

## Modélisation par Automates Cellulaires d'un Système Thermoélastique

MAROUANE ABDELLAOUI ET ABDELHAQ EL JAI

---

**RÉSUMÉ.** Dans ce papier on propose un modèle d'automates cellulaires, permettant de décrire à l'échelle microscopique le comportement thermoélastique d'un solide en déformation. Ce modèle est exploité pour simuler numériquement quelques propriétés génériques du phénomène dont le déplacement et l'énergie potentielle. La mise en oeuvre numérique de ce modèle est réalisée sous le code Matlab.

*Classification AMS 2000 des sujets.* 37B15, 81T80, 74F05.

*Mots clef et phrases.* automate cellulaire, modélisation, thermoélasticité.

---

### 1. Introduction

L'étude des phénomènes de déformation thermoélastique est motivée par plusieurs applications industrielles, notamment dans la conception de lit de percolation d'un pneu de véhicule. A cause de l'importance du phénomène, les études consacrées à ce vaste sujet sont considérables. L'étendue de la littérature concerne aussi bien l'analyse mathématique que l'approximation numérique des problèmes.

Parmi les approches de modélisation des systèmes physiques complexes, les automates cellulaires occupent aujourd'hui une place de plus en plus importante. L'invention des premiers automates cellulaires remonte aux travaux de John von Neumann dans les années quarante. Son but était la modélisation de la nature auto-reproductive des systèmes biologiques [11] qui, comme la plupart des systèmes vivants, échappent encore à un formalisme mathématique rigoureux. Il a construit un modèle qui a été simplifié par John Horton Conway en 1970 [5] avec le célèbre "jeu de la vie". Ce modèle a connu un grand succès du fait de sa simplicité, de sa mise en oeuvre informatique aisée et des développements variés auxquels il a donné lieu.

Vers les années quatre vingt avec les travaux de Stephen Wolfram [14], les automates cellulaires sont devenus un outil à vocation générale. Ils interviennent actuellement dans plusieurs disciplines allant des mathématiques à l'informatique en passant par la physique. Par ailleurs les recherches sur les automates cellulaires concernent de nombreuses applications parmi lesquelles les systèmes biologiques et écologiques constituent les domaines où l'on compte un grand nombre de publications [6, 8].

Les sciences physiques et chimiques furent naturellement les plus prédisposées à exploiter les possibilités d'utilisation des automates cellulaires comme outil de modélisation. Les applications concernent une gamme de domaines divers (écoulement de fluide et granulaire, percolation, modèle d'Ising, modèle cellulaire de gaz, etc.).

Citons encore pour exemples les travaux de Hardy et al, 1976 [9] où l'équation de Navier-stokes a été approchée par un modèle simple d'automates cellulaires. Toffoli

---

*Reçu:* le 11 décembre 2002.

[13] en 1984 a utilisé cette approche pour élaborer un modèle reproduisant l'équation des ondes. Une autre étude a été réalisée par Chen et ses collaborateurs en 1990 [3], dont le but est de résoudre l'équation de Poisson, à l'aide des automates cellulaires, avec des conditions aux limites de type Dirichlet. Hersbach [10] a proposé une solution de l'équation de Boltzmann dans le cas monodimensionnel basée sur une règle probabiliste d'automate cellulaire.

Le problème de mécanique de contact a été fructueusement abordé par les automates cellulaires. La déformation et la fracture d'un solide ont été traités par Chopard [4], suivis par un récent travail [1] concernant un couplage déformation-contact avec une base rigide. Dans ce travail, on étend les résultats au cas d'une déformation thermoélastique.

Ce document sera organisé comme suit. Tout d'abord dans la section 2 figure le modèle aux dérivées partielles décrivant le problème physique. Une définition des automates cellulaires a été abordée dans la section 3, puis nous avons formulé le problème en utilisant une approche purement microscopique d'automates cellulaires. L'objet de la section 4 est la mise en oeuvre du modèle obtenu à l'aide d'un code Matlab.

