule vers le bas;
    }
    Calculer la v_direction (gauche ou droite);
    SI (le site selon v_direction est vide){
        Déplacer v_particule selon v_direction;
        Décrément v_nbr_relaxe--;
        Sedimentation(v_particule,v_reseau,v_nbr_relaxe);
    }
}

```

L'algorithme de sédimentation ci-dessus est fondé sur la méthode de *récurtivité*⁵. La récurtivité est une notion importante de la programmation qui permet de régler des problèmes extrêmement complexes avec seulement quelques lignes. C'est cependant une méthode avec laquelle il est facile de se perdre et d'avoir des résultats imprévisibles ou erronés.

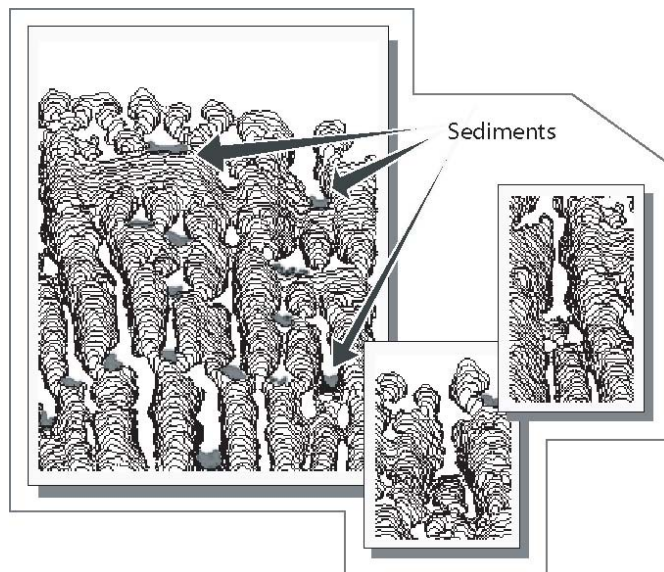


FIG. 5.12 – Croissance avec sédimentation.

La figure 5.12 montre une croissance de l'édifice générée par le modèle de DLA-CA avec une distance de stabilité assez importante, ce qui donne des structures en colonnettes et compactes. A l'intérieur de ces structures compactes, on trouve des lignes de croissance qui sont représentées par les lignes continues fines et noires. Ces lignes indiquent le temps de

⁵Celle-ci est une des notions intrigantes et mystérieuses auxquelles se heurtent parfois les gens qui étudient la programmation

formation de l'édifice. En même temps, sur une certaine surface de l'édifice, on découvre des dépôt noirs qui représentent la sédimentation.

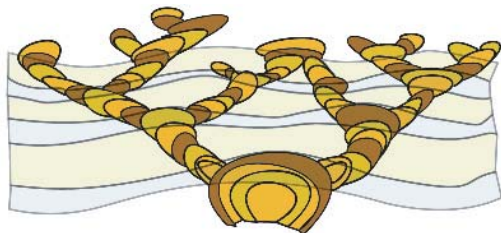


FIG. 5.13 – Un exemple de stromatolithe en forme d'auge.

La morphologie complexe des stromatolithes sous forme d'auges pourrait être expliquée par le changement de facteurs externes ou de conditions environnementales tout au long de la période de la croissance.

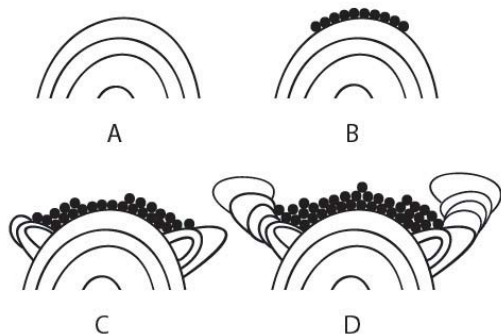


FIG. 5.14 – Quatre phases de formation des stromatolithes en forme d'auge.

Dans le cas de la croissance des stromatolithes, un de ces facteurs externes évident peut être la sédimentation. Les lignes sur la figure 5.13 représentent des ruptures dans les conditions environnementales : la sédimentation (ou décantation) devient un peu plus rapide que la croissance des stromatolithes. Le milieu reste quant à lui non agité, ce qui induit la préservation des sédiments dans les parties sommitales des stromatolithes (le faite de chaque ramification). Cette préservation implique une croissance latérale des stromatolithes à partir des parties sommitales.

Au terme de cette analyse, il faut cependant faire remarquer que la croissance n'est pas le seul facteur de génération des formes en auges. Il faudrait également tenir compte du facteur de sédimentation et du rapport croissance/sédimentation (Fig. 5.14).

⁶Ils peuvent être la température, l'intensité de la lumière, la quantité de nutriment, la sédimentation, etc.

Les stromatolithes possèdent plusieurs morphologies qui peuvent être la traduction des variations des conditions environnementales⁶ ou/et du changement des écosystèmes bactériens.

La morphologie complexe des stromatolithes sous forme d'auges pour

rait être expliquée par le changement de facteurs externes ou de conditions environnementales tout au long de la période de la croissance.

rait être expliquée par le changement de facteurs externes ou de conditions environnementales tout au long de la période de la croissance.

Cette vue d'ensemble montre qu'il existe une fonction contrôlant la formation des stromatolithes qui dépend de la phase de croissance des stromatolithes et de la phase de sédimentation. Cette fonction peut être définie sous la forme :

$$F(t) = \varphi C(t) + (1 - \varphi)S(t)$$

où

$$\begin{aligned} F(t) &= \text{la fonction de formation} \\ C(t) &= \text{la phase de croissance} \\ S(t) &= \text{la phase de sédimentation} \\ \varphi &= \text{le facteur de croissance} \end{aligned}$$

La formation de stromatolithes en forme d'auge pourrait être traduite par un processus d'accélération et de ralentissement d'un *phénomène interne* (la croissance) et d'un *phénomène externe* (la sédimentation). Les quatre phases principales de la formation de stromatolithes en forme d'auge :

Phase A une prépondérance de la croissance au cours du temps, ce qui signifie que la valeur $\varphi \approx 1$;

Phase B un arrêt du processus de croissance, suivi par un processus de sédimentation, ce qui signifie que φ passe de la valeur 1 à la valeur 0 ;

Phase C une phase combinant croissance et sédimentation avec un facteur de croissance $0.5 < \varphi < 1.0$. Ceci signifie que la croissance est un peu plus importante que la sédimentation impliquant une croissance latérale ;

Phase D une phase combinant croissance et sédimentation avec un facteur de croissance $0 \ll \varphi < 0.5$ impliquant une croissance verticale vers l'extérieur.

Le modèle DLA-AC permet une simulation efficace du comportement morphologique de croissances en auge, en présence de sédiments (Fig. 5.12).

5.2.6 Relation entre les paramètres du modèle et ceux de la nature

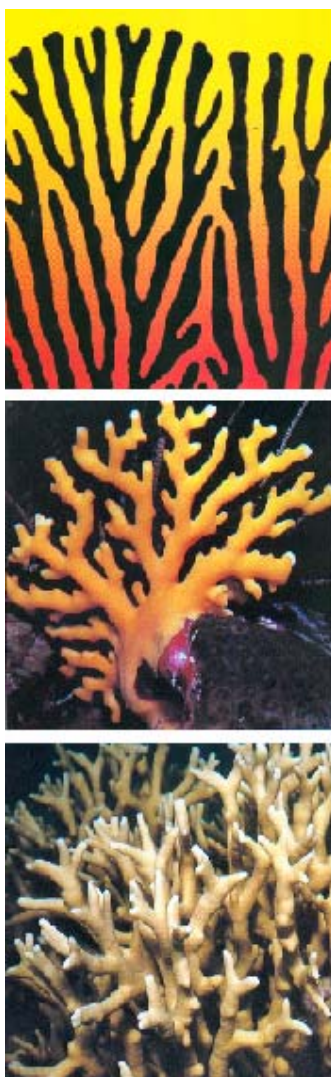


FIG. 5.15 – La digitation dans la combustion [55], les coraux « *Millepora* » et « *Distichopora* » du récif de la Grande Barrière en Australie [102].

Jusqu'ici, nous n'avons présenté que les paramètres du modèle de DLA-AC, sans donner d'explications sur les processus qui les inspirent pour leur construction et sans faire de lien entre les paramètres du modèle et les paramètres mesurables dans la nature. Le modèle de DLA-AC n'est pas un modèle construit à partir de la connaissance exacte d'un phénomène ou d'un processus spécifique. C'est-à-dire qu'il n'est pas un modèle de *simulation numérique prédictive* [23], où l'on utilise l'ordinateur (calculateur) pour étudier de manière détaillée l'évolution de phénomènes dont les termes sont connus et dont les lois agissant sur les processus sont établies ou considérées comme telles.

Le modèle de DLA-AC a été construit dans le but d'imiter les comportements généraux de la croissance des stromatolithes (en géologie). Ce modèle possède également la capacité de décrire des phénomènes de croissance dans des domaines divers : biologie, physique et chimie. En effet, nous constatons que certains phénomènes d'origine et de milieux complètement différents sont capables de produire des morphologies similaires et corrélées ; par exemple, la morphologie des coraux possède une forte ressemblance avec la digitation obtenue dans la combustion (Fig. 5.15).

La distance d'attraction et la distance de stabilité peuvent être interprétées comme les descripteurs généraux des conditions environnementales au moment de la croissance des

stromatolithes. Ces conditions peuvent être assimilées à la quantité de lumière et de nutriment. La variation de ces paramètres décrit la compétition de chaque colonie microorganique lors de la croissance de l'édifice.

5.3 Approche algébrique

Pour décrire un approche algébrique du modèle DLA-AC nous devons tout d'abord présenter quelques définitions.

Soit une cellule ayant les coordonnées (x, y) , son état étant défini par $e(x, y)$, alors l'état d'un site (cellule) vide est nul ($e(x, y) = 0$), et l'état d'une cellule active (qui peut attirer une particule libre) est égal à 1 ($e(x, y) = 1$). On peut définir alors :

Définition 16 *L'ensemble d'attracteurs (\mathcal{A}) est un ensemble de cellules qui attirent une particule libre dans un rayon d (distance d'attraction)*

$$\mathcal{C}(x, y, d) = \left\{ (a, b) \mid a = x + \sqrt{d^2 - (b - y)^2}; e(a, b) = 0 \right\}$$

$$\mathcal{A}(x, y, d) = \{(a, b) \in \mathcal{C}(x, y, d) \mid \exists i, j \in \{1, 0, 1\}; e(x + i, y + j) = 1\}$$

$$\mathcal{A}(x, y, d) \subset \mathcal{C}(x, y, d)$$

Définition 17 *Le poids d'une cellule est le nombre de cellules voisines d'ordre 1 qui ne sont pas vides*

$$P(x, y) = \text{card} \{(x + i, y + j) \mid e(x + i, y + j) \neq 0; i, j \in \{-1, 0, 1\}\} - e(x, y)$$

Définition 18 *L'ensemble de stabilité (\mathcal{S}) est un ensemble de sites (cellules) ayant le poids maximum dans un rayon d (distance de stabilité)*

$$\mathcal{I}(x, y, d) = \left\{ (a, b) \mid a \leq x + \sqrt{d^2 - (b - y)^2}; e(a, b) = 0 \right\}$$

$$\mathcal{S}(x, y, d) = \left\{ (a, b) \in \mathcal{I}(x, y, d) \mid \begin{array}{l} \text{si } (c, d) \in (x, y, s) \text{ alors} \\ P(a, b) \geq P(c, d) \end{array} \right\}$$

En utilisant les définitions ci-dessus, nous pouvons prédire la position des cellules en croissance en fonction de la position de la particule en mouvement, de la distance d'attraction, de la distance de stabilité, et de la configuration de l'édifice en croissance. Étant données les coordonnées de la particule en mouvement (x, y) , alors la position de la particule après une attraction (d_a est la distance d'attraction) sera (x_1, y_1) , et la position de la particule après une attraction et une relaxation (d_s est la distance de stabilité) sera (x_2, y_2) .

Le schéma ci-après montre les étapes de calcul des positions d'attraction et de stabilité :

$$(x, y) \rightarrow (x_1, y_1) \in \mathcal{A}(x, y, d_a) \rightarrow (x_2, y_2) \in \mathcal{S}(x_1, y_1, d_s)$$

où (x_2, y_2) est un point aléatoire dans l'ensemble $\mathcal{S}(x_1, y_1, d_s)$ et (x_1, y_1) est un point aléatoire dans l'ensemble $\mathcal{A}(x, y, d_a)$.

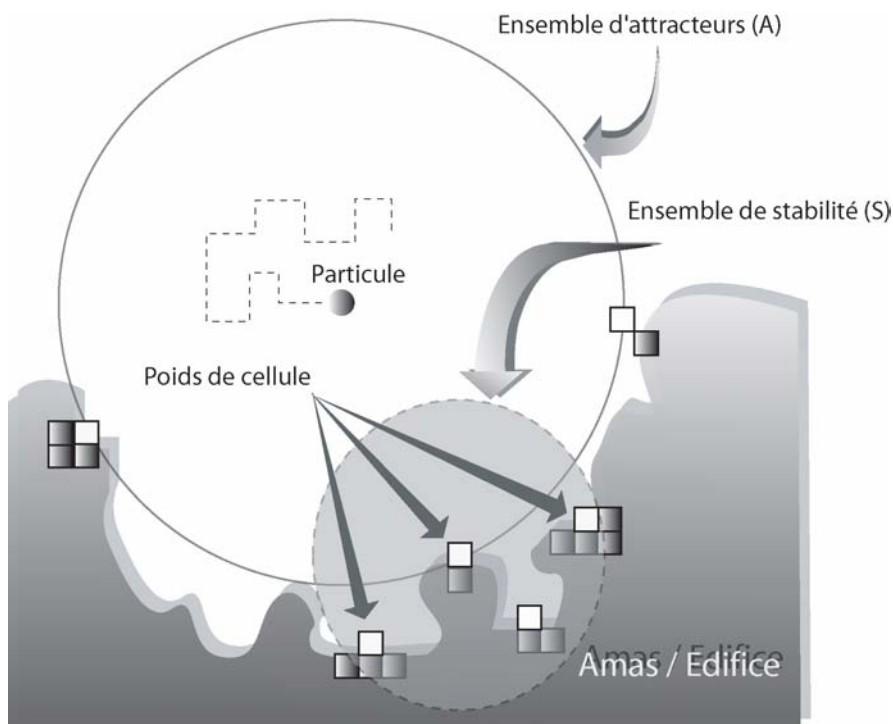


FIG. 5.16 – Deux rayons d'influence de la distance d'attraction et de la distance de stabilité. Le poids des cellules est calculé dans la région circulaire de stabilité.

