

TP Méthodes Numériques :

Modélisation du nuage ionique autour d'un polymère chargé

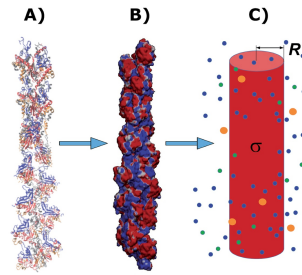


Figure 1: Représentation schématique de la structure d'un filament d'actine (A) et du potentiel électrostatique à sa surface (B). Un modèle cylindrique de l'actine entourée d'un nuage de contre-ions est représenté en C.

Ce TP constitue une introduction à la résolution d'équations non linéaires à travers la simulation d'un modèle physique de la distribution de charges ioniques autour d'un polymère. Il vous permettra de vous familiariser avec l'implémentation et l'utilisation de certaines méthodes itératives pour les systèmes non linéaires ainsi qu'avec la factorisation LU pour la résolution de systèmes linéaires.

- **Contacts :** guillaume.james@univ-grenoble-alpes.fr, fatima.karbou@meteo.fr
- Rédiger un **compte-rendu** dactylographié (fichier pdf). Vous devez expliciter les méthodes employées, présenter et commenter avec soin les résultats obtenus. Nous conseillons d'utiliser le logiciel \LaTeX . Pour un éditeur en ligne adapté au travail collaboratif : <https://fr.overleaf.com/>.
- **Travail en binôme.** Il n'y a qu'un seul rapport à rendre par binôme.
- **Remise du rapport:** le TP est à rendre au plus tard le **11 Mai 2020**.
- Programmes de calcul dans un langage au choix : **Python**, **Matlab**, **Scilab** ou **C**. Le code source n'est pas demandé, mais le rapport décrira les programmes sous forme de pseudo-code, comme dans l'exemple suivant :

Algorithm 1 Schéma d'Euler pour $x' = \sin x$

Entrées: condition initiale $x(0)$, pas de temps h

Sorties: $(x_k)_{0 \leq k \leq k_{\max}}$ avec $x_k \approx x(kh)$

```

 $x_0 \leftarrow x(0)$ 
for  $k = 0, \dots, k_{\max} - 1$  do
     $x_{k+1} \leftarrow x_k + h \sin x_k$ 
end for
```

1 Introduction

1.1 Modèles et contenu du TP

La modélisation du comportement électrique des polymères en solution constitue un problème important, notamment en ce qui concerne les polymères biologiques qui interviennent dans le fonctionnement de nos cellules (mouvement cellulaire, signaux ioniques,...). Dans ce TP, nous allons étudier un modèle simple décrivant le potentiel électrique et la distribution de charges autour d'un polymère possédant des charges de surface, placé dans une solution ionique typique d'un milieu biologique. Un exemple est donné par un filament d'actine représenté dans la figure 1. Ce polymère biologique est chargé négativement en surface et entouré d'un nuage d'ions maintenus dans son voisinage par les interactions électrostatiques.

Un modèle classique décrivant le potentiel électrostatique ϕ autour d'un polymère chargé dans une solution ionique est l'équation de Poisson-Boltzmann (PB) :

$$\frac{d^2\phi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} = \frac{2en_0}{\epsilon} \operatorname{sh}\left(\frac{e\phi}{k_B T}\right), \quad r > R, \quad (1)$$

avec les conditions aux limites :

$$\phi'(R) = -\frac{\sigma}{\epsilon}, \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} \phi(r) = 0. \quad (2)$$

Le polymère est assimilé à un cylindre infini de rayon R et de densité de charge surfacique σ , autour duquel se trouve un solvant constitué d'ions monovalents (par exemple K^+ et Cl^-). La concentration de ces ions à l'infini est notée n_0 , e désigne la charge positive élémentaire, ϵ la permittivité diélectrique du solvant, k_B la constante de Boltzmann, T la température.