## 2. Préliminaires

On considère un corps matériel défini dans un domaine borné  $\Omega$  dans  $\mathbb{R}^2$ , avec une frontière régulière  $\Gamma$  partitionnée en deux parties mesurables  $\Gamma_1, \Gamma_2$ , tel que  $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ . Soit  $X = (x, y) \in \Omega$ ,  $T > 0$  et  $]0, T[$  l'intervalle de temps en question.

On va étudier, pendant un intervalle de temps  $]0, T[$ , l'évolution du corps matériel due à l'application de forces de volume  $f$  et une source de chaleur de température  $\theta$  (voir Figure 1). A  $t = 0$  la structure ne subit aucune force.

Le problème physique peut être modélisé par les équations aux dérivées partielles

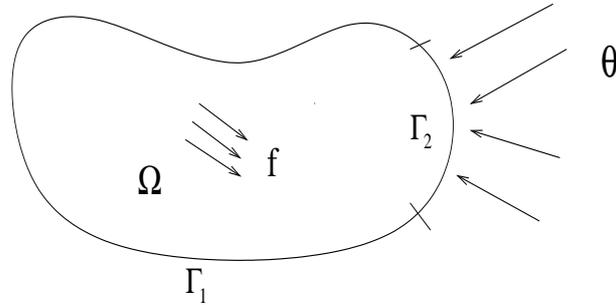


FIG. 1 -. *Le corps thermoélastique.*

suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \operatorname{Div} \sigma + f = \rho \ddot{u} \text{ dans } \Omega \times ]0, T[ \\ (2) \rho c \frac{\partial \theta}{\partial t} - k \frac{\partial \theta^2}{\partial X^2} = -\alpha \theta_0 \frac{\partial u^2}{\partial t \partial X} \text{ dans } \Omega \times ]0, T[ \\ (3) \sigma = (2\mu + \lambda) \frac{\partial u}{\partial X} - (3\lambda + 2\mu)\alpha(\theta - \theta_0) \end{array} \right. \quad (1)$$

(1) représente l'équation de mouvement donnée par la loi de Newton.  
 L'évolution de la température est gouvernée par l'équation de l'énergie (2), où  $c$  est la capacité calorifique du matériau et  $k$  est le coefficient de transfert conductif.  
 (3) représente le comportement du corps matériel engendré par la loi de comportement thermoélastique. où les scalaires  $\mu$  et  $\lambda$  sont les coefficients de Lamé,  $\alpha$  est le coefficient de diffusion de chaleur et  $\theta_0$  est la température initiale.

$$\left\{ \begin{array}{l} (4) \quad u = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1 \times ]0, T[ \\ (5) \quad \theta(t) = h(X) \quad \text{sur } \Gamma_2 \times ]0, T[ \end{array} \right. \quad (2)$$

(4) et (5) représentent les conditions aux limites de déplacement et les conditions aux limites thermiques.

$$\{ (6) \quad u(X,0) = u_0 \quad , \quad \dot{u}(X,0) = u_1 \quad , \quad \theta(X,0) = \theta_0 \quad \text{dans } \Omega \quad (3)$$

Les conditions initiales sont données par l'équation (6), où  $f$ ,  $\theta_0$ ,  $u_0$ ,  $u_1$ ,  $\alpha$ ,  $c$ ,  $k$ ,  $\rho$ ,  $\mu$  et  $\lambda$  sont donnés. Ce modèle présente des difficultés, aussi bien au niveau mathématique (non linéaire) qu'au niveau de sa mise en oeuvre numérique, d'où l'idée d'utiliser les automates cellulaires comme outil de modélisation.

### 3. Position du problème par automates cellulaires

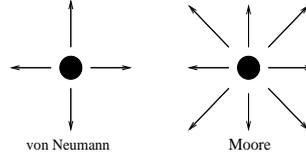
**3.1. Rappel sur les automates cellulaires.** Un automate cellulaire est un système dynamique discret, de conception simple basée sur la donnée d'un réseau uniforme qui définit l'espace cellulaire. Chaque élément de cet espace, appelé cellule, peut prendre plusieurs états possibles dans un ensemble discret donné. L'état d'une cellule est susceptible de changer à des moments fixes, au moyen d'une règle de transition fondée sur la configuration de l'espace d'échange entre cette cellule et ses voisins, appelé voisinage.

