

Rapport de projet département

Audrey GOSSARD, Louise HUREL, Cyril NEDERVEEN et Dana ZILBERBERG

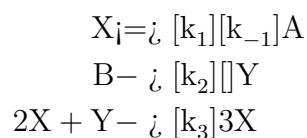
Problématique

1 Notion de stabilité et bifurcation

2 Modélisation de la morphogénèse par des équations de réactions-diffusion

On cherche à expliquer la morphogénèse, c'est-à-dire la formation de motifs sur les animaux ou les végétaux. Alan Turing fut un des premiers à apporter des explications de ce phénomène dans un article de 1952 METTRE LA REFERENCE ICI. Nous allons utiliser dans cette étude un modèle de réaction-diffusion : les composants chimiques réagissent entre eux et se diffusent en même temps. Plus précisément on va utiliser le modèle de Schnakenberg METTRE L'AUTRE REF ICI. Il s'agit d'un modèle chimique qui fait émerger des solutions d'équilibre non-homogènes en espace, ce qui permet d'observer des "patterns". Il se base sur la loi d'action de masse à laquelle on ajoute un phénomène de diffusion.

Dans ce modèle, on considère deux espèces X et Y (qui peuvent représenter des concentrations en pigment qui contrôlent la couleur d'une peau ou d'un pelage). Elles sont plongées dans un environnement en présence des espèces A et B en grande quantité, on considère donc que les concentrations de ces dernières ne varient pas au cours du temps. La réaction est la suivante :



On note χ la concentration de X, γ la concentration de Y, α la concentration de A, β la concentration de B. De plus on note d_X et d_Y les coefficients de diffusion de X et Y. En appliquant la loi d'action de masse et en rajoutant le terme de diffusion, on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \frac{d\chi}{dt} &= k_{-1}\alpha - k_1\chi + k_3\chi^2\gamma + d_X\Delta\chi \\ \frac{d\gamma}{dt} &= k_2\beta - k_3\chi^2\gamma + d_Y\Delta\gamma \end{aligned} \tag{1}$$

En effectuant des changements d'échelle dans le but de simplifier l'équation, on utilise les nouveaux paramètres a , b , d , δ et les nouvelles concentrations u et v qui vérifient alors l'équation suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c + \delta f(c) \tag{2}$$

avec $c = (u, v)^T$, D la matrice diagonale $D = \text{diag}(1, d)$ et $f(c) = (a - u + vu^2, b - vu^2)^T$.

Puisqu'on ne peut pas résoudre cette équation à la main, on va d'abord résoudre l'équation sans le terme de diffusion pour avoir une première condition sur la stabilité de la solution d'équilibre. On résout donc l'équation suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \delta f(c) \quad (3)$$

On trouve alors l'unique solution homogène en temps et en espace : $u_{eq} = a + b$ et $v_{eq} = \frac{b}{(a+b)^2}$ (en ayant $a + b \neq 0$). On a vu dans la partie précédente que la solution d'équilibre est stable si et seulement si $\text{tr}(J_f(c_{eq})) < 0$ et $\det(J_f(c_{eq})) > 0$. Ici, $\det(J_f(c_{eq})) = (a + b)^2 > 0$ et $\text{tr}(J_f(c_{eq})) = \frac{b - a - (a+b)^3}{a+b}$, d'où $\text{tr}(J_f(c_{eq})) < 0 \Leftrightarrow b - a < (a + b)^3$.

Donc la solution d'équilibre dans le cas non-diffusif est stable si et seulement si $b - a < (a + b)^3$.