5.4 Logiciel "DLA-CA Growth"

DLA-CA Growth est un logiciel de simulation de la croissance de surface fondé sur les méthode d'agrégation par diffusion limitée et d'automates cellulaires. Il a été développé en langage C++ et peut travailler dans l'environnement 32 bits Windows 2000 et Windows XP.

L'espace de simulation du logiciel *DLA-CA Growth* est une image de taille 400×500 pixels. Par défaut, la surface initiale de la croissance est une ligne droite de 400 pixels. Mais

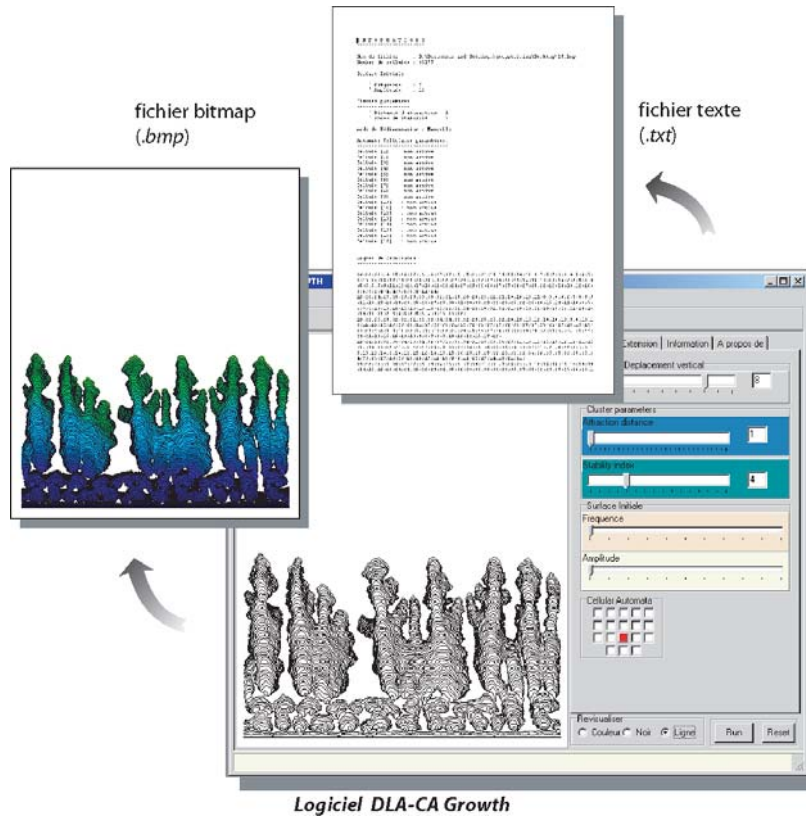


FIG. 5.17 – Interface du logiciel « DLA-CA Growth » et fichiers générés.

elle peut être modifiée en faisant varier la fréquence et l'amplitude de la surface initiale qui se trouve dans l'onglet *standard*. Sur cet onglet, on trouve également :

- l'indice de déplacement vertical. Ce paramètre indique la priorité du déplacement vertical des particules libres dans l'espace de simulation. Plus la valeur de ce paramètre est grande, plus le mouvement de la particule tend vers un mouvement balistique, impliquant une croissance rapide ;
- les deux paramètres de l'amas, la **distance d'attraction** et la **distance de stabilité** ;
- la **masque de croissance** représentant la croissance intrinsèque par la méthode des automates cellulaires.

Dans l'onglet *extension*, la sédimentation est accessible sous deux formes, manuelle ou automatique. La forme manuelle enclenche la sédimentation par l'utilisateur en validant la case à cocher. La sédimentation automatique est caractérisée par deux paramètres : le pourcentage de sédimentation par rapport à la croissance de l'édifice et le nombre de sédiments par

cycle de croissance. Ce dernier indique la fréquence de sédimentation durant la croissance. Plus ce nombre est petit, plus grande est la fréquence de sédimentation.

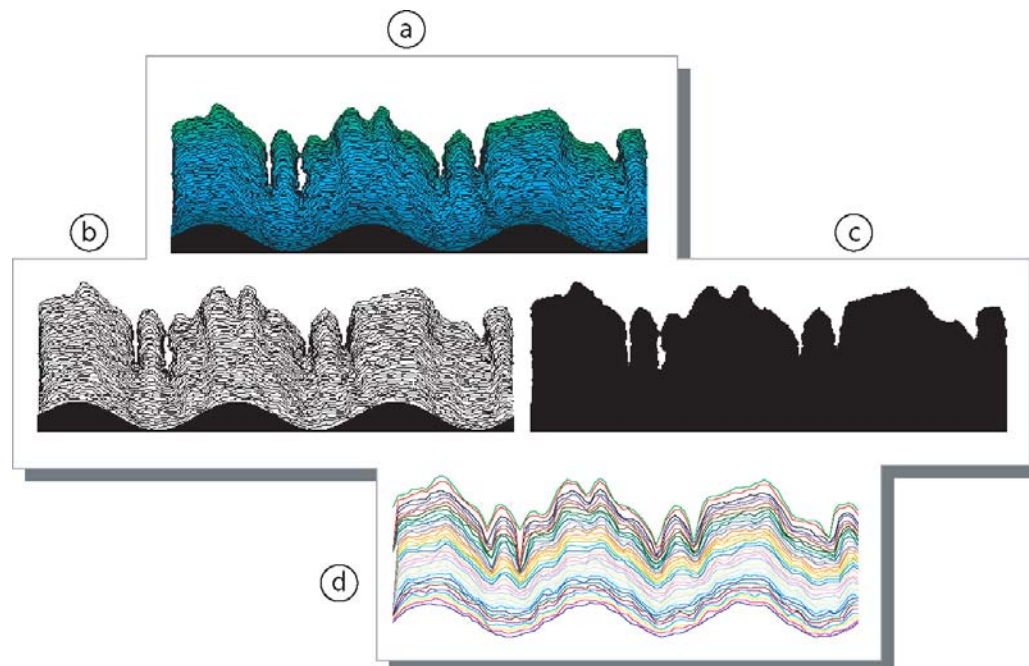


FIG. 5.18 – Modes de visualisation de résultats . a) en couleur, b) en lignes de croissance, c) en noir et blanc, d) à partir d'un fichier de données sous Excel.

Au niveau de la **visualisation** de l'édifice, il existe trois modes d'affichage : en *couleur*, en *noir et blanc*, et en *ligne*. Le mode en couleur permet de voir la formation de l'édifice en fonction du temps - chaque cycle de formation possède une couleur spécifique -, alors que le mode en noir et blanc est intéressant pour l'interprétation de la morphologie globale de l'édifice. Les étapes de croissance sont visualisées plus facilement en mode en ligne.

Le logiciel DLA-CA Growth donne la possibilité de sauvegarder le résultat produit dans un fichier au format bitmap (.bmp) pour l'image (Fig. 5.18.a-c), que ce soit en mode couleur ou en noir et blanc. Les lignes sont aussi sauvegardées dans un fichier de données et peuvent donc être affichées avec un autre logiciel (Fig. 5.18.d). De plus un fichier au format texte (.txt) enregistre les informations ou les paramètres de simulation. Ces informations sont :

1. le nom du fichier image ;
2. les paramètres de la surface initiale ;
3. les paramètres de l'amas (édifice) : distance d'attraction et distance de stabilité ;

4. le type de sédimentation ;
5. les paramètres de l'automate cellulaire ;
6. les lignes de croissance ;
7. la rugosité.

En effet, les données sur les lignes de croissance et la rugosité sont non seulement stockées, mais peuvent aussi être affichées dans *Excel* pour le traitement de données ou pour l'affichage de la surface formée.

Conclusion générale



Tout comme pour les automates cellulaires, la plupart des phénomènes naturels sont difficilement prévisibles et complexes. Néanmoins, les processus à l'origine de leur formation ne sont pas nécessairement aussi diversifiés que les morphologies observées...

*R.Pattisina
Automate cellulaire simulant la formation organo-minérales,
1999, DSER*

L'étude des stromatolithes est un sujet à la fois important, intéressant et pluridisciplinaire. Important, car les stromatolithes sont les plus anciennes traces de vie sur Terre, les acteurs principaux dans la formation des plates-formes carbonatées et sont à l'origine de l'apparition de l'oxygène. Intéressant, car ils peuvent nous renseigner sur les conditions environnementales (température, climat, conditions physiques et chimiques du milieu, etc.) à l'époque de leur formation. Et enfin, pluridisciplinaire, car ils nécessitent une étroite collaboration entre les géologues, les biologistes, les chimistes et les informaticiens et ce, afin de comprendre les processus de sédimentation et de formation de Bio-carbonates, d'étudier les activités bactériennes, et de modéliser la croissance de ces structures.

Il existe deux modèles de la croissance des stromatolithes. Le premier est le modèle déterministe utilisant l'équation de KPZ (Kardar - Parisi - Zhang), qui est une équation de diffusion non linéaire. Ce modèle a été proposé pour la première fois par Grotzinger et Rothman pour illustrer la formation de stromatolithes de manière abiotique. Le second est le modèle stochastique dit DLA-CA conçu dans le cadre de ces travaux de thèse, ce dernier étant fondé d'une part, sur la méthode d'agrégation par diffusion limitée (DLA) pour la croissance externe, et d'autre part sur la méthode d'automate cellulaire pour la croissance interne.

La modélisation de la croissance des stromatolithes par l'équation de KPZ peut être effectuée en utilisant une méthode numérique. Il existe plusieurs méthodes numériques chacune présentant des avantages et des inconvénients. Pour le modèle 2-D, nous utilisons la méthode des différences finies fondée sur les séries de Taylor. Cette méthode est facile à mettre en œuvre, mais elle est très délicate à manipuler car elle induit des erreurs de méthode qui peuvent perturber l'ensemble du système. La discrétisation de l'équation de KPZ n'est pas une tâche facile à cause de la partie non linéaire liée à la croissance latérale. Cette partie doit être tout d'abord linéarisée avant d'établir les conditions de stabilité. Le calcul des conditions de stabilité peut se faire en utilisant deux méthodes. La première est la méthode de Von Neumann qui utilise l'équation de perturbation et la décomposition des erreurs en harmoniques selon l'analyse de Fourier, où les conditions de stabilité doivent être satisfaites pour toutes les harmoniques. La seconde méthode est dite la méthode matricielle, car l'équation de KPZ discrète est exprimée sous la forme d'une matrice de coefficients. Les valeurs propres de cette matrice détermineront la nature des solutions de l'équation de KPZ. Soit la solution tend vers un état stable, soit elle tend vers un état instable.

Les résultats de simulation par l'équation de KPZ peuvent être classés en trois catégories.

- Le système est stable au cours du temps ; l'attribution de valeurs de paramètres de simulation respecte alors les conditions de stabilité.
- Le système est instable au cours du temps ; les conditions de stabilité ne sont alors pas respectées.
- Le système évolue d'un état instable vers un état stable ; cette évolution semble impossible dans le cas d'un phénomène linéaire, mais elle est en revanche envisageable en utilisant l'équation de KPZ (équation non linéaire) et ce, du fait de la présence du terme diffusif qui joue un rôle important dans la stabilité, en diminuant la pente de la surface au cours du temps.

Le modèle de la croissance des stromatolithes par l'équation de KPZ s'adapte très bien à la formation de stromatolithes du type dôme grâce aux paramètres de diffusion et de croissance latérale. Mais malheureusement, pour les morphologies qui sont plus complexes comme la morphologie digitée ou branchue, ce modèle semble très difficile voire impossible à mettre en application de façon convaincante.

Le modèle de DLA-CA proposé dans cette thèse est une alternative pour décrire la crois-

sance des stromatolithes. La croissance externe du Modèle de DLA-CA est guidée par le mouvement brownien des particules dans un réseau. Le comportement de ces particules est déterminé par deux paramètres : la distance d'attraction et la distance de stabilité. Si ces deux distances tendent vers zéro, alors la croissance externe du modèle de DLA-CA tend vers la croissance du type d'agrégation par diffusion limitée (DLA) de Witten et Sander. Une fois que la particule se colle sur l'amas, la croissance interne peut alors commencer. Cette croissance est inspirée par la division cellulaire fondée sur la méthode de l'automate cellulaire. Dans ce modèle, la croissance interne possède deux paramètres : la configuration des règles de transition et le nombre de cellules. En introduisant le processus de sédimentation dans le modèle de DLA-CA, les résultats produits deviennent encore plus riches et nous aident à la compréhension de la formation de stromatolithes en forme d'auges.

La distance d'attraction joue un rôle important à la fois dans l'attraction de particules libres par l'amas en croissance et dans la formation des zones de protection entre deux branches de l'amas, représentant le stromatolithe. La variation de cette distance agit sur la compacité, la porosité, la morphologie et la taille de l'amas. Plus la distance d'attraction est grande, plus l'amas est compact, plus le nombre de pores est petit, plus la morphologie est complexe et plus la taille des branches est grande.

La distance de stabilité représente la capacité de chaque partie de l'amas d'attirer la particule venant à son contact. Ceci signifie qu'au moment du contact avec l'amas, la particule ne se colle pas immédiatement, mais elle sera attirée vers une zone plus stable selon la distance de stabilité et la configuration de cette zone.

La configuration des règles de transition et le nombre de cellules déterminent la manière dont une cellule active se divise ou se multiplie ; ces deux paramètres jouent un rôle important dans la formation de branches de l'amas et la complexité de la morphologie.