Le fonctionnement d'un automate cellulaire peut être déterministe ou probabiliste. On peut donc résumer les caractéristiques principales d'un automate cellulaire comme étant un ensemble des états, un concept de voisinage et un ensemble de règles de transition. Un automate cellulaire est défini par la donnée d'un quadruplet  $\mathcal{A} = (\mathcal{T}, v, \mathcal{E}, f)$  où :

- $\mathcal{T}$  est un treillis de dimension  $d$  formé par des cellules  $c$  disposées selon un arrangement qui dépendra de la dimension de l'espace et de la forme choisie pour les cellules. C'est  $\mathcal{T}$  qui définit l'espace cellulaire.
- $v$  est un ensemble de cellules avec lesquelles une cellule donnée  $c$  peut interagir, appelé voisinage. On peut distinguer, dans le cas d'un automate cellulaire bidimensionnel, plusieurs types de voisinages à savoir von Neumann, Moore, uniforme ou arbitraire. (voir Figure 2).
- $\mathcal{E}$  est un ensemble fini de valeurs susceptibles d'être prises par l'état d'une cellule. C'est en général un anneau cyclique avec  $\text{card } \mathcal{E} = k$ .
- $f$  est une fonction de transition d'état qui définit la dynamique de l'automate cellulaire donnée par :

$$f(e_t(v(c))) = e_{t+1}(c)$$

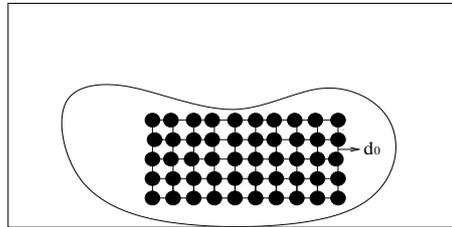
où  $e_t(c)$  désigne l'état de la cellule  $c$  à l'instant  $t$  et  $e_t(v(c))$  l'état de son voisinage.


 FIG. 2 –. *Exemple de voisinage*

On parle également de configuration d'un automate cellulaire donnée par l'application  $e : \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{E}$  qui fait correspondre à chaque cellule  $c$  de  $\mathcal{T}$  une valeur prise dans  $\mathcal{E}$  qui constituera l'état de la cellule  $c$  à l'instant  $t$ .

**3.2. Modélisation du problème thermoélastique.** L'approche par automate cellulaire qu'on va utiliser est étroitement liée au mécanisme par lequel la déformation thermoélastique apparaît dans le système étudié. On étudie le mouvement des particules, provoqué par l'action des sollicitations mécaniques et thermiques. Donc c'est une approche d'un point de vue purement microscopique.

Le solide étudié sera représenté par un réseau de particules dans un système de deux dimensions (Figure 3). La structure de ce solide se rencontre dans certaines céramiques (verres minéraux) et dans un grand nombre de polymères organiques (verres organiques, caoutchouc). Les arrangements se trouvent à l'équilibre lorsque les particules


 FIG. 3 –. *Différentes particules constituant le solide.*

sont distantes d'une certaine valeur  $d_0$ .

**3.2.1. La force exercée.** Lorsqu'on déforme un solide thermoélastique, la force appliquée induit le déplacement des particules en dehors de leur positions d'équilibre. On se limite aux petites déformations, la force  $f_k$  est proportionnelle à la variation de la distance interatomique  $d_0$  parallèlement à la direction de déformation. (voir Figure 4).

$$f_k(i,j,t) = C \Delta x_k(i,j,t) + \alpha \Delta \theta \quad (4)$$

$C$  est une constante de proportionnalité qui est en fonction de l'énergie de liaison et  $\alpha$  est le coefficient de diffusion de la chaleur.

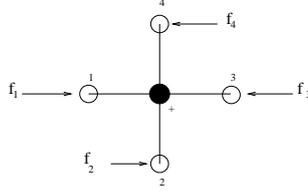


FIG. 4 –. La direction des forces appliquées sur les quatres particules voisines.