3 Diagrammes de Turing

On a montré que la solution d'équilibre de l'équation qui découle du modèle de Schnakenberg est la suivante :

$$\begin{aligned} u_{eq} &= a + b \\ v_{eq} &= \frac{b}{(a + b)^2} \end{aligned} \quad (4)$$

On se place dans le cas $(a + b)^3 > b - a$, la solution en l'absence de diffusion est donc stable. On s'intéresse à la stabilité de (1). Afin de linéariser l'équation, on pose $z = c - c_{eq}$ avec $c = (u, v)$ et $c_{eq} = (u_{eq}, v_{eq})$. Pour z proche du vecteur nul, on fait l'approximation $f(z + c_{eq}) = f(c_{eq}) + J_f(c_{eq})z = J_f(c_{eq})z$, on obtient donc l'équation suivante :

$$\frac{dz}{dt} = D\Delta z + \delta J_f(c_{eq})z \quad (5)$$

On décompose alors z en mode de Fourier (à chaque instant t) :

$$\forall t \geq 0, x \in [0, 1], \quad z(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} s_n(t) e_n(x) \quad (6)$$

avec $e_n(x) = \cos(n\pi x)$, et $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$ formant une base hilbertienne de notre espace de fonction $C^0([0, 1])$. Les e_n sont les fonctions propres de Δ , de valeur propre $-(n\pi)^2$. D'où $\Delta s_n(t) e_n(x) = -(n\pi)^2 s_n(t) e_n(x)$. De plus, en utilisant l'unicité de la décomposition dans la base des $(e_n)_{n \in \mathbb{N}}$, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{N}, \quad \frac{ds_n}{dt} &= -(n\pi)^2 D s_n + \delta J_f(c_{eq}) s_n \\ &= B_n s_n \end{aligned} \quad (7)$$

On a vu dans la section 1 que la solution d'équilibre de cette équation est stable si et seulement si $\text{tr}(B_n) < 0$ et $\det(B_n) > 0$. Or ici, $\text{tr}(B_n) = -(n\pi)^2(1 + d) + \frac{\delta}{a+b}(b - a - (a + b)^3)$. Le premier terme de la somme est négatif, le deuxième l'est aussi car on a supposé $(a + b)^3 > b - a$. Donc la trace est toujours négative. Etant donné des valeurs de δ et de d , il suffit de calculer le déterminant de B_n pour savoir si un mode n est stable.

Pour toute la suite, on fixe $a = 0.2$ et $b = 1.3$. On code un programme qui effectue des boucles sur δ

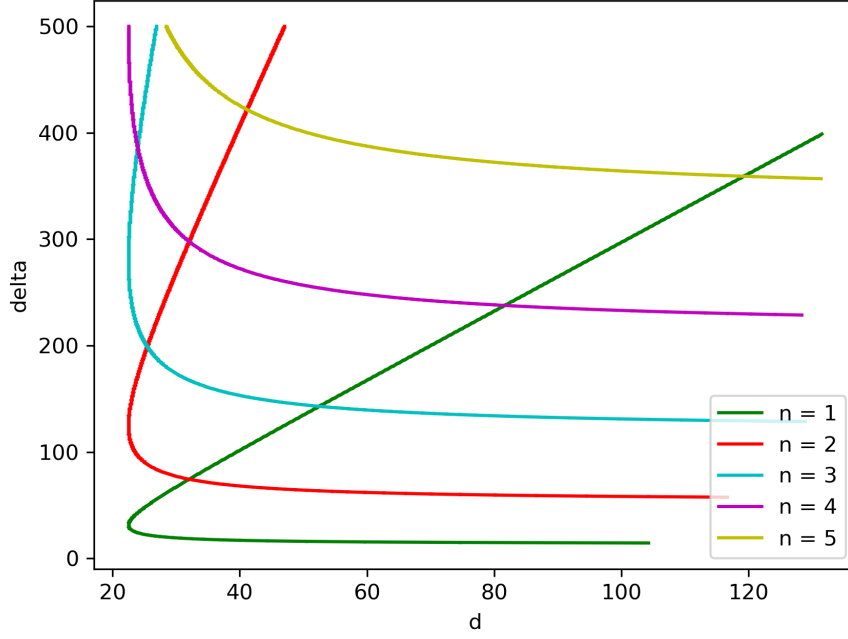


FIGURE 1 – Diagramme de Turing pour les modes 1 à 5

et d et teste la stabilité de la solution d'équilibre pour différents modes n . On obtient alors le diagramme suivant, dit "Diagramme de Turing" :