La comparaison du modèle de croissance par l'équation de KPZ avec celui du DLA-CA permet de mettre en évidence les avantages liés à l'utilisation de ce dernier :

- concernant les résultats produits, le modèle de DLA-CA montre une très grande capacité dans la génération de diverses morphologies. Dans la simulation de la croissance des stromatolithes, ce modèle est capable de générer toutes les morphologies trouvées

dans la nature : plat-dômes, isopaques, et branchues. Ceci montre que les paramètres du modèle de DLA-CA sont plus adaptés aux paramètres issus de la croissance naturelle des stromatolithes, telles que : les paramètres *biotiques* (microorganismes) et les paramètres *abiotiques* (environnementaux, physiques et chimiques ;

- le concept de modèle stochastique est le plus adapté à la simulation d'un phénomène naturel car la plupart des processus qui se produisent dans la nature sont complexes et obéissent à des lois du « hasard¹ ».

L'inconvénient majeur de cette méthode est qu'elle nécessite un important temps de calcul et ce, malgré une optimisation des algorithmes proposés dans cette thèse. Pour améliorer le fonctionnement du modèle de DLA-CA, on peut envisager une implantation sur machines parallèles qui peuvent exécuter plusieurs tâches ou instructions simultanément, impliquant un gain de temps de calcul. En général, la technique de parallélisation ne s'adapte pas à toutes les méthodes ou à tous les algorithmes. Mais dans le cas de la méthode des automates cellulaires, elle s'adapte parfaitement car l'espace de simulation est divisée en petites parties (en cellules) et le résultat ne dépend que des données locales.

Le modèle de DLA-CA, fondé sur la méthode des automates cellulaires, peut être considéré comme un nouveau type de simulation, où la construction d'un phénomène complexe (la morphologie de stromatolithes) peut être effectuée à partir de règles locales simples (microscopique) afin d'obtenir un comportement global (macroscopique). Cette approche de simulation, fondée sur le comportement local d'un système, est différente de celle fondée sur le comportement global décrit en général par des équations mathématiques avec des paramètres *a priori*.

Perspectives

Plusieurs approches peuvent être envisagées pour compléter ces résultats de travaux de recherche :

- la construction en 3D du modèle de DLA-CA. L'adaptation du modèle 2D vers le modèle 3D n'est pas un problème simple car l'évolution de la complexité d'algorithme et le temps de calcul n'est pas une fonction linéaire.

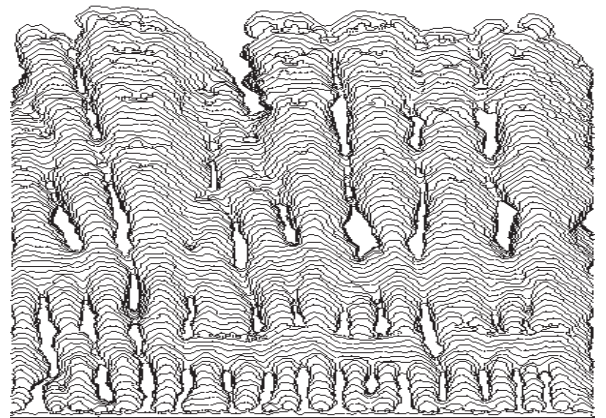
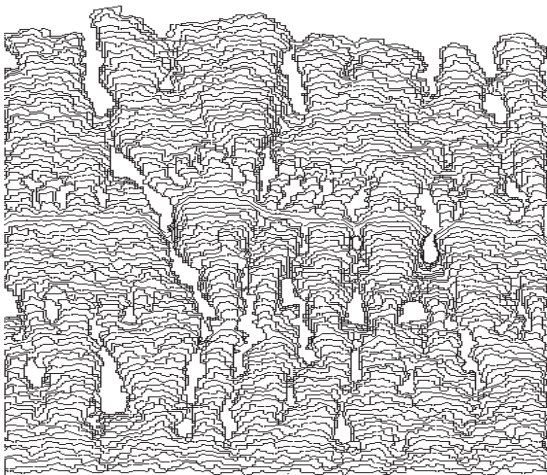
¹La frontière de la connaissance actuelle.

-
- La méthode de Boltzmann sur réseau (« *Lattice Boltzmann* ») est une technique récente qui permet de simuler de nombreux phénomènes physiques tels que, l'hydrodynamique, les processus de réaction-diffusion, etc. Cette technique se fonde sur un niveau de description mésoscopique du système, en terme de particules fictives évoluant dans un espace-temps discret. Cette approche, intuitive, permet de décrire facilement des processus complexes et s'implante de façon simple et efficace sur un ordinateur parallèle. Les principes de base de la méthode de Boltzmann sur réseau ont déjà été utilisées dans plusieurs domaines : le transport de neige par le vent, l'érosion dans les rivières, les phénomènes de fracture, la propagation d'ondes radios en milieux urbains, et la croissance des coraux. La question qui se pose alors est la suivante : pouvons-nous utiliser cette méthode pour simuler la croissance de stromatolithes ? Si, oui, nous pourrions alors comparer l'efficacité de cette méthode avec le modèle de DLA-CA ;
 - enfin, la comparaison et l'interprétation des paramètres des modèles avec les paramètres environnementaux d'un système naturel (les types de bactéries qui construisent les stromatolithes, la quantité de nutriments, les conditions climatiques, la température, etc) reste une question largement ouverte.

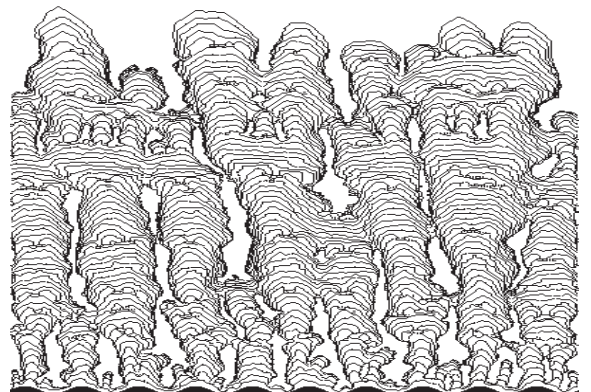
Stromatolithes fossiles et simulations I



Oligocène,
Limagne, France

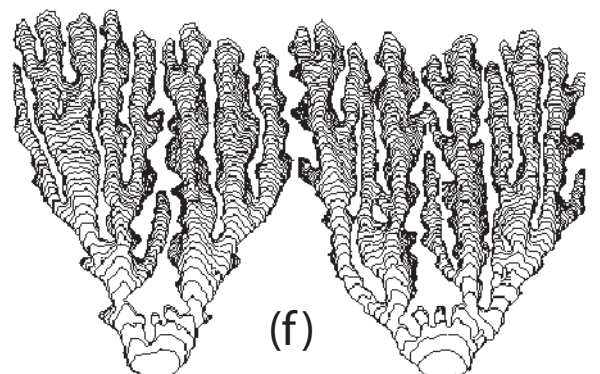
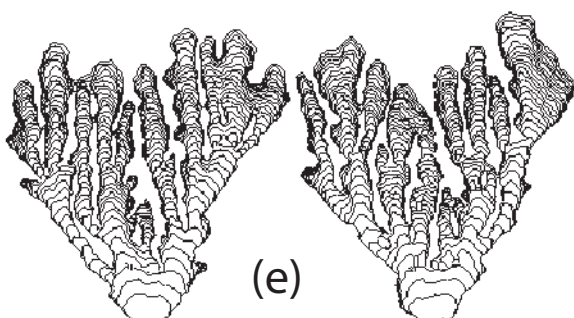
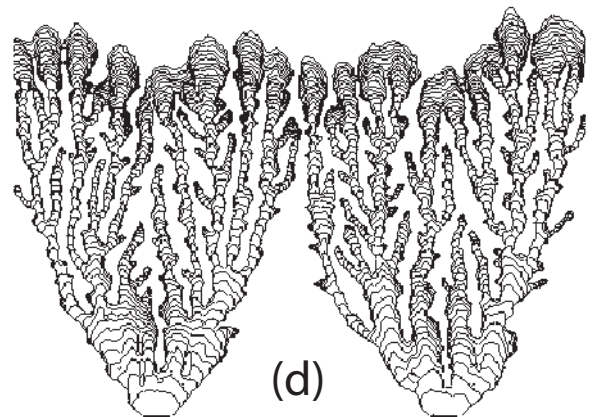
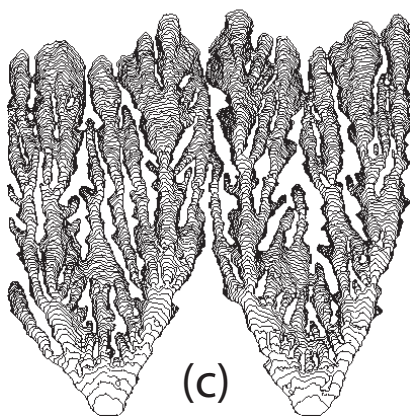
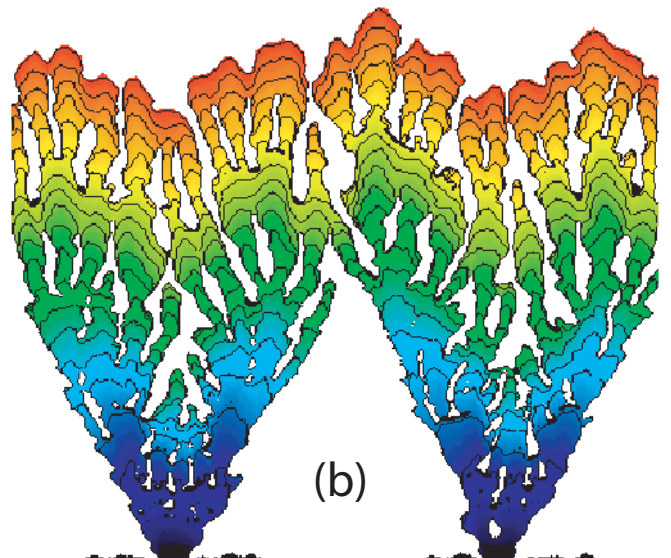
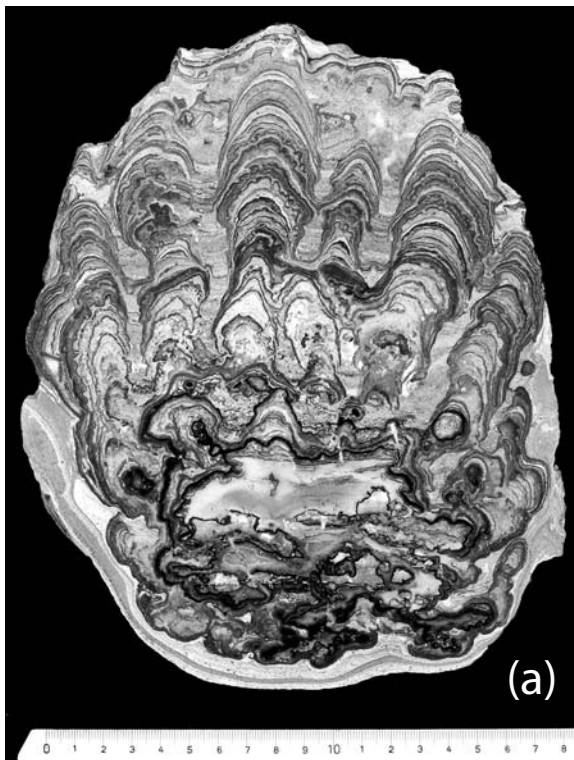


Les résultats générés par le *DLA-AC Growth*

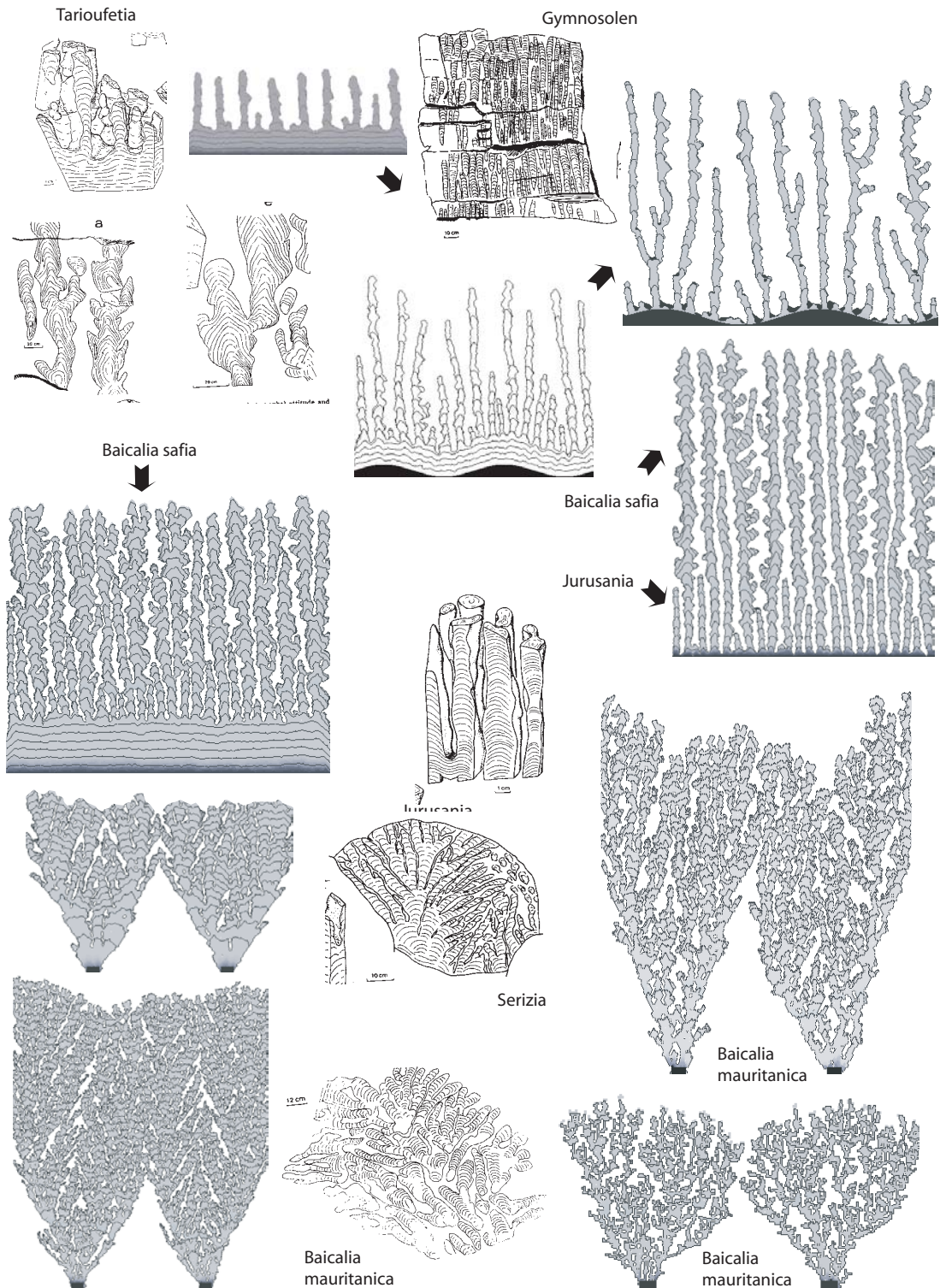


Stromatolithes fossiles et simulation II

- (a) : El Molino Formation, Maastrichtien, Crétacé, Vintillo, Bolivie.