**3.2.2. Energie potentielle.** Soit une action mécanique de résultante  $f$  appliquée sur une particule en mouvement. On appelle puissance développée par  $f$  la quantité:

$$P = f.v$$

avec

$$v = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

D'autre part, on peut écrire la puissance  $P$  en fonction de l'énergie potentielle  $E_p$ .

$$P = \frac{\Delta E_p}{\Delta t}$$

Alors

$$\Delta E_p = P. \Delta t = f. v. \Delta t = f. \frac{\Delta x}{\Delta t}. \Delta t = f. \Delta x$$

Finalement, l'énergie potentielle  $E_p$  entre deux positions distantes de  $\Delta x$  est donnée par

$$E_p = f. \Delta x \quad (5)$$

Pour un système de  $n$  particules l'énergie potentielle totale est donnée sous la forme suivante:

$$E_{ptot} = \sum_{i=1}^{i=n} f_i \Delta x_i \quad (6)$$

**3.2.3. Déformation thermoélastique.** Lorsque la température de fusion du solide  $\theta_f$  dépasse une certaine valeur, le déplacement des particules devient important en fonction de la température  $\theta$  et de la vitesse de diffusion des particules  $v(\theta)$ . Ce déplacement est dû à l'augmentation du nombre des lacunes entre ces particules.

$$v(\theta) = v_0 \exp \left( \frac{\Delta H_t + \Delta H_f}{R.\theta} \right) \quad (7)$$

$\Delta H_t$  est l'enthalpie d'activation de migration de la lacune.

$\Delta H_f$  est l'enthalpie de formation des lacunes

$R$  est la constante des gaz parfaits.

Dans ces conditions de température, on observe que lorsqu'on applique une contrainte constante, il se produit une déformation en fonction du temps, même dans le cas où la contrainte est très faible. Cette déformation se produit plutôt par un réarrangement atomique suivant le champ de contrainte, c'est la déformation par diffusion.

Les lacunes constituent un type de défaut ponctuel très important, provoquées par l'application d'un flux de chaleur à haute température. Ce phénomène est appelé

déplacement par diffusion dans un corps solide et qui contrôle dans une large mesure le comportement des matériaux à haute température.

Pour qu'une particule située au voisinage d'une lacune se déplace, il faut qu'elle

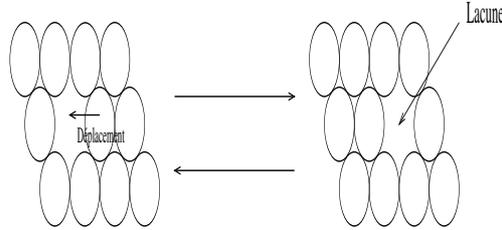


FIG. 5 – Le déplacement aléatoire et réversible d'une particule au voisinage d'une lacune.

ait l'énergie suffisante pour écarter légèrement les particules adjacentes de leur position d'équilibre (Figure 5). C'est un processus qui est activé par une élévation de température et par une faible énergie de liaison.

Dans un solide élastique, le nombre de particules qui possèdent l'énergie suffisante pour franchir une barrière de potentiel  $\Delta G_t$  est donné par une distribution du type exponentielle (Maxwell-Boltzmann) où la température absolue  $\theta$  est exprimée en degré Kelvin(K).

Le déplacement des particules qui dépend fortement de la température et de la force mécanique appliquée, varie proportionnellement par rapport au coefficient de diffusion  $\alpha$ .

$$u_i = A \alpha \sigma_i^n \quad (8)$$

$A$  est une constante et  $n$  est un exposant dont la valeur pour la déformation par diffusion est 1.

Pour

$$n = 1 \quad \text{et} \quad \sigma_i^n = \frac{f_i}{S}$$

où  $S$  est la surface sur laquelle la force  $f_i$  est appliquée,  $u_i$  devient.

$$u_i = A' \frac{f_i}{S} \quad (9)$$

Ce qui donne la loi d'évolution du déplacement des particules.

**3.2.4. Déplacement des particules.** Supposons que la particule centrale a une couleur noire, et ses quatre voisines subissant des efforts extérieurs le long de l'axe  $OX$ . Alors le mouvement de la particule centrale résulte des forces  $f_1, f_2, f_3, f_4$  appliquées sur les quatre voisines blanches, engendrant leur déplacements  $u_1, u_2, u_3, u_4$  le long de l'axe des abscisses  $OX$ . (voir Figure 6).