Lorsque les valeurs de δ et d se trouvent à gauche de la courbe, alors la solution pour le mode en question est stable. Sinon elle est instable. On n'a pas tracé le mode $n = 0$ car celui-ci est toujours stable (il correspond à la solution en l'absence de diffusion). Lorsque n est très grand, le terme de diffusion est prépondérant, et on a alors l'équation :

$$\frac{ds_n}{dt} = -D(n\pi)^2 s_n \quad (8)$$

La solution d'équilibre de cette équation est elle-aussi toujours stable, ce qui est cohérent avec le graphique puisque les courbes "montent" lorsque n augmente.

De plus, on observe que quelque soit le mode, les courbes atteignent toutes une valeur de d minimum que l'on va appeler $d_{critique}$.

Pour $d < d_{critique}$, alors tous les modes sont tous stables. La solution d'équilibre est donc totalement stable.

Grâce à ce diagramme, étant données des valeurs de δ et d , on va pouvoir prédire quel mode va diverger, et quel mode sera stable.

4 Résolution par la méthode d'Euler implicite

Définition des variables et des paramètres : On définit tout d'abord les différentes variables dont on a besoin pour décrire les équations du schéma d'Euler implicite :

- On fixe comme paramètres $a = 0.2$ et $b = 1.3$ pour satisfaire les conditions $(a + b)^3 > b - a$ et $b > a$.

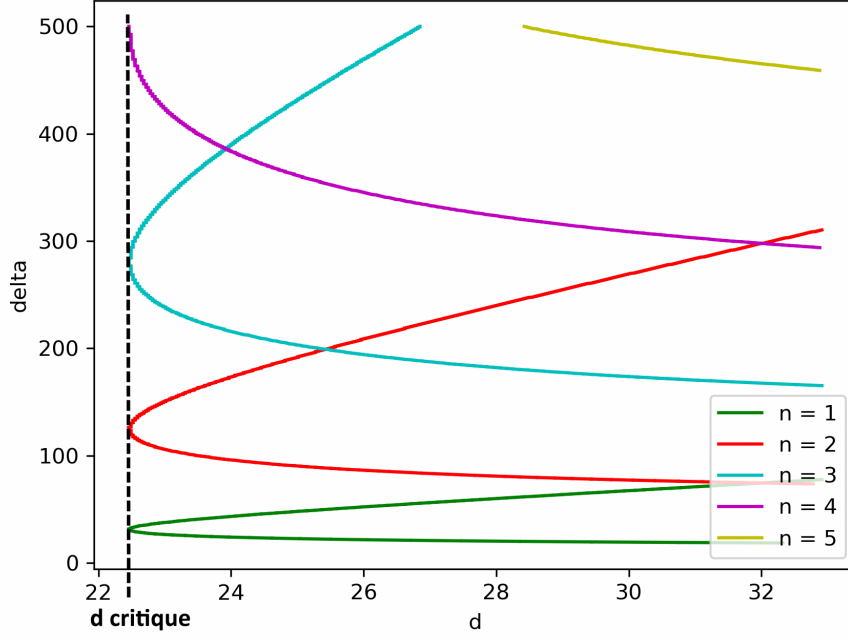


FIGURE 2 – Diagramme de Turing pour les modes 1 à 5

- On appelle N_x le nombre d'itérations sur la variable d'espace, avec x variant entre 0 et 1, on a donc $dx = \frac{1}{N_x}$. On a pris ici $N_x = 30$.
- On garde la notation $c = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$, qui sera de taille $2N_x$.
- Le pas de temps doit être assez petit, $dt = 10^{-3}$ suffit, en dessous, le schéma diverge. On prend de plus une plage de temps suffisamment grande pour que les modes puissent apparaître, par exemple $N_t = 50000$, voire plus si nécessaire.
- Dans une variable *stock* (tableau de taille $(2N_x, N_t)$) sont stockées toutes les valeurs de u et v .