A partir de calcul de ϕ , on obtient le champ électrique $E = -\nabla \phi$ autour du polymère et les concentrations de charges positives et négatives n_{\pm} dans le nuage ionique, données par la distribution de Boltzmann :

$$n_{\pm} = n_0 \exp\left(\mp \frac{e\phi}{k_B T}\right). \quad (3)$$

En posant $u(x) = -\frac{e}{k_B T} \phi(Rx)$, on se ramène à une version adimensionnée du modèle PB :

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} = k^2 \operatorname{sh}(u), \quad x > 1, \quad (4)$$

$$u'(1) = -\mu, \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} u(x) = 0, \quad (5)$$

où les paramètres sans dimension k et μ sont fonction des constantes et paramètres physiques listés plus haut. On peut montrer que le problème (4)-(5) admet une solution u unique. Dans ce TP, on fixera $k = 1$ et on calculera la solution u pour différentes valeurs de μ , en utilisant un schéma aux différences finies et des méthodes itératives non-linéaires (méthode des approximations successives et méthode de Newton). La connaissance de u et donc de ϕ fournit ensuite la distribution de charges ioniques autour du polymère par la formule (3).

On étudiera également le modèle de Debye-Hückel plus simple :

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} = k^2 u, \quad x > 1, \quad (6)$$

qui correspond à l'approximation linéaire $\text{sh}(u) \approx u$. Pour cela, on utilisera un schéma aux différences finies et on résoudra le système linéaire correspondant par factorisation LU .

1.2 Schéma aux différences finies

Nous allons décrire un schéma aux différences finies du second ordre permettant d'approcher les solutions de (4)-(5) et de (5)-(6). Dans ce qui suit, on pose $f(u) = \text{sh}(u)$ dans le cas de l'équation (4) et $f(u) = u$ pour l'équation (6).

Pour les calculs numériques, on suppose $x \in [1, 1 + \ell]$ avec $k^{-1} \ll \ell$. Les points de discrétisation sont $x_i = 1 + ih$ avec un pas de discrétisation $h = \frac{\ell}{n} \ll k^{-1}$ (dans les applications numériques, on fixera $k = 1$ et $\ell = 10$). On note u_i une approximation numérique de $u(x_i)$.

On remplace la condition aux limites $\lim_{x \rightarrow +\infty} u(x) = 0$ par $u(1 + \ell) = 0$, correspondant à $u_n = 0$. Pour approcher la condition aux limites $u'(1) = -\mu$, on remarque que la solution vérifie

$$u(1 + h) = u(1) + h u'(1) + \frac{h^2}{2} (k^2 f(u(1)) - u'(1)) + O(h^3)$$

en effectuant un développement de Taylor et en évaluant $u''(1)$ avec (4) ou (6). La condition $u'(1) = -\mu$ équivaut donc à

$$-\mu(2 - h) = \frac{2}{h} (u(1 + h) - u(1)) - h k^2 f(u(1)) + O(h^2).$$

En négligeant le reste d'ordre 2, on obtient

$$2(u_1 - u_0) - h^2 k^2 f(u_0) = \mu h (h - 2). \quad (7)$$

Par ailleurs, en approchant les dérivées de l'équation (4) ou (6) par des différences finies centrées, on obtient pour $i = 1, \dots, n - 1$:

$$\frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2} + \frac{1}{x_i} \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h} = k^2 f(u(x_i)) + O(h^2).$$

En négligeant le reste d'ordre 2, on obtient

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} + \frac{h}{2x_i} (u_{i+1} - u_{i-1}) - k^2 h^2 f(u_i) = 0, \quad 1 \leq i \leq n - 1. \quad (8)$$

Le schéma aux différences finies pour l'équation (4) ou (6) correspond au système des n équations (7)-(8) à n inconnues u_0, u_1, \dots, u_{n-1} (on rappelle que $u_n = 0$).

2 Questions

2.1 Factorisation LU des matrices tridiagonales

1. On considère une matrice $A \in M_n(\mathbb{R})$ tridiagonale admettant une factorisation $A = LU$. On note $a \in \mathbb{R}^n$ la diagonale de A , $b \in \mathbb{R}^{n-1}$ la sous-diagonale et $c \in \mathbb{R}^{n-1}$ la sur-diagonale. On rappelle que L et U sont bidiagonales, et on note $l \in \mathbb{R}^{n-1}$ la sous-diagonale de L (de diagonale unité) et $v \in \mathbb{R}^n$ la diagonale de U (de sur-diagonale c). Rappeler les formules de récurrence qui déterminent

l et v et écrire une fonction correspondante `[l,v]=lutri(a,b,c)`. Donner un exemple de votre choix pour tester cette fonction.

On décompose la résolution d'un système tridiagonal $Ax = z \in \mathbb{R}^n$ en une étape de factorisation $A = LU$, suivie de la résolution de $Ly = z$ (étape de descente) et $Ux = y$ (étape de remontée).