Le mouvement de la particule centrale (ou noire) va dépendre des déplacements de l'une ou des quatre voisines blanches.

On peut définir les déplacements des particules blanches selon l'axe  $OX$  par

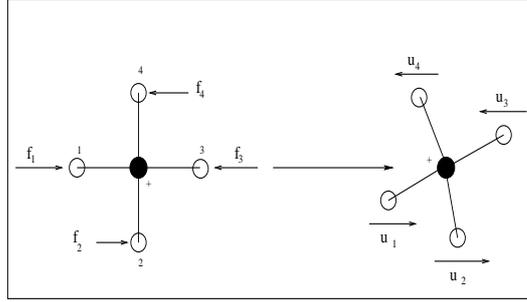


FIG. 6 –. *Le déplacement des particules sous l'effet des forces extérieures.*

$$u_1(i, j, t) = \frac{1}{S} (D(x(i-1, j, t) - x(i, j, t)) + D'(\theta - \theta_0))$$

$$u_2(i, j, t) = \frac{1}{S} (D(x(i, j-1, t) - x(i, j, t)) + D'(\theta - \theta_0))$$

$$u_3(i, j, t) = \frac{1}{S} (D(x(i+1, j) - x(i, j, t)) + D'(\theta - \theta_0))$$

$$u_4(i, j, t) = \frac{1}{S} (D(x(i, j+1) - x(i, j, t)) + D'(\theta - \theta_0))$$

la loi d'évolution du déplacement des particules noires est obtenue en utilisant la même démarche représentée dans [1].

$$\begin{pmatrix} u_1(i+1, j, t+1) \\ u_2(i, j+1, t+1) \\ u_3(i-1, j, t+1) \\ u_4(i, j-1, t+1) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} u_1(i, j, t) \\ u_2(i, j, t) \\ u_3(i, j, t) \\ u_4(i, j, t) \end{pmatrix} \quad (10)$$

A est une matrice de propagation de la déformation donnée par:

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

#### 4. Approche numérique

**4.1. Le modèle d'automates cellulaires.** L'automate cellulaire est défini comme suit

**4.1.1. Ensemble des états.** Afin d'assurer l'évolution de l'ensemble des règles de transition concernant le déplacement des particules, on va choisir cinq états que peuvent prendre ces particules.

$$\mathcal{E} = \{e_i, 0 \leq i \leq 4\}$$

$$e_i = \begin{cases} 0 & \text{si la particule est immobile} \\ 1 & \text{si la particule se déplace dans la direction ouest-est.} \\ 2 & \text{si la particule se déplace dans la direction sud-nord} \\ 3 & \text{si la particule se déplace dans la direction nord-sud} \\ 4 & \text{si la particule se déplace dans la direction est-west} \end{cases}$$

**4.1.2. Règle de transition.** La loi d'évolution de déplacement est générée par la règle suivante

$$u_1(i+1, j, t+1) = \begin{cases} 1 & \text{si } u_1 = 1, u_2 = 2, u_3 = 4, u_4 = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$u_2(i, j+1, t+1) = \begin{cases} 2 & \text{si } u_1 = 1, u_2 = 2, u_3 = 4, u_4 = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

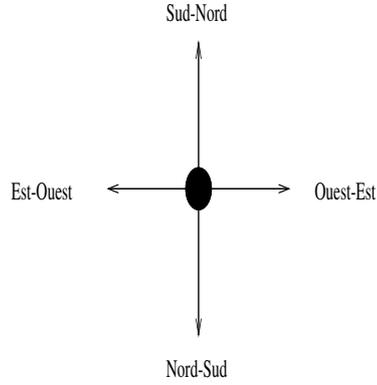
$$u_3(i-1, j, t+1) = \begin{cases} 4 & \text{si } u_1 = 1, u_2 = 2, u_3 = 4, u_4 = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$u_4(i, j-1, t+1) = \begin{cases} 3 & \text{si } u_1 = 1, u_2 = 2, u_3 = 4, u_4 = 3 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