Initialisation autour de la solution d'équilibre :

On se place autour de la solution d'équilibre, calculée comme étant $u_{eq} = a + b$ et $v_{eq} = \frac{b}{(a+b)^2}$, en ajoutant un nombre aléatoire compris entre -10^{-4} et 10^{-4} .

Matrices du Laplacien et de Diffusion :

Nous avons besoin de l'opérateur Laplacien discret dont la matrice, de taille (N_x, N_x) , s'écrit :

$$Lp = \frac{1}{dx^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

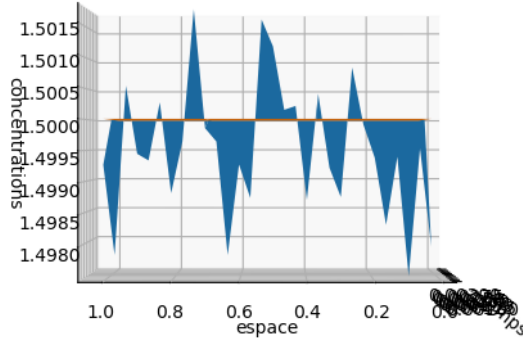


FIGURE 3 – Conditions initiales aléatoires autour de l'équilibre

Ce qui donne, écrite par blocs (1^{er} bloc appliqué à u , le 2nd à v) :

$$A = \begin{pmatrix} Lp & 0 \\ 0 & Lp \end{pmatrix}$$

Il nous faut également la matrice de diffusion, qui s'écrit simplement par blocs, pour un coefficient de diffusion d et en notant I la matrice identité de dimensions (N_x, N_x) :

$$D = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & dI \end{pmatrix}$$

Si on note $c^n = \begin{pmatrix} u^n \\ v^n \end{pmatrix}$ le vecteur c à l'instant $t_n = ndt$, le schéma d'Euler implicite s'écrit :

$$c^{n+1} = c^n + dt(DAc^{n+1} + \delta f(c^{n+1})) \quad (9)$$

On utilise ici un schéma d'Euler simplifié dans le sens où on remplace $f(c^{n+1})$ par simplement $f(c^n)$. On obtient ainsi :

$$c^{n+1} = c^n + dt(DAc^{n+1} + \delta f(c^n))$$

$$c^{n+1} = (I + dtDA)^{-1}(c^n + dt\delta f(c^n)) \quad (10)$$

On itère ainsi ce schéma N_t fois, et à chaque itération, on stock le résultat en remplissant la n^{ime} ligne de la matrice *stock* :

$$stock(n, 1 : 2N_x) = c^n \quad (11)$$

Résultats :

On se place à $d = 30$ et $\delta = 120$. Sur le diagramme de Turing, on anticipe la stabilité des deux premiers modes, et on s'attend à voir apparaitre le mode 2. C'est en effet ce que l'on observe :

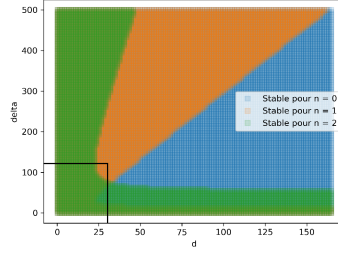


FIGURE 4 – Diagramme de Turing : instabilité du mode 2

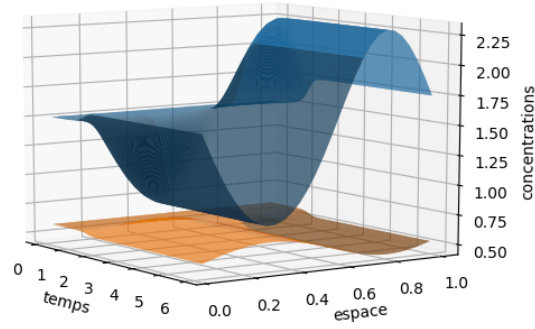


FIGURE 5 – Concentrations u et v pour $d = 30$ et $\delta = 120$

On peut examiner d'autres cas, où les modes instables se superposent :

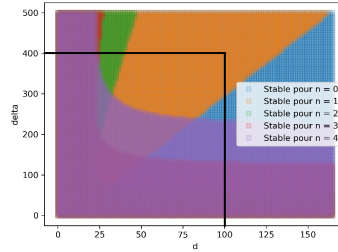


FIGURE 6 – Diagramme de Turing : superposition de modes instables

Remarque : plus on est proche du $d_{critique}$, environ 23, plus les concentrations mettent du temps à converger vers une solution indépendante du temps.