Call. No 017332, Musée de Zurich d'Histoire Naturelle.
- (b)-(f) : Résultats de simulation avec DLA-AC Growth.

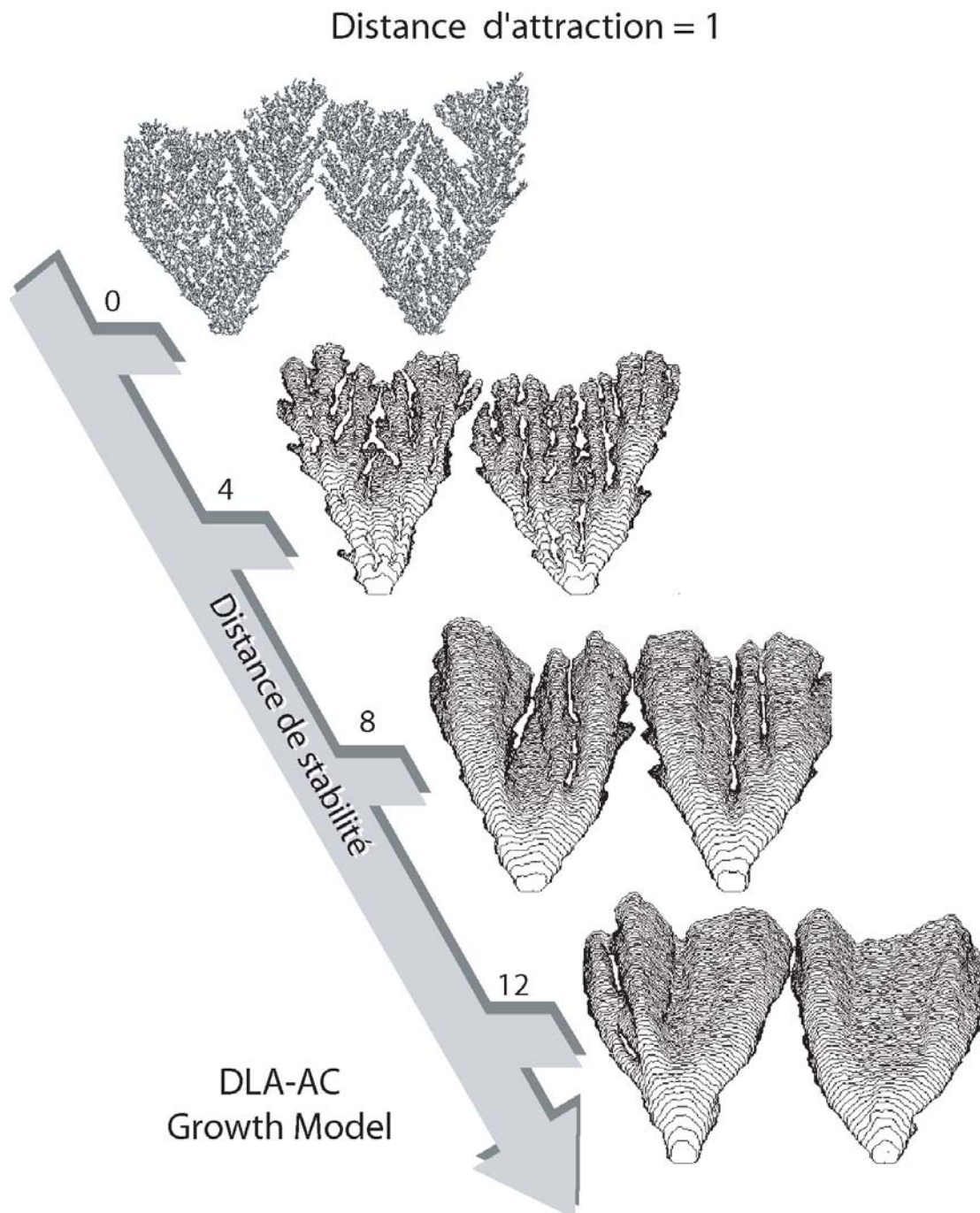


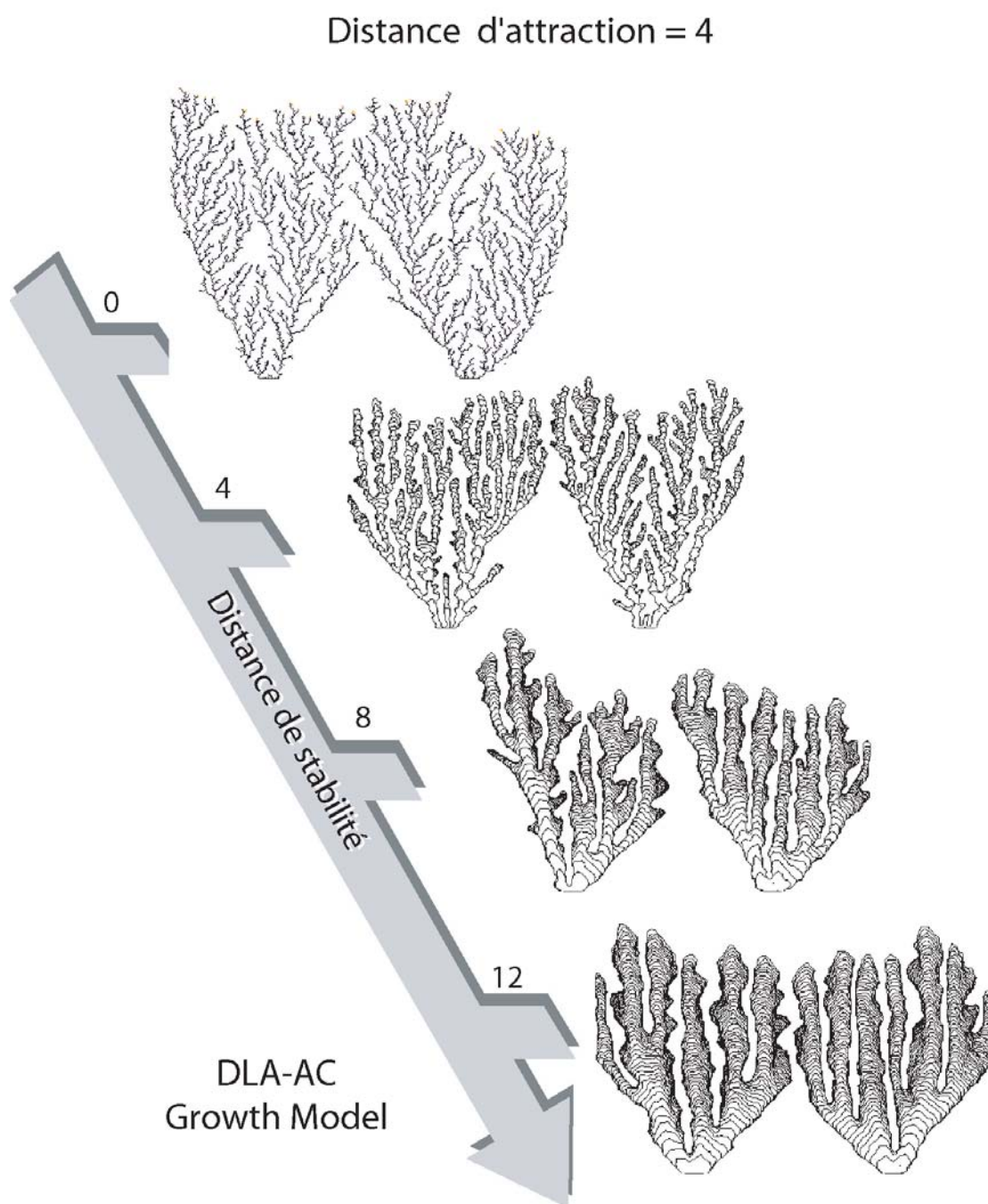
Stromatolithes fossiles et simulation III

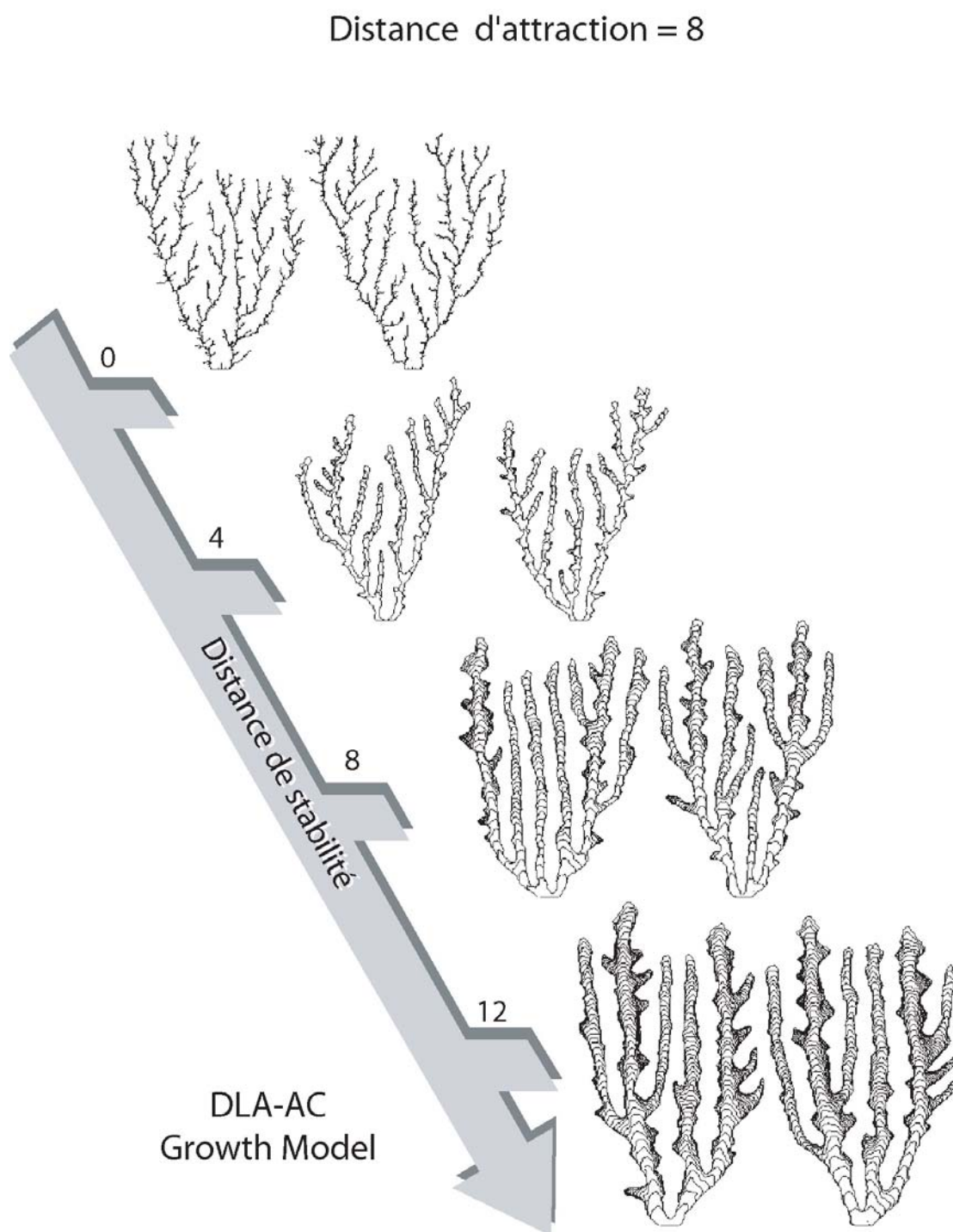


Nomenclature des résultats



FIG. D.1 – Nomenclature avec $d_a = 1$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

FIG. D.2 – Nomenclature avec $d_a = 4$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

FIG. D.3 – Nomenclature avec $d_a = 8$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

Distance d'attraction = 1

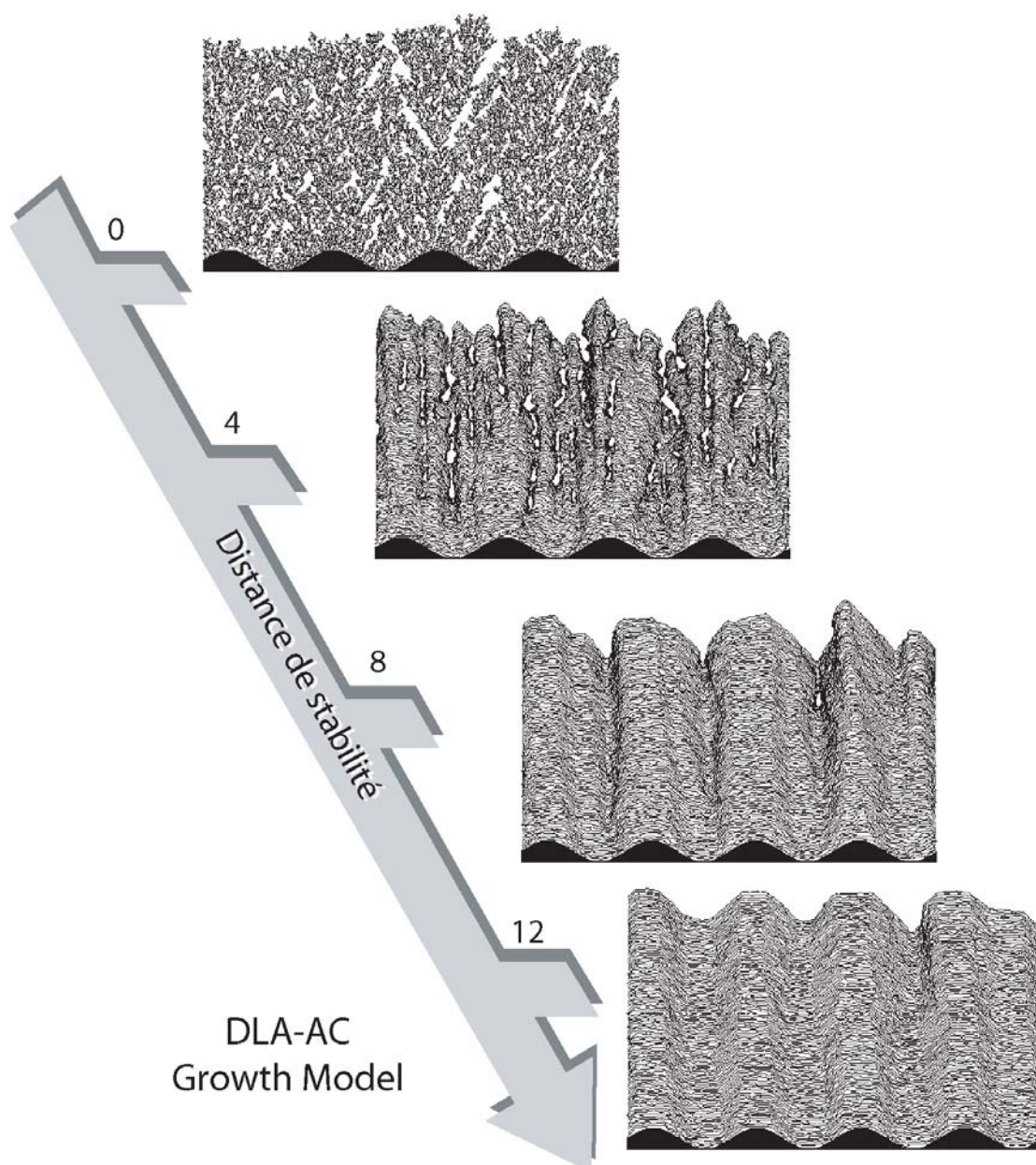


FIG. D.4 – Nomenclature avec $d_a = 1$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

Distance d'attraction = 4

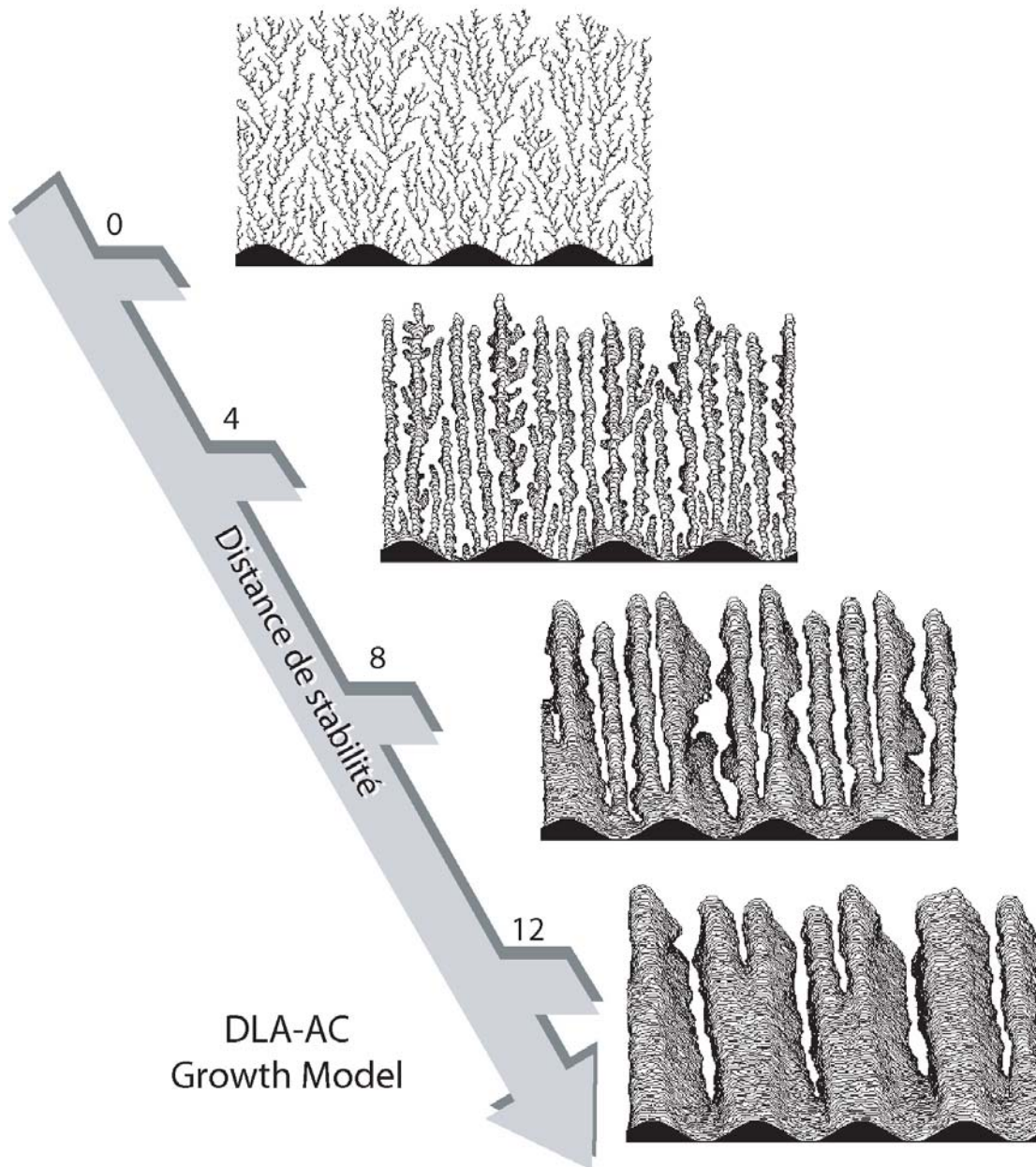


FIG. D.5 – Nomenclature avec $d_a = 4$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

Distance d'attraction = 8

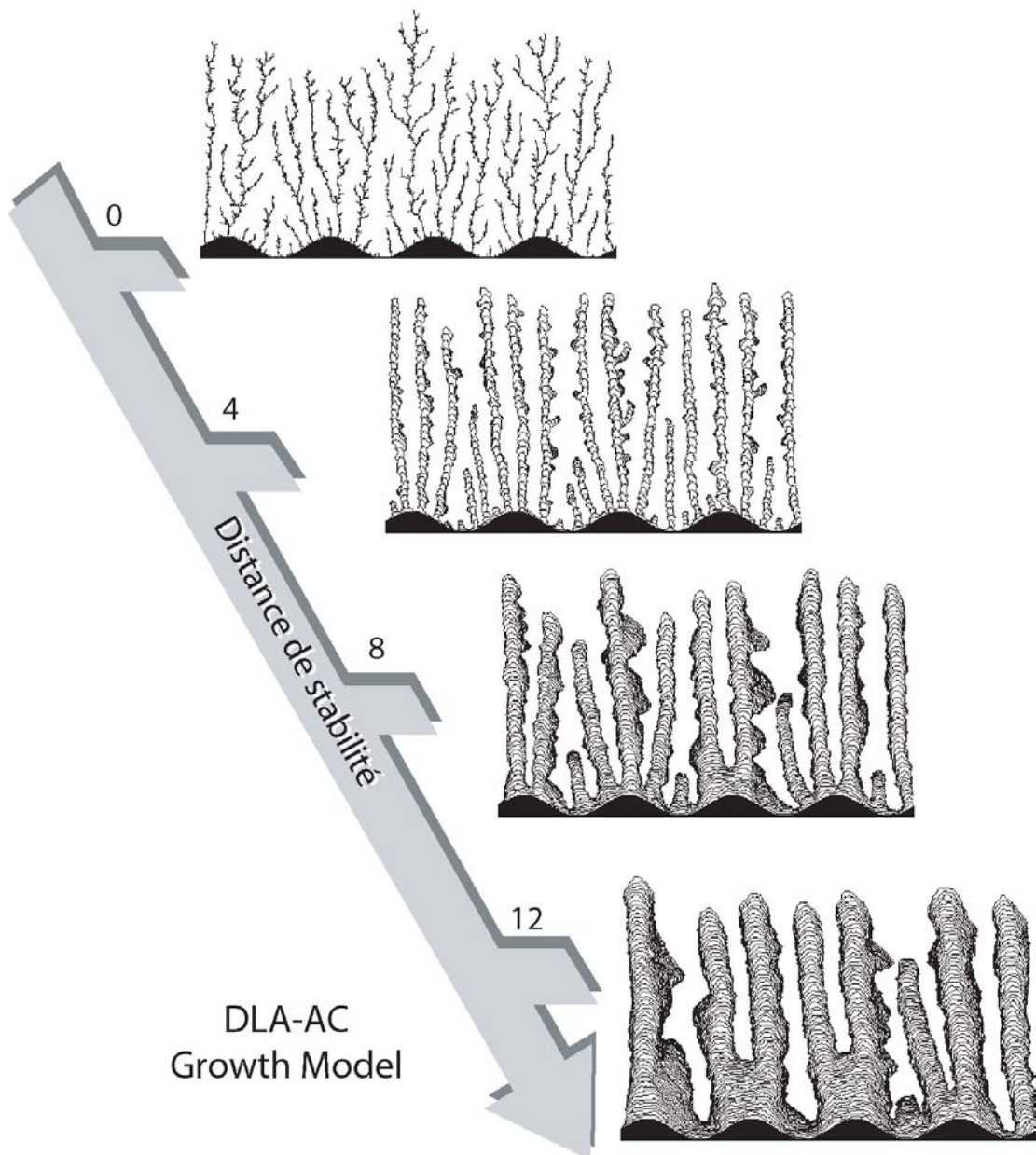


FIG. D.6 – Nomenclature avec $d_a = 8$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$

Exemple de fichier texte du en sortie de DLA-AC Growth

I N F O R M A T I O N S

=====

Nom du fichier : D:\Documents and Settings\geopattisina\Desktop\1C.bmp
Nombre de cellules : 36177

Surface Initiale

- Fréquence : 3
- Amplitude : 12

Cluster paramètres

- Distance d'attraction : 1
- Index de Stabilité : 7

mode de Sédimentation : Manuelle

Automate Cellulaire paramètres:

Cellule [1] : non active
Cellule [2] : non active
Cellule [3] : non active
Cellule [4] : non active
Cellule [5] : non active
Cellule [6] : non active
Cellule [7] : non active
Cellule [8] : non active
Cellule [9] : non active
Cellule [10] : non active
Cellule [11] : non active
Cellule [12] : non active
Cellule [13] : non active
Cellule [14] : non active
Cellule [15] : non active
Cellule [16] : non active

Cellule [17] : non active

Lignes de Croissance :

14;18;21;24;25;26;27;28;28;27;27;26;25;23;21;19;19;15;14;11;9;
 16;20;24;26;28;29;29;30;30;32;31;29;28;26;23;21;21;18;16;13;11;
 18;22;25;29;32;32;31;32;33;34;34;32;32;29;25;25;22;20;19;16;12;
 19;24;29;32;35;34;33;34;36;37;36;36;34;31;28;27;25;23;21;18;13;
 19;26;31;36;36;37;37;36;39;38;38;38;37;34;31;30;27;25;23;20;16;
 20;28;34;36;39;39;39;40;42;41;42;42;40;38;35;31;29;28;27;23;19;
 21;32;36;39;41;42;43;43;44;44;44;43;42;40;38;35;31;30;28;26;21;