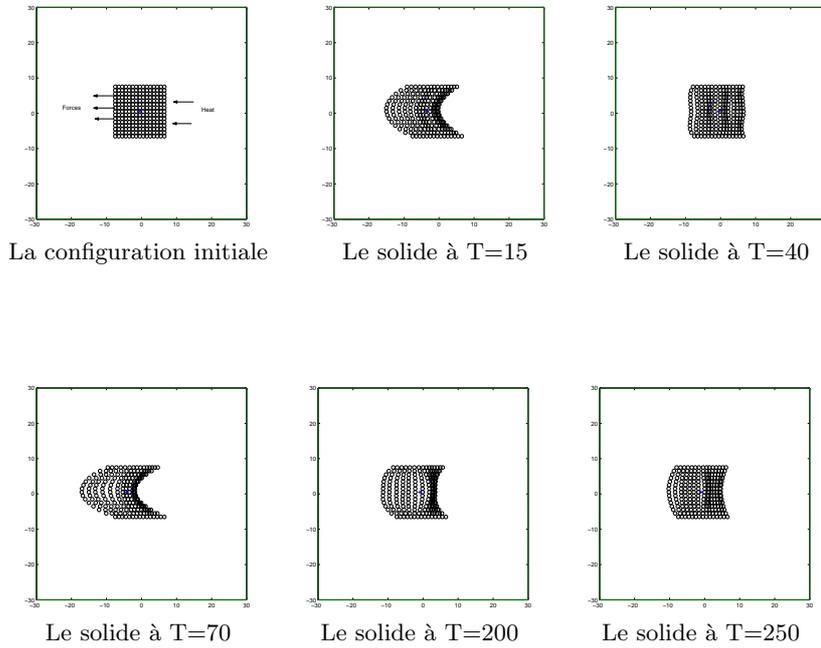
Les valeurs choisies sont déduites de

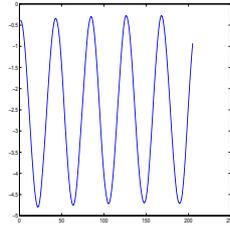
$$\begin{cases} \frac{1}{2}[u_1 + u_2 - u_3 + u_4] = 1 & \text{pour } u_1(i+1, j, t+1) \\ \frac{1}{2}[u_1 + u_2 + u_3 - u_4] = 2 & \text{pour } u_2(i, j+1, t+1) \\ \frac{1}{2}[-u_1 + u_2 + u_3 + u_4] = 4 & \text{pour } u_3(i-1, j, t+1) \\ \frac{1}{2}[u_1 - u_2 + u_3 + u_4] = 3 & \text{pour } u_4(i, j-1, t+1) \end{cases}$$

**4.1.3. Voisinage.** On considère un voisinage de type von Neumann présenté dans la figure 7. Ce type de voisinage est complètement adapté à la configuration considérée du treillis bidimensionnel.

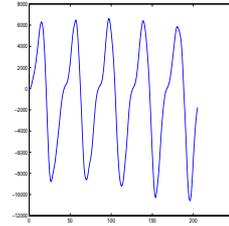
FIG. 7 –. *Voisinage de type von Neumann*

**4.2. Simulation.** L'exemple de simulation qu'on a considéré concerne le déplacement des particules constituant le solide thermoélastique de dimension  $15 \times 15$ . Ce déplacement est engendré par l'application des forces extérieures  $f$  et la source de chaleur de température  $\theta$ . Au cours de cette simulation, on observe aussi la variation du déplacement du centre de masse ainsi que l'énergie potentielle du système en fonction du temps.





Déplacement du centre de masse sur [ 0,250]



Energie potentielle sur [ 0,250]

Les simulations obtenues montrent la déformation thermoélastique d'un solide représenté par un ensemble de particule . On constate que la chaleur a un effet considérable sur la déformation en comparant avec les résultats de simulation du travail [1]. le Centre de masse ainsi que l'énergie potentielle varient d'une manière sinusoïdale en fonction du temps. Cette variation peut être assimilée à une propagation d'onde.