4.1 Comparaison avec le diagramme de Turing théorique

Maintenant que l'on a une méthode numérique pour résoudre l'équation, on va pouvoir comparer la stabilité de la solution d'équilibre pour des valeurs de δ et d avec les résultats prédits par le diagramme de Turing

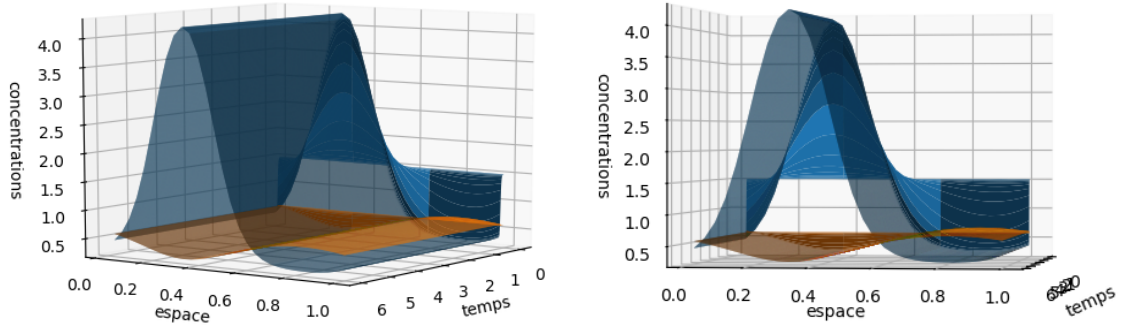


FIGURE 7 – Concentrations pour $d = 100$ et $\delta = 400$

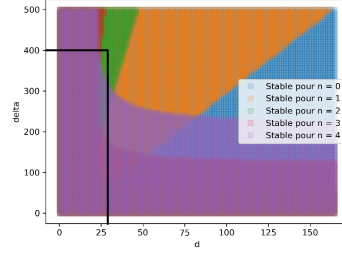


FIGURE 8 – Diagramme de Turing : superposition de modes instables 2

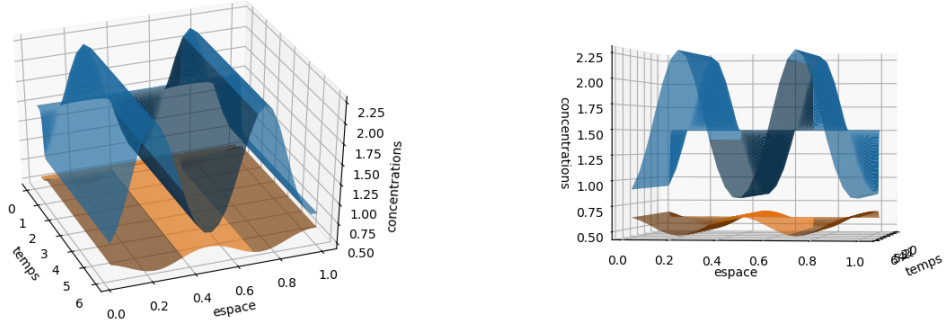


FIGURE 9 – Concentrations pour $d = 30$ et $\delta = 400$ (mode 3 instable)

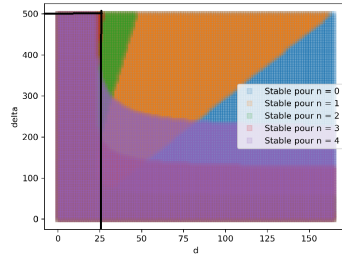


FIGURE 10 – Diagramme de Turing : instabilité du mode 4

théorique tracé à la section précédente. On sait que l'unique solution d'équilibre est $c_{eq} = (u_{eq}, v_{eq}) = (a + b, \frac{b}{(a+b)^2})$. Une fois les paramètres fixés, on résout l'équation avec la méthode d'Euler sur une plage de temps suffisante pour que la solution se stabilise, puis on compare la solution au temps final avec la