 21;32;38;43;44;43;44;45;46;47;47;46;46;44;41;36;34;31;30;28;24;
 24;37;41;46;45;46;47;48;49;49;50;49;50;46;43;40;36;33;32;29;27;
 24;38;43;48;48;47;50;51;52;51;52;53;51;48;45;42;40;37;34;31;28;
 24;41;46;49;50;50;53;53;54;54;56;56;54;52;49;46;43;40;36;33;31;
 24;45;49;52;53;52;55;55;56;57;58;58;57;54;50;49;46;43;38;36;33;
 24;47;51;54;55;55;56;57;58;60;60;61;60;57;54;52;49;45;41;37;35;
 24;49;55;56;57;59;60;61;61;62;63;63;66;66;66;63;59;56;54;51;49;44;40;37;
 24;52;57;59;60;61;61;62;63;63;66;66;66;63;59;56;54;51;47;42;39;
 24;54;61;61;64;65;64;63;65;66;67;69;69;65;62;58;56;52;49;45;41;
 24;58;63;66;66;66;67;67;67;67;69;72;71;68;64;61;59;55;51;47;44;
 24;61;65;68;68;68;70;70;70;70;74;74;73;70;66;63;61;57;54;50;46;
 24;63;67;70;70;71;71;72;72;73;75;77;75;72;68;65;63;61;57;52;49;
 24;65;70;73;73;72;73;75;76;75;78;79;79;74;71;67;64;62;58;55;51;
 24;67;73;76;76;75;75;77;78;78;81;83;82;78;73;71;68;63;60;55;51;
 24;71;75;77;77;77;79;79;81;82;83;85;84;81;76;72;70;67;63;58;53;
 24;73;77;80;81;80;81;82;84;84;85;87;86;83;79;77;72;68;65;61;55;

RUGOSITE :

8.228609;3.000000
 8.354639;3.301030
 8.468766;3.477121
 8.613361;3.602060
 8.663140;3.698970
 8.728115;3.778151
 8.879752;3.845098
 8.929726;3.903090
 8.992219;3.954243
 9.153142;4.000000
 9.305375;4.041393
 9.471537;4.079181
 9.651943;4.113943
 9.659710;4.146128
 9.682975;4.176091
 9.827513;4.204120

9.984488;4.230449
10.095544;4.255273
10.347464;4.278754
10.501429;4.301030
10.761041;4.322219
11.000455;4.342423
11.170050;4.361728
10.477118;4.380211
10.719608;4.397940
10.873822;4.414973
11.138223;4.431364
11.222745;4.447158
11.342399;4.462398
11.654183;4.477121
11.914697;4.491362
12.078493;4.505150
12.218019;4.518514
12.477580;4.531479
11.574541;4.544068

Caractéristiques temporelles et géométriques

Dans la nature ou la simulation, la formation des édifices est influencée par deux types de facteurs, intrinsèques et extrinsèques. La variation de ces facteurs donne des morphologies différentes de l'édifice et des dynamiques différentes de croissance ; il est parfois presque impossible de les distinguer les unes des autres de manière visuelle. Nous présentons quelques méthodes qui décrivent la croissance d'un édifice selon ses caractéristiques temporelles : la rugosité, l'exposant [7] de croissance, l'exposant dynamique et sa caractéristique géométrique, la dimension fractale. Ces méthodes nous permettent de faire des nomenclatures morphologiques.