## 5. Conclusion

L'objectif de ce travail consistait à utiliser les automates cellulaires pour l'étude d'un problème de déformation thermoélastique. Notre choix pour ce type de modèles est motivé par les nombreux avantages qu'ils offrent tant sur le plan théorique que sur le plan pratique. D'une part, ils constituent un outil de modélisation efficace pour plusieurs phénomènes difficiles à représenter ou à mettre en oeuvre par des approches classiques tels que les problèmes de déformation et de contact. D'autre part, ils permettent la simulation d'une large variété de systèmes complexes incluant les processus physiques ou environnementaux.

L'usage des modèles d'automates cellulaires pour représenter et simuler la déformation thermoélastique est très satisfaisante. Grâce aux simulations, nous avons pu visualiser le comportement thermoélastique et le comparer avec le comportement élastique étudié dans [1].

Ce travail mérite d'être poursuivi en vue d'élargir l'utilisation des automates cellulaires à d'autres types de problèmes tel que le contact avec une base déformable.

## Références

- [1] M. Abdellaoui, A. El Jai, M. Shillor, Cellular Automata Model for a Contact Problem, *International Journal of Mathematical and Computer Modelling*, à paraître.
- [2] M. Abdellaoui, A. El Jai, Cellular Automata for Contact Mechanics Problem, *CD-ROM du Congrès International des Mathématiques Appliquées, Les 7e Journées d'Analyses Numérique et d'Optimisation (JANO7)*, Tanger, Maroc, 17-19 avril 2002.
- [3] H. Chen, W. H. Matthaeus, L. W. Klein, *Theory of Multicolor Lattice Gas: a Cellular Automata Poisson Solver. j. Comput. A*, 1990.
- [4] B. Chopard, M. Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, Cambridge University, 1998.
- [5] J. H. Conway, *Game of Life*, 1976.
- [6] R. L. Colasanti, J. P. Grime, Resource Dynamics and Vegetation Process: a Deterministic Model Using Two-dimensional Cellular Automata, *Functional Ecology*, **7**, 169-176 (1993).
- [7] S. El Yacoubi, A. El Jai, P. Jacewicz, Lucas: an Original Tool for Landscape Modeling, *Environmental Modeling and Software Journal*, à paraître.
- [8] J.M Greenberg, S. P. Hasting, Spatial Patterns for Discrete Models of Diffusion in Exitable Media, *Siam J. App. Math.*, **34**, 515-523 (1978).

- [9] J. Hardi, O. De Pazzis, Y. Pomeau, Molecular Dynamics of Classical Lattice Gas: Transport Properties and Time Correlation Functions, *Physical Review*, **13**, 1949-1960 (1976).
- [10] H. Hersbach, A cellular Automata for a Solvable Boltzmann Equation, *Complex Systems*, **4**, 251-268 (1990).
- [11] V. Neumann, *Theory of Self-Reproducing Automata*, In: Burks, A.(Ed.), Univesity of Illinois Press, 1966.
- [12] M. Shillor, Recent Advances in Contact Mechanics, *Special issue of Math. Computer. Modelling*, **28**, 4-8 (1998).
- [13] T. Toffoli, Cellular Automata as an Alternative to Differential Equation in Modeling Physics, *Physica D*, **10**, 117-127 (1984).
- [14] S. Wolfram, *Cellular Automata and Complexity: collected papers*, Addison-Wersley Publishing company, 1994.

(Marouane Abdellaoui) LABORATOIRE DE THÉORIE DES SYSTÈMES  
UNIVERSITÉ DE PERPIGNAN  
52 AVENUE DE VILLENEUVE, 66860 PERPIGNAN, FRANCE  
TEL/FAX: 33-468661760  
*E-mail address:* [abdellao@univ-perp.fr](mailto:abdellao@univ-perp.fr)

(Abdelhaq El Jai) LABORATOIRE DE THÉORIE DES SYSTÈMES  
UNIVERSITÉ DE PERPIGNAN  
52 AVENUE DE VILLENEUVE, 66860 PERPIGNAN, FRANCE  
TEL/FAX: 33-468661760  
*E-mail address:* [eljai@univ-perp.fr](mailto:eljai@univ-perp.fr)