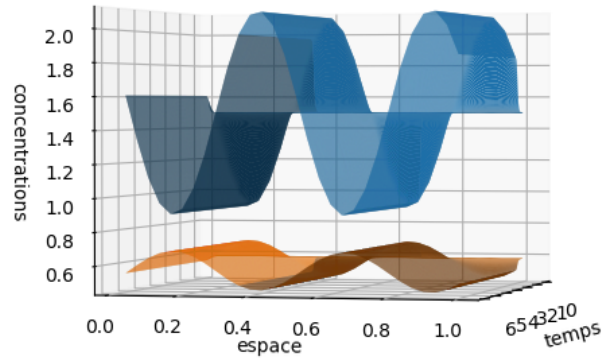


FIGURE 11 – Concentrations u et v pour $d = 26$ et $\delta = 500$ (mode 4 instable)

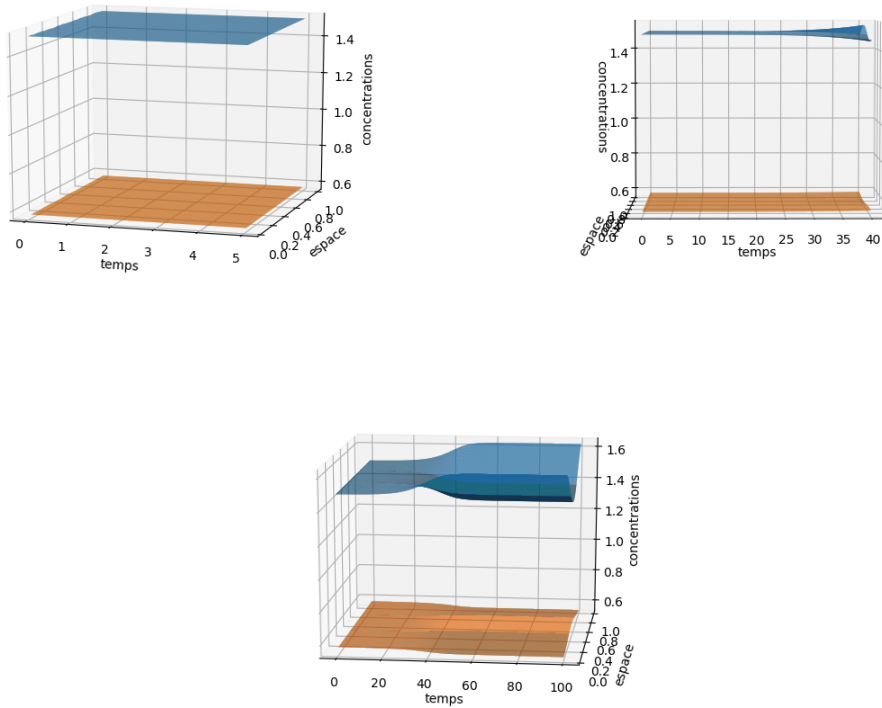


FIGURE 12 – Concentrations pour $d = 23.1$ et $\delta = 150$: convergence après 50 secondes de temps

solution homogène en espace c_{eq} . Comme précédemment, on fait des boucles sur δ et d et on trace un diagramme de stabilité. On trouve le résultat suivant (avec la zone stable en bleu), que l'on superpose avec le diagramme de Turing théorique :

On remarque que les deux diagrammes coïncident pour les modes 2 et 4, mais au niveau des modes 1 et