La rugosité et la dynamique de surface.

Pour décrire quantitativement la croissance d'une surface, on introduit deux notions :

- la hauteur moyenne de la surface \bar{h} , définie par :

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h(i, t),$$

où $h(i, t)$ est la hauteur de la colonne i au temps t . Si le nombre de particules arrivant au site est constant, la hauteur moyenne croît linéairement avec le temps ($\bar{h}(t) \propto t$) ;

- la largeur de l'interface, qui caractérise la "rugosité" de la surface, et qui est définie par :

$$w(L, t) \equiv \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i, t) - \bar{h}(t)]^2}$$

Si l'on trace la courbe de la "rugosité" en fonction du temps, on peut distinguer deux zones de comportement particuliers :

– au début de l'évolution, la rugosité croît selon une puissance du temps :

$$w(L, t) \sim t^\beta,$$

β étant appelé l' **exposant de la croissance**, et caractérisant la dépendance dynamique de la rugosité pendant le temps de la croissance ;

– néanmoins, cette croissance n'est pas continue dans le temps. A un temps t_x donné, elle atteint un régime de saturation $w_{sat}(L)$. Si on augmente la largeur de l'interface, $w_{sat}(L)$ augmente également. On peut alors mesurer l' **exposant de la rugosité** α par :

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha$$

Le temps (t_x) qui sépare ces deux zone est appelé **temps de saturation**. La variation de t_x dépend de la largeur de l'interface, soit :

$$t_x \sim L^z$$

où z est appelé l' **exposant dynamique**.

La relation entre $w(L, t)$, $w_{sat}(L)$, t et t_x peut être décrite sous la forme :

$$\frac{w(L, t)}{w_{sat}(L)} \sim f\left(\frac{t}{t_x}\right)$$

Si on introduit les termes de l'exposant de rugosité et de l'exposant dynamique, on trouve la relation suivante :

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right)$$

connue sous le nom de "relation d'échelle Family-Vicsek" [27].

Les termes d'exposants α , β , et z ne sont pas indépendants entre eux. Au temps $t = t_x$, on peut écrire les relations suivantes :

•

$$w(t_x) \sim t_x^\beta$$

•

$$w(t_x) \sim L^\alpha$$

•

$$t_x^\beta \sim L^\alpha$$

ce qui a pour conséquence :

$$z = \frac{\alpha}{\beta}$$

La dimension fractale.

Les fractales constituent des objets fascinants sur le plan mathématique : souvent très simples à définir (la répétition d'une procédure élémentaire suffit), ils permettent d'approcher remarquablement bien de nombreux objets ou phénomènes complexes (montagnes, flocons de neige, arbres, cours de la bourse ou des matières premières). La notion de fractale a été développée par un mathématicien français, Benoit Mandelbrot, dans les années soixante-dix. Le terme «fractale» vient du latin *fractus* (du verbe *frangere*, qui signifie «briser»). Du point de vue qualitatif, les objets fractals possèdent des rugosités (irrégularités) à toutes les échelles.

En géométrie euclidienne, les objets ont une dimension entière : 0 pour un point, 1 pour une courbe, 2 pour une surface et 3 pour un volume. En revanche, la dimension d'une fractale peut prendre des valeurs qui ne sont pas des nombres entiers : la *dimension fractale* constitue une généralisation de la notion de dimension utilisée en géométrie euclidienne. En général, la dimension fractale, présentée par un nombre non entier, permet de quantifier l'aspect plus ou moins irrégulier d'un objet. Comment mesure-t-on la dimension fractale ? Selon Minkowski, il suffit de recouvrir tout l'objet avec un nombre minimal d'éléments structurants (une boule par exemple) de diamètre k . Ensuite, on répète l'opération en diminuant la taille du diamètre et on regarde l'évolution de nombre de boules N_k en fonction de son diamètre k , quand k tend vers zéro. On trouve alors la relation suivante :

$$N_k \sim k^{-D}$$

D est la dimension fractale de l'objet.

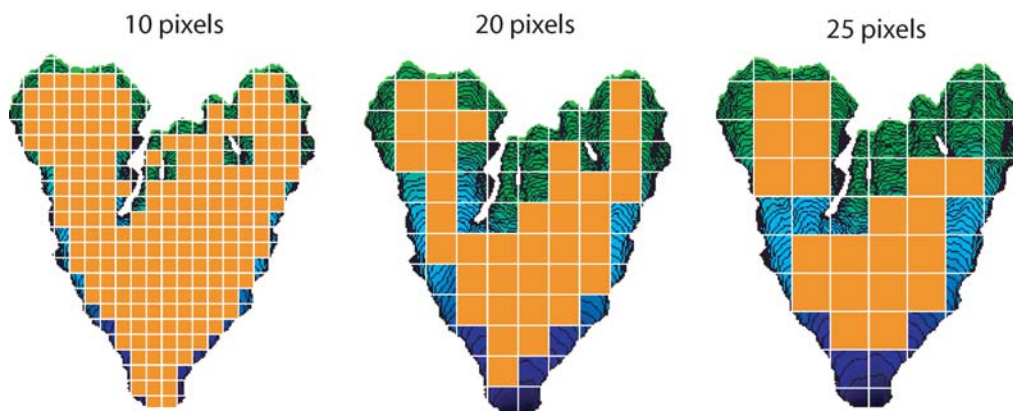


FIG. F.1 – Méthode de calcul de la dimension fractale dite de « *box counting* ». La dimension fractale est déterminée par la pente de la courbe log-log de la taille de l'élément structurant en fonction du nombre de surfaces mesuré. La dimension fractale de cette structure est égale à $\approx 1,3652$.

Probabilités associées à un déplacement brownien

La probabilité de déplacement Brownien d'une particule dans un espace à une dimension peut être décrit de la manière suivante : au temps $t = 0$, la particule se trouve à la position $x = 0$. Pendant t secondes, la particule fait N déplacements (ou sauts) de longueur $k = 1$. Parmi ces déplacements, m seront dans le sens positif et $N - m$ dans le sens négatif. Après t secondes, la particule se trouve à la position

$$x = mk + (N - m)(-k) = 2k(m - N/2) \quad (\text{G.1})$$

La probabilité que la particule fasse m déplacements positifs sur N déplacements est donnée par la *loi binomiale* suivante :

$$\text{Prob}(B = m) = P_N^m = C_N^m \left(\frac{1}{2}\right)^m \left(\frac{1}{2}\right)^{N-m}$$

$$P_N^m = \frac{N!}{m!(N-m)!} \left(\frac{1}{2}\right)^N$$

Selon l'approximation de *Stirling* pour la factorielle d'un nombre,

$$N! = \sqrt{2\pi N} \times N^N \times e^{-N} ; \ln(N!) = \frac{1}{2} \ln(2\pi N) + N \ln(N) - N$$

Sous la forme de *logarithme népérien*, l'expression de P_N^m devient :

$$\begin{aligned} \ln(P_N^m) &= \frac{1}{2} \ln(2\pi N) + N \ln(N) - N - \frac{1}{2} \ln(2\pi m) - m \ln(m) + m \\ &\quad - \frac{1}{2} \ln(2\pi(N-m)) - (N-m) \ln(N-m) + (N-m) - N \ln(2) \end{aligned}$$

$$\therefore N \ln(N) = (N + m - m) \ln(N)$$

$$\ln(P_N^m) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{N}{2 \cdot \pi \cdot m (N - m)} \right) + m \ln \left(\frac{N}{m} \right) + (N - m) \ln \left(\frac{N}{N - m} \right) - N \ln(2)$$

sachant que $m \simeq N - m \simeq \frac{N}{2}$

$$\ln(P_N^m) = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) + m \ln \left(\frac{N}{m} \right) + (N - m) \ln \left(\frac{N}{N - m} \right) - N \ln(2)$$

Supposons que $x = m - \frac{N}{2}$, une petite différence entre le mouvement positif et négatif.

$$\begin{aligned} \ln(P_N^m) &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \left(x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(\frac{x + \frac{N}{2}}{N} \right) - \\ &\quad \left(-x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(\frac{-x + \frac{N}{2}}{N} \right) - N \ln(2) \\ \ln(P_N^m) &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \left(x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(\frac{1 + \frac{2x}{N}}{2} \right) - \\ &\quad \left(-x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(\frac{1 - \frac{2x}{N}}{2} \right) - N \ln(2) \\ \ln(P_N^m) &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \ln \left(\frac{1}{2} \right) \cdot \left(-x - \frac{N}{2} + x - \frac{N}{2} \right) - \\ &\quad \left(x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 + \frac{2x}{N} \right) - \left(-x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 - \frac{2x}{N} \right) - N \ln(2) \\ \ln(P_N^m) &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - N \ln \left(\frac{1}{2} \right) - \left(x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 + \frac{2x}{N} \right) - \\ &\quad \left(-x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 - \frac{2x}{N} \right) - N \ln(2) \end{aligned}$$

$$\ln(P_N^m) = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \left(x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 + \frac{2x}{N} \right) - \left(-x + \frac{N}{2} \right) \ln \left(1 - \frac{2x}{N} \right) - N \ln(2)$$

Pour un grand nombre de déplacements, $\frac{2x}{N} \ll 1$, on peut alors écrire $\frac{2x}{N} = \varepsilon$. En utilisant le développement limité de $\ln(1 + \varepsilon) = \varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{2}$, l'équation ci-dessus devient :

$$\ln(P_N^m) = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \left(x + \frac{N}{2} \right) \left(\frac{2x}{N} - \frac{2x^2}{N^2} \right) - \left(-x + \frac{N}{2} \right) \left(-\frac{2x}{N} - \frac{2x^2}{N^2} \right)$$

$$\ln(P_N^m) = -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{N\pi}{2} \right) - \frac{2x^2}{N}$$

Sachant que $x = m - \frac{N}{2}$, on en déduit alors :

$$P_N^m = P_N(m) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot N}} \times e^{-\frac{2(m - \frac{N}{2})^2}{N}}$$

ou encore, en utilisant la relation G.1 :

$$P_N^m = P_N(m) = \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \times e^{\frac{-x^2}{2Nk^2}}$$

La probabilité que la particule se trouve à une distance x (à ∂x près) après un temps t est donc égale à la probabilité qu'une particule ait fait m (à ∂m près) sauts positifs sur N sauts au total, ce qui donne, sachant que $dx = 2l\partial m$,

$$P_t(x) = \frac{1}{2N} \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \times e^{\frac{-x^2}{2Nk^2}}$$

Résultat de simulation par l'automate cellulaire

Les images suivantes sont des résultat générés par un automate cellulaire à l'états déterministes et de configuration (règle) stochastique [70].