2. Rappeler les formules de récurrence qui déterminent y et écrire une fonction correspondante `y=descente(l,z)`. Donner un exemple de votre choix pour tester cette fonction.

3. Rappeler les formules de récurrence qui déterminent x et écrire une fonction correspondante `x=remonte(v,c,y)`. Donner un exemple de votre choix pour tester cette fonction.

2.2 Résolution de l'équation de Debye-Hückel

On considère le cas $f(u) = u$, $k = 1$ et $h = 10/n$ dans (7)-(8), qui conduit au système linéaire :

$$-(2 + h^2)u_0 + 2u_1 = \mu h(h - 2), \quad (9)$$

$$\left(1 - \frac{h}{2x_i}\right)u_{i-1} - (2 + h^2)u_i + \left(1 + \frac{h}{2x_i}\right)u_{i+1} = 0, \quad 1 \leq i \leq n-2, \quad (10)$$

$$\left(1 - \frac{h}{2x_{n-1}}\right)u_{n-2} - (2 + h^2)u_{n-1} = 0. \quad (11)$$

On note $A \in M_n(\mathbb{R})$ la matrice tridiagonale du système linéaire (9)-(10)-(11).

4. Montrer que A est inversible et admet une factorisation $A = LU$.

5. On fixe $\mu = 1$. En utilisant les questions **1** à **3**, calculer $(u_0, u_1, \dots, u_{n-1})$ pour $n = 1000$, c'est à dire $h = 10^{-2}$. Tracer le graphe de u_i en fonction de x_i .

6. Toujours pour $\mu = 1$, résoudre le système (9)-(10)-(11) pour différentes valeurs de n et tracer le graphe de u_0 en fonction de h . Commenter les résultats.

2.3 Méthode des approximations successives pour l'équation PB

On considère le cas $f(u) = \text{sh}(u)$, $k = 1$ et $h = 10/n$ dans (7)-(8), qui conduit au système non linéaire :

$$-(2 + h^2)u_0 + 2u_1 = h^2 g(u_0) + \mu h(h - 2), \quad (12)$$

$$\left(1 - \frac{h}{2x_i}\right)u_{i-1} - (2 + h^2)u_i + \left(1 + \frac{h}{2x_i}\right)u_{i+1} = h^2 g(u_i), \quad (13)$$

$$1 \leq i \leq n-2,$$

$$\left(1 - \frac{h}{2x_{n-1}}\right)u_{n-2} - (2 + h^2)u_{n-1} = h^2 g(u_{n-1}), \quad (14)$$

où on note $g(u) = \text{sh}(u) - u$.

Pour résoudre le système (12)-(13)-(14), on calcule la suite d'approximations

successives $u^{(k)} = (u_0^{(k)}, u_1^{(k)}, \dots, u_{n-1}^{(k)})$ définies par récurrence :

$$-(2 + h^2) u_0^{(k+1)} + 2 u_1^{(k+1)} = h^2 g(u_0^{(k)}) + \mu h (h - 2), \quad (15)$$

$$(1 - \frac{h}{2x_i}) u_{i-1}^{(k+1)} - (2 + h^2) u_i^{(k+1)} + (1 + \frac{h}{2x_i}) u_{i+1}^{(k+1)} = h^2 g(u_i^{(k)}), \quad (16)$$

$$1 \leq i \leq n - 2,$$

$$(1 - \frac{h}{2x_{n-1}}) u_{n-2}^{(k+1)} - (2 + h^2) u_{n-1}^{(k+1)} = h^2 g(u_{n-1}^{(k)}), \quad (17)$$

avec $u^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ solution du système (9)-(10)-(11).

Le schéma itératif (15)-(16)-(17) s'écrit $A u^{(k+1)} = G(u^{(k)})$, où $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ est l'application définie par le membre de droite de (15)-(16)-(17).

Pour les applications numériques, on fixera $n = 1000$, c'est à dire $h = 10^{-2}$.