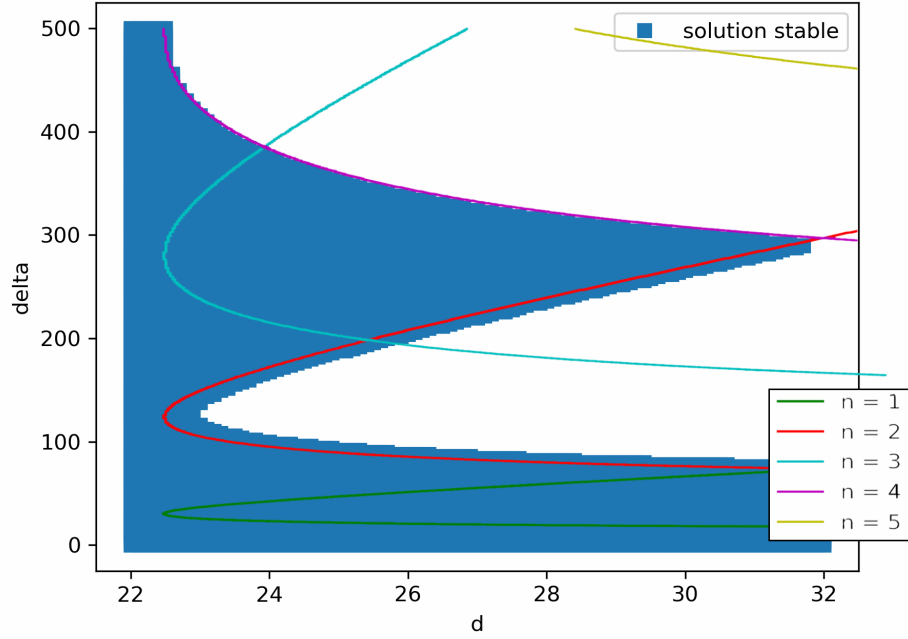


FIGURE 13 – Superposition des diagrammes de Turing théorique et expérimental

3, la résolution numérique donne une solution stable alors qu'elle ne devrait pas l'être. Cela peut être dû à des discrétisations trop grossières, ou un temps de résolution trop réduit, mais les temps de calcul déjà très importants ne permettent pas d'augmenter la précision du modèle.

5 Amplitude des modes

Dans cette partie nous nous intéressons à comment la forme de la solution évolue dans le temps lorsque nous plaçons le paramètre d légèrement au dessus de d_c . Nous avons en effet remarqué au cours de nos simulations que pour certaines valeurs de d , la solution en u s'apparentait à une sinusoïde de cette forme :

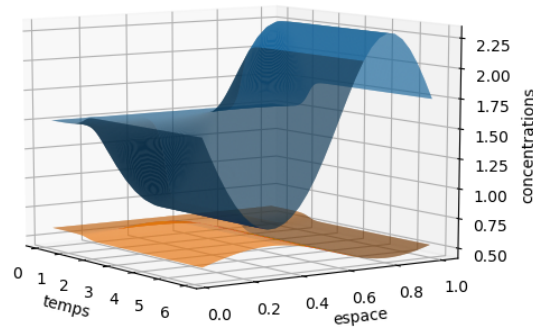


FIGURE 14 – Concentrations u et v pour $d = 30$ et $\delta = 120$

À ce stade de notre étude nous souhaiterions donc retrouver ce résultat par une approche théorique. Ainsi

nous considérons le paramètre d choisi tel que :

$$d = d_c + \epsilon \quad (12)$$

Pour $\epsilon \ll 1$, en pratique la perturbation ϵ sera de l'ordre de 0.05 au maximum. Le paramètre δ sera choisi plus arbitrairement car son influence sur la solution asymptotique est relativement limité, dans notre cas nous prendrons $\delta = 125$. Et de sorte que la solution asymptotique c sera contrôlé par ϵ selon la forme d'une série :

$$c(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^{\xi n} c_n(x) \quad (13)$$

Où ξ une constante réelle à caractériser dans la suite. Pour faire cela, utilisons l'équation :

$$Dc''(x) + f(c) = 0 \quad (14)$$

L'injection de la solution c dans cette équation donne la nullité d'une nouvelle série similaire à c . Il suffit alors de regrouper les termes portant le même