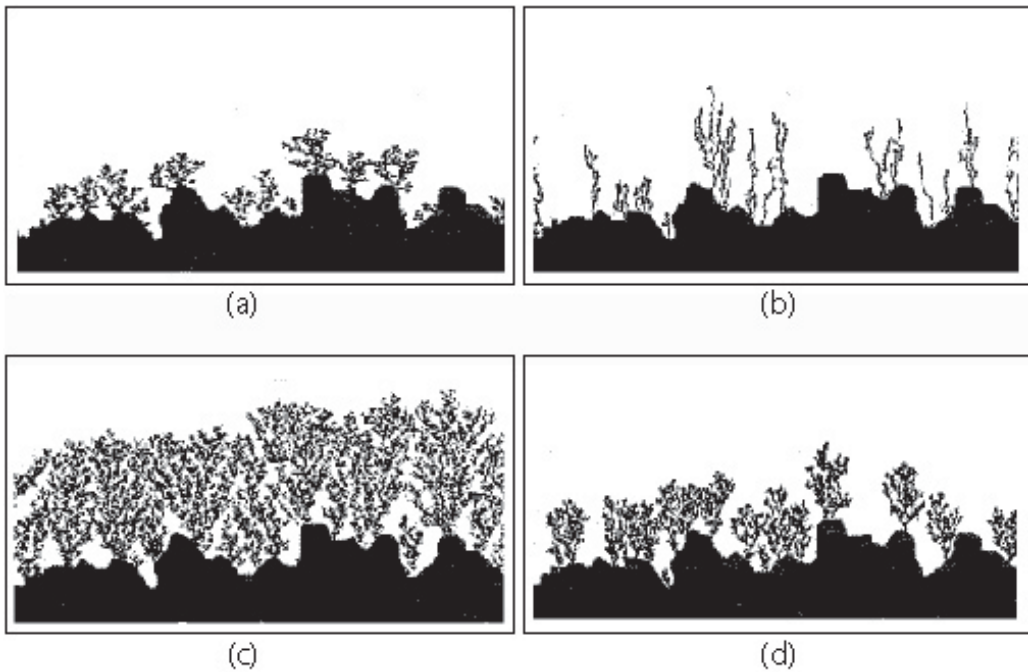


Table des figures

1.3	Cycle de croissance dans l'orientation de filaments cyanobactériens (<i>Scytonema sp.</i>) conduisant à la formation de stromatolithes. Cette formation est principalement due à la précipitation de micrite à l'intérieur du tapis microbien. Modified from Dupraz et al. (<i>in press</i>)	4
1.4	Les principales étapes de formation des stromatolithes par la précipitation de micrite et le piégeage de particules : (1) Stade pionnier, (2) Stade biofilm, et (3) Stade bactéries cocciformes [83].	6
2.1	Modèle du type « <i>Ballistic Deposition</i> » avec une probabilité de collage sur le voisinage d'ordre 1. Ici, deux possibilités de collage de particules sont montrées. a) Principe. b) Résultat.	11
2.2	Le dépôt des particules se fait directement sur la position i , quelque soit la configuration de voisinage. a) Principe. b) Résultat.	12
2.3	Le modèle de type « <i>Random Deposition</i> » avec relaxation de particules. L'image montre les quatre positions possibles d'une particule par rapport à la surface. a) Principe. b) Résultat.	13
2.4	Calcul du terme non-linéaire de l'équation de KPZ, la croissance à l'axe de la normale locale $\lambda\delta t$	14
2.5	Maillage de points pour la méthode des différences finies dans un système de diffusion. Les cercles noirs à $t = t_0, i = 0$ sont les positions initiales de la fonction $h(x, t)$ sur l'ensemble de l'axe X . Les cercles blancs sont les valeurs potentielles de la fonction $h(x, t)$ déterminée à chaque itération.	18

2.6	Travertin hydrothermal renfermant des couches de calcite et d'oxydes Fe-Mn. Ce travertin (récolté par E.Verrecchia) vient du bassin de Ouarzazate au Maroc, et fait partie de la collection de l'Institut de Géologie de l'Université de Neuchâtel.	30
2.7	Trois figures d'évolution d'un système utilisant l'équation de KPZ	32
2.8	A partir de la surface initiale similaire à celle de la figure 2.6. les paramètres de l'équation de KPZ sont $v = 3$, $\lambda = 1$	32
2.9	Quatre résultats de la simulation de la croissance de surface en utilisant l'équation de KPZ.	34
3.1	(a) Principe du DLA , et (b) résultat produit.	36
3.2	Six étapes de la croissance du type DLA. Chaque étape contient $s = 200$, 2.000, 20.000, 200.000, 2.000.000, et $s = 20.000.000$ particules.	37
3.4	Morphologies des agrégats obtenues en utilisant le modèle de MBDLA [14] dans le réseau 256×400 avec le facteur de concentration $c = 0.05$. p est le <i>facteur de convection</i> , et s est le facteur de « <i>Sticking probability</i> ».	48
3.5	Morphologies des agrégats obtenues en utilisant la méthode MBDLA [14] avec le facteur de « <i>Sticking probability</i> » ($s = 1$). La concentration des particules varie selon l'axe vertical et le facteur de convection varie selon l'axe horizontal.	48
3.6	Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.	49
3.7	Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA avec relaxation (au voisinage d'ordre 1) à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.	50
3.8	Résultats de simulations utilisant le modèle de MBDLA avec relaxation (au voisinage d'ordre 2), avec un nombre de particules au départ égal à 10000.	51
3.9	Résultats de simulations utilisant le modèle MBDLA à partir de différentes surfaces initiales dans un réseau 400×300 , avec un nombre de particules au départ égal à 10000.	52
3.10	Trois édifices formés par 10^6 particules selon le modèle de DLA . Les figures (a) et (b) montrent une formation de branches selon le processus récursif de Fibonacci (images de Arneodo et al. [3])	53

3.11 Quelques exemples du nombre d'or et de la suite de Fibonacci trouvés dans la nature.	55
3.12 Quelques exemples d'images générées par L-système.	56
4.2 Processus d'évolution d'une cellule à partir de son état et de l'état des cellules voisines au temps t selon une règle de transition δ	63
4.7 Les motifs sur les coquilles peuvent être générés par l'application de certaines règles de l'automate cellulaire élémentaire.	68
4.10 Simulation de la formation de stromatolithes par automate cellulaire selon la règle de transition décrite par l'équation 4.9.	75
4.11 Voisinages d'ordre 1 de von Neumann et de Moore	76
4.12 Processus d'évolution d'une cellule au temps $t + 1$ à partir de son état et de l'état des cellules voisines au temps t selon des règles de transition décrites par l'équation 4.10. On trouve ainsi huit conditions de changement d'état de la cellule de départ.	77
4.13 Simulation de la formation de stromatolithes par automate cellulaire selon la règle décrite par l'équation 4.10.	78
5.2 Ces quatre mouvements possèdent le même code de direction de mouvement, 213323, et le même chemin positif. (a) définition de la règle. (b,c,d,e) quatre chemins positifs identiques.	88
5.4 Une particule venant au contact de l'amas possède une distance de stabilité d_s . 91	
5.5 Les poids de stabilité calculés selon les nombres de sites voisins de type « amas ». 92	
5.6 Construction du masque de croissance déterministe à partir des règles de transition.	93
5.7 Construction du masque de croissance probabiliste à partir des règles de transition.	94
5.8 Quatre exemple de configuration de règles de transition. (a) et (d) contiennent 4 règles de transition, (b) contient 8 règles, et (c) 5 règles.	94
5.10 Nomenclature des morphologies de l'amas selon la distance d'attraction et la distance de stabilité.	96
5.11 Les étapes successives (a à e) de l'évolution d'un tas de sable selon le modèle de BTW.	98

5.16	Deux rayons d'influence de la distance d'attraction et de la distance de stabilité. Le poids des cellules est calculé dans la région circulaire de stabilité. . . .	104
5.17	Interface du logiciel « DLA-AC Growth » et fichiers générés.	105
5.18	Modes de visualisation de résultats . a) en couleur, b) en lignes de croissance, c) en noir et blanc, d) à partir d'un fichier de données sous Excel.	106
D.1	Nomenclature avec $d_a = 1$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	viii
D.2	Nomenclature avec $d_a = 4$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	ix
D.3	Nomenclature avec $d_a = 8$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	x
D.4	Nomenclature avec $d_a = 1$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	xi
D.5	Nomenclature avec $d_a = 4$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	xii
D.6	Nomenclature avec $d_a = 8$ et $d_s = \{0, 4, 8, 12\}$	xiii
F.1	Méthode de calcul de la dimension fractale dite de « <i>box counting</i> » . La dimension fractale est déterminée par la pente de la courbe log-log de la taille de l'élément structurant en fonction du nombre de surfaces mesuré. La dimension fractale de cette structure est égale à $\approx 1,3652$	xxii

Bibliographie

- [1] Aizawa.Y and Nishikawa.I. Soliton turbulence in one dimensional cellular automata. *Physica D*, 45 :307–327, 1990.
- [2] Alfonseca.M and Ortega.A. Representation of some cellular automata by means of equivalent l-systems. *Complexity international*, 7, 2000.
- [3] Arneodo.A, Argoul.F, Muzy.J.F, and Tabard.M. Structural five-fold symmetry in fractal morphology of diffusion-limited aggregates. *Physica A*, 188 :217–242, 1992.
- [4] Chopard. B and Droz.M. *Cellular automata modeling of physical systems*. Cambridge University Press, 1998.
- [5] Bak.P, Tang.C, and Wiesenfeld.K. Self organized criticality. *Phys.Rev.A*, 38(1) :364–374, 1988.
- [6] Baoid.R and Sander.L.M. Dynamical scaling of the surface of finite-density ballistic aggregation. *Phys.rev.A*, 38 :3672–3678, 1988.
- [7] Barabasi.A.L and Stanley.H.E. *Fractal concepts in surface growth*. Cambridge University Press, 1995.
- [8] Batchelor.M.T, Burne.R.V, Henry.B.I, and Watt.S.D. Deterministic KPZ model for stromatolite laminae. *Physica A*, 282 :123–136, 2000.
- [9] Bieniasz.L.K. The Von Neumann stability of finite-difference algorithms for the electrochemical kinetic simulation of diffusion coupled with homogeneous reactions. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 345 :13–25, 1993.
- [10] Bienvenüe.A. Vers un enseignement à distance de biologie physico-chimique et structurale. [http ://www.biochimie.univ-montp2.fr](http://www.biochimie.univ-montp2.fr).
- [11] Bogoyavlenskiy.V.A. Mean-field diffusion-limited aggregation : a density model for viscous fingering phenomena. *Physical Review. E*, 64(6) :066303, 2001.

-
- [12] Book.D.L. *Finite difference techniques for vectorized fluid dynamics calculations*. Springer Verlag - New York, 1981.
- [13] Bunde, Armin, and Havlinand Shlomo, editors. *Fractals and Disordered Systems*. Springer-Verlag, 1991.
- [14] Castro.M, Cuerno.R, Sánchez.A, and Adame.F.D. Multiparticle biased diffusion-limited aggregation with surface diffusion : A comprehensive model of electrodeposition. *Physical Review E*, 62 :161–173, 2000.
- [15] Chan.T.F. Stability analysis of finite difference schemes for the advection-diffusion equation. *SIAM Journal of numerical analysis*, 21 :272–283, 1984.
- [16] Charney.J.G, Fjortoft.R, and Von Neuman.J. Numerical integration of barotropic vorticity equation. *Tellus*, 2 :237–254, 1950.
- [17] Chowdhury.D.R, Subbarao.P, and Chaudhuri.P.P. Characterization of two-dimensional cellular automata using matrix algebra. *Information sciences*, 71 :289–314, 1993.
- [18] Copper.P. *The History and Sedimentology of Ancient Reef Systems : Topics in Geobiology 17*, chapter Evolution, radiations, and extinctions in Proterozoic to Mid-Paleozoic reefs, pages 89–120. Kluwer Academic Press, 2001.
- [19] Crank.J and Nicholson.P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type. *Proceedings of cambridge philosophical society*, 43 :50–67, 1947.
- [20] Das.A.K. On characterization of cellular automata with matrix algebra. *Information sciences*, 61 :251–277, 1992.
- [21] Daus.A.D, Frind.E.O, and Sudicky.E.A. Comparative error analysis in finite element formulation of the advection-dispersion equation. *Adv. Water. Res.*, 1985.
- [22] Delorme.M, Mazoyer.J, and Tougne.L. Discrete parabolas and circles on 2D cellular automata. *Theoretical Computer Science*, 218 :347–417, 1999.
- [23] Dubucs.J. Simulations et modélisation. *Pour la science*, 300 :156–158, 2002.
- [24] Durand.B and Roka.Z. The game of life : universality revisited. Technical report, Ecole Normale Supérieure de Lyon, 1998.
- [25] Ermentrout.G.B and Edelstein-Keshet.L. Cellular automata approaches to biological modeling. *Journal of Theoretical Biology*, 160 :97–133, 1993.
- [26] Family.F. Scaling of rough surface. *J. Phys. A*, 19 :L441–L446, 1986.

- [27] Family.F and Vicsek.T. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *J. Phys. A*, 18 :L75–L81, 1985.
- [28] Fatès.N. Les automates cellulaires : vers une nouvelle épistémologie ? Master's thesis, Université de Paris 1 Sorbonne, 2001.
- [29] Freytet.P and Verrecchia.E.P. Freshwater organisms that build stromatolites : a synopsis of biocrystallization by prokaryotic et eukaryotic algae. *Sedimentology*, 45 :535–563, 1998.
- [30] Fujikawa.H and Matsushita.M. Fractal growth of *Basillus subtilis* on agar plates. *J. Phys. Soc. Japan*, 58 :2117–2120, 1989.
- [31] Garland.T.H. *Fascinating Fibonacci's Mystery and Magic in Numbers*. Dale Seymour, 1987.
- [32] Gazit.Y, Baish.J.W, Safabakhsh.N, Leunig.M, Baxter.L.T, and Jain.R.K. Fractal characteristics of tumor vascular architecture during tumor growth and regression. *Microcirculation*, 4(4) :395–402, 1997.
- [33] Ginsburg.R.N. *Controversies in modern geology*, chapter Controversies about stromatolites : vices and virtues. Academic Press Limited, 1991.
- [34] Goujon.Ph. *Auto-organisation et émergence dans les sciences de la vie*, chapter De la logique à l'auto-organisation. OUSIA, 1999.
- [35] Gouyet.J.F. *Physique et structures fractales*. masson, 1992.
- [36] Grotzinger.J.P and Knoll.A.H. Stromatolites in precambrian carbonates : Evolutionary mileposts or environmental dipsticks ? *Annu. Rev. Earth Planet. Sci*, 27 :313–358, 1999.
- [37] Grotzinger.J.P and Rothman.D.H. An abiotic model for stromatolite morphogenesis. *Nature*, 383 :423–425, 1996.
- [38] Hartma.H and Tamayo.P. Reversible cellular automata and chemical turbulence. *Physica D*, 45 :293–306, 1990.
- [39] Hirsch.C. *Numerical computation of internal and external flows : fundamentals of numerical discretization*, volume 1. John Wiley and Sons, 1988.
- [40] Hofmann.H.J. *Stromatolites*, chapter Environmental diversity of Precambrian stromatolites, pages 599–612. Elsevier, 1976.
- [41] Hofmann.H.J. On aphebian stromatolites and riphean stromatolite stratigraphy. *Precambrian Research*, 5 :175–205, 1977.

- [42] Holland.H.D. *Early Life on Earth*, chapter Early Proterozoic atmospheric change, pages 237–244. Columbia University Press, 1994.
- [43] Jen.E. Aperiodicity in one dimensional cellular automata. *Physica D*, 45 :3–18, 1990.
- [44] Jullien.R. Les phénomènes d’agrégation et les agrégats fractals. *Ann.Télécommun*, 41(7-8) :343–372, 1986.