7. Ecrire une fonction qui calcule $u^{(k+1)}$ en fonction de $u^{(k)}$ en utilisant les questions **1** à **3**.

8. Ecrire un programme qui calcule les termes $u^{(k)}$ pour $k = 0, 1, \dots, k_0$, jusqu'à ce qu'on ait soit $k_0 > 200$ (nombre d'itérations trop grand, signe de non-convergence), soit (tolérance d'erreur atteinte, signe de convergence) :

$$\|A u^{(k_0)} - G(u^{(k_0)})\|_\infty < \eta_1 \text{ et } \|u^{(k_0)} - u^{(k_0-1)}\|_\infty < \eta_2$$

avec $\eta_1 = 10^{-12}$, $\eta_2 = 10^{-9}$. Dans ce dernier cas, $u^{(k_0)}$ est considéré comme la solution numérique de (12)-(13)-(14). Calculer cette solution pour $\mu = 1$ et $\mu = 4$. On tracera dans chaque cas le graphe de u_i en fonction de x_i et on indiquera la valeur de k_0 . Sur les mêmes graphes, comparer la solution de (12)-(13)-(14) à celle du modèle linéaire (9)-(10)-(11). Conclusion ?

9. Etudier numériquement si la méthode itérative converge ou diverge lorsque μ varie dans l'intervalle $[0, 7]$.

2.4 Méthode de Newton pour l'équation PB

On considère le cas $f(u) = \text{sh}(u)$, $k = 1$ et $h = 10/n$ dans (7)-(8). Le système non linéaire s'écrit sous la forme :

$$F_0(u_0, u_1) = 0, \quad (18)$$

$$F_i(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}) = 0, \quad 1 \leq i \leq n - 2, \quad (19)$$

$$F_{n-1}(u_{n-2}, u_{n-1}) = 0, \quad (20)$$

où les fonctions F_i sont définies par :

$$F_0(u_0, u_1) = -2u_0 - h^2 \text{sh}(u_0) + 2u_1 + \mu h (2 - h), \quad (21)$$

$$F_i(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}) = (1 - \frac{h}{2x_i}) u_{i-1} - 2u_i - h^2 \text{sh}(u_i) + (1 + \frac{h}{2x_i}) u_{i+1}, \quad (22)$$

$$1 \leq i \leq n - 2,$$

$$F_{n-1}(u_{n-2}, u_{n-1}) = (1 - \frac{h}{2x_{n-1}}) u_{n-2} - 2u_{n-1} - h^2 \text{sh}(u_{n-1}). \quad (23)$$

Pour résoudre le système (18)-(19)-(20) par la méthode de Newton, on calcule une suite $u^{(k)} = (u_0^{(k)}, u_1^{(k)}, \dots, u_{n-1}^{(k)})^T$ ($(\cdot)^T$ désigne la transposition) définie

par récurrence de la manière suivante :

$$J_k(u^{(k+1)} - u^{(k)}) = -F(u^{(k)}), \quad (24)$$

avec $u^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ solution du système (9)-(10)-(11). La fonction $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ est définie par $F = (F_0, F_1, \dots, F_{n-1})^T$ et $J_k = DF(u^{(k)}) \in M_n(\mathbb{R})$ désigne la matrice jacobienne de F (dans le cas présent tridiagonale), dont le coefficient (i, j) est $\frac{\partial F_i}{\partial u_j}$ pour $0 \leq i, j \leq n-1$.

Pour les applications numériques, on fixera $n = 1000$, c'est à dire $h = 10^{-2}$.

10. Expliciter la matrice J_k en fonction de $u^{(k)}$ et montrer que cette matrice est inversible.

11. Ecrire un programme qui calcule les termes $u^{(k)}$ pour $k = 0, 1, \dots, k_0$, jusqu'à ce qu'on ait soit $k_0 > 50$ (nombre d'itérations trop grand, signe de non-convergence), soit (tolérance d'erreur atteinte, signe de convergence) :

$$\|F(u^{(k_0)})\|_\infty < \eta_1 \text{ et } \|u^{(k_0)} - u^{(k_0-1)}\|_\infty < \eta_2$$

avec $\eta_1 = 10^{-12}$, $\eta_2 = 10^{-9}$. Dans ce dernier cas, $u^{(k_0)}$ est considéré comme la solution numérique de (18)-(19)-(20). Calculer cette solution pour $\mu = 1$ et $\mu = 4$. On tracera dans chaque cas le graphe de u_i en fonction de x_i et on indiquera la valeur de k_0 . Comparer les solutions obtenues par la méthode de Newton à celles obtenues précédemment par la méthode des approximations successives (question 8). Conclusion ?

12. Etudier numériquement si la méthode de Newton converge ou diverge lorsque μ varie dans l'intervalle $[0, 7]$.