- [45] Kaandorp.J.A. *Fractal modelling : growth and form in biology*. Springer-Verlag, 1994.
- [46] Kaandorp.J.A and Kuebler.J.E. *The algorithmic beauty of seaweeds, sponges and corals*. Springer-Verlag, 2001.
- [47] Kardar.M, Parisi.G, and Zhang.Y.C. Dynamic scaling of growing interface. *Phys.Rev. Lett*, 56 :889–892, 1986.
- [48] Kasting.J.K. Box models for the evolution of atmospheric oxygen : an update. *Palaeogeog Palaeoclim Palaeoeco*, 9(7) :125–131, 1991.
- [49] Kertész.J and Vicsek.T. Diffusion limited aggregation and regular patterns : Fluctuations versus anisotropy. *J. Phys. A*, 19 :L257–L260, 1986.
- [50] Langton.C.G. Self-reproduction in cellular automata. *Physica*, 100 :135–144, 1984.
- [51] Langton.C.G. Studying artificial life with cellular automata. *Physica D*, 22 :120–149, 1986.
- [52] Lee.S.J, Browne.K.M, and Golubic.S. *Microbial sediments*, chapter On stromatolite lamination, pages 16–24. Springer-Verlag, 2000.
- [53] Leonard.B.P. Note on the von neumann stability of explicit one-dimensional advection schemes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 118 :29–46, 1994.
- [54] Lindenmayer.A. Mathematical model for cellular interactions in development. *J.Theo.Biol*, 18 :280–315, 1968.
- [55] Lubkin.G.B. Combustion in two dimensions yields fingering instability. *Physics today*, pages 19–21, Janvier 1999.
- [56] Mann.C.J. and Nelson.W.M. Microbialitic structures in Storr’s lake, San Salvador Island, Bahamas Islands. *Palaios*, 4 :287–293, 1989.
- [57] Matsushita.M and Fujikawa.F. Diffusion-limited growth in bacterial colony formation. *Physica A*, 168 :498–506, 1990.
- [58] Matsushita.M, Wakita.J, Itoh.H, Watanabe.k, Arai.T, Matsuyama.T, Sakaguchi.H, and Mimura.M. Formation of colony patterns by a bacterial cell population. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 274(1-2) :190–199, 1999.

- [59] Maunuksela.J, Myllys.M, Timonen.J, Alava M.J, and Ala-Nissila-T. Kardar-Parisi-Zhang scaling in kinetic roughening of fire fronts. *Physica A : Statistical and Theoretical Physics*, 266 :372–376, 1999.
- [60] Mazoyer.J. Computations on one-dimensional cellular automaton. *Annals of mathematics and artificial intelligence*, 16 :285–309, 1996.
- [61] Mazoyer.J and Terrier.V. Signals in one-dimensional. *Theoretical Computer Science*, 217 :53–80, 1999.
- [62] Meakin.P, Coniglio.A, Stanley.H.E, and Witten.T.A. Scaling properties for the surface of fractal and nonfractal objects : An infinite hierarchy of critical exponent. *Phys.Rev.A*, 34 :3325, 86.
- [63] Meakin.P, Ramanlal.P, Sander.L.M, and Ball.R.C. Ballistic deposition on surface. *Phys.Rev.A*, 34 :5091–5103, 1986.
- [64] Meinhardt.H. *Algorithmic Beauty of Sea Shells*. Springer-Verlag New York, Incorporated, 1998.
- [65] Moore.E.F. Machine models of self-reproducing. *Proc.Symp.Appl.Math*, 14 :17–33, 1962.
- [66] Myllys.M, Maunuksela.J, Timonen.J, Alava M.J, Ala-Nissila-T, Merikoski.J, and Timonen.J. Kinetic roughening in slow combustion of paper. *Physical Review. E*, 64 :036101, 1999.
- [67] Nittmann.J and Stanley.H.E. Tip splitting without interfacial tension and dendritic growth pattern arising from molecular anisotropy. *Nature*, 321 :663–668, 1986.
- [68] Nittmann.J and Stanley.H.E. Non-deterministic approach to anisotropic growth pattern with continuously tunable morphology : The fractal properties of some real snowflakes. *J. Phys. A*, 20 :L1185–L1191, 1987.
- [69] Pattisina.R. Programmation d’un automate cellulaire simulant la croissance des stromatolithes. Master’s thesis, Université de Bourgogne, 1998.
- [70] Pattisina.R. Programmation d’un automate cellulaire simulant la croissance de dendrites et de formations organo-minérales. DSER, Université de Bourgogne, 1999.
- [71] Pattisina.R. *Image coding and segmentation using combinatorial methods*. PhD thesis, Université de Bourgogne, France, 2002.
- [72] Pattisina.R and Verrecchia.E. A cellular automata and DLA model for growth surface simulation : application to stromatolites. *Terra Nostra*, 4 :295–300, 2002.

- [73] Pattisina.R, Verrecchia.E.P, and Diou.A. Simulation of stromatolite morphogenesis using cellular automata. In *Bio Geo Images 99 International Conference, Dijon, France*, 1999.
- [74] Pelcé.P. *Théorie des formes de croissance*. EDP sciences, 2000.
- [75] Pentecost.A and Riding.R. *Biom mineralization in lower plantes and animals*, chapter Clasification in Cyanobacteria, pages 73–90. Clarendon press, 1986.
- [76] Perrochet.P. *Méthodes de simulation operationnelles aux éléments finis pour la resolution de problèmes de transferts dominés par la convection*. PhD thesis, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 1992.
- [77] Perrochet.P and Bérod.D. Stability of the standard crank-nicolson-garlekin scheme applied to the diffusion-convection equation. some new insights. *Water Resources Research*, 29 :3291–3297, 1993.
- [78] Piskounov.N. *Calcul différentiel et intégral*. Mir, Moscou, 1976.
- [79] Prusinkiewicz.P and Hanan.J. Lindenmayer systems, fractals, and plants. *Lecture notes in biomathematics*, 79, 1989.
- [80] Prusinkiewicz.P and Lindenmayer.A. *The Algorithmic Beauty of Plants*. Springer-Verlag, New York, 1990.
- [81] Rappaz.J and Picasso.M. *Introduction à l'analyse numérique*. Presses polytechniques et universitaires romandes, 1998.
- [82] Rappaz.J and Zwahlen.B. *Eléments d'équations aux dérivées partielles pour ingénieurs*. Presses polytechniques romandes, 1988.
- [83] Reid.R.P and et.al. The role of microbes in accretion, lamination and early lithification of modern marine stromatolites. *Nature*, 406 :989–991, 2000.
- [84] Richtmyer.R.D and Morton.K.W. *Difference methods for initial value problems*. Wiley-Interscience, New York, 1967.
- [85] Riding.R. Stromatolite decline : a brief reassessment Facies. In Neuweiler.F, Reitner.J, and Monty.C, editors, *Biosedimentology of Microbial Buildups IGCP Project n° 380*, volume 36, pages 227–230, 1997.
- [86] Rozenberg.G and Salomaa.A. *Lindenmayer systems : impacts on theoretical computer science, computer graphics, and developmental biology*. Springer-Verlag, 1992.
- [87] Sainsaulieu.L. *Calcul scientifique : Cours et exercices corrigés*. Dunod, 2000.

- [88] Sander.L.M. Fractal growth processes. *Nature*, 322 :789–793, 1986.
- [89] Sarfati.J.B and Eriksson.K.A. Columnar stromatolites from the Early Proterozoic Schmidtsdrift Formation, northern Cape province, South Africa - part 1 : systematic and diagnostic features. *Paleont. afr*, 20 :1–26, 1977.
- [90] Sieburg.H.B, McCutchan.J.A, Clay.O.K, Cabalero.L, and Ostlund.J.J. Simulation of HIV infection in artificial immune systems. *Physica D*, 45 :208–227, 1990.
- [91] Sánchez.A, Bernal.M.J, and Riveiro.J.M. Multiparticle aggregation model for dendritic growth applied to experiments on amorphous cop alloys. *Physical Review E*, 50 :R679–R682, 1994.
- [92] Stanley.H.E and Meakin.P. Multifractal phenomena in physics and chemistry. *Nature*, 335(29) :405–409, 1988.
- [93] Stauffer.A and Sipper.M. On the relationship between cellular automata and l-systems : self-replication case. *Physica D*, 116 :71–80, 1998.
- [94] Steinberg.S and Liska.R. Stability analysis by quantifier elimination. *Mathematics and Computers in Simulation*, 42 :629–638, 1996.
- [95] Succi.S. *The lattice Boltzmann equation : for fluid dynamics and beyond*. Oxford University Press, 2001.
- [96] Sutherland.D.N. Comment on vold’s simulation of floc formation. *J.Colloid Interface Sci*, 22 :300–302, 1966.
- [97] Tian.J.P and Yao.K.L. Immiscible displacements of two phase non newtonian fluids in porous media. *Physics Letters A*, 261(3-4) :174–178, 1999.
- [98] Toffoli.T and Margolus.N. *Cellular Automata Machines : A New Environment for Modeling (Scientific Computation)*. MIT Press, 1987.
- [99] Toffoli.T and Margolus.N. Invertible cellular automata : a review. *Physica D*, 45 :229–253, 1990.
- [100] Trefethen.L.N. Instability of difference models for hyperbolic initial boundary value problems. *Comm. Pure and Applied Mathematics*, 37 :329–367, 1984.
- [101] Ulam.S. Random processes and transformation. *Sets, numbers and universes*, pages 326–337, 1950.
- [102] Veron.J. *Corals of the world*, volume 3. Australian Institute of Marine Science, 2000.
- [103] Verrecchia.E.P. Morphometry of microstromatolites in calcrete laminar crusts and a fractal model of their growth. *Mathematical geology*, 28(1) :87–109, 1996.

-
- [104] Vichnevetsky.R and Bowles.J.B. *Fourier analysis of numerical approximations of hyperbolic equations*. SIAM Publications, 1982.
- [105] Vicsek.T. *Fractal growth phenomena*. World Scientific, 1992.
- [106] Victor.J.D. What can automaton theory tell us about the brain. *Physica D*, 45 :205–207, 1990.
- [107] Visscher.P.T, Reid.R.P, and Bebout.B.M. Microscale observations of sulfate reduction : Correlation of microbial activity with lithified micritic laminae in modern marine stromatolites. *Geology*, 28(10) :919–922, 2000.
- [108] Vold.M.J. A numerical approach to the problem of sediment volume. *J.Coll.Sci*, 14 :168–174, 1959.
- [109] Vold.M.J. Sediment volume and structure in dispersions of anisotropic particles. *J.Phys.Chem*, 63 :1608–1612, 1959.
- [110] Von Neumann.J. The general and logical theory of automata. *Collected Works*, 5 :288–328, 1963.
- [111] Von Neumann.J. *Theory of self-reproducing automata*. University Illinois Press, 1966.
- [112] Walter.M.R. Stromatolites : the main geological source of information on the evolution of the early benthos. In Bengtson.S, editor, *Early Life on Earth*, volume 8, pages 270–286, 1994.
- [113] Walter.M.R., Bauld.J, and Brock.T.D. *Stromatolites, Developments in sedimentology*, chapter Microbiology and morphogenesis of columnar stromatolites (Conophyton, Vaccerrilla) from hot springs in Yellowstone National Park, pages 273–310. Elsevier, 1976.
- [114] Weimar.J.R. Cellular automata for reaction-diffusion systems. *Parallel Computing*, 23 :1699–1715, 1997.
- [115] Weimar.J.R. *Simulation with Cellular Automata*. Logos-Verlag, 1998.
- [116] Witten.T.A and Sander.L.M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon. *Phys.Rev.Lett*, 47(19) :1400–1403, 1981.
- [117] Witten.T.A and Sander.L.M. Diffusion-limited aggregation. *Phys.Rev.B*, 27(9) :5686–5697, 1983.
- [118] Wolfram.S. Statistical mechanics of cellular automata. *Reviews of Modern Physics*, 55 :601–644, 1983.
- [119] Wolfram.S. Algebraic properties of cellular automata. *Communications in Mathematical Physics*, 93 :219–258, 1984.

- [120] Wolfram.S. Universality and complexity in cellulat automata. *Physica D*, 10 :1–35, 1984.
- [121] Wolfram.S. *A new kind of science*. Wolfram media Inc, 2002.

Index

A

Agrégation, 35

Automate cellulaire, 59

 auto-reproducteur, 59

 définition, 62

 game of Life, 60

 matrice caractéristique, 69

 probabiliste, 63

 règle 18, 67

 règle 90, 67

 stochastique, 63

 unidimensionnel, 65

B

Ballistic Deposition, 10

C

Carbonates, 1

Consistance, 22

Convergence, 22

Cyanobactéries, 3

D

Discrétisation

 schéma centré, 19

 schéma progressif, 18

DLA, 35

 mathématiques et nature, 52

 MBDLA, 47

 mouvement des particules, 45

 relaxation, 49

 sticking probability, 39

 Witten et Sander, 35

DLA-CA, vi, 79

 excel, 106

 growth, 104

E

Edward et Wilkinson, 12

Erreur

 arrondie, 21

 troncature, 21

F

Fibonacci, 53

 L-système, 56

 nombre d'or, 55

J

John Conway, 60

K

KPZ, 9, 15

 Crank-Nicholson, 20

discret, 15
schéma discret complet, 17
schéma semi-discret, 17

L

L-système, 56
 automate cellulaire, 57

M

Matrice caractéristique
 à bord nul, 69
 circulaire, 69
Modélisation, iv
Modèle, iv

N

Nombre d'or, 55

R

Random Deposition, 10

S

Simulation, iv, 30
 explicative, iv
 prédictive, iv
Stabilité, 22
 critères, 26, 29
 méthode de Von Neumann, 23
 méthode matricielle, 27
Stanislaw Ulam, 59
Stephen Wolfram, 60
Stromatolithe, 1
 automate cellulaire, 72
 définition, 2

formation, 5
KPZ, 30
sulfato-reductor, 5
Sulfato-reductor, 5

V

Von Neumann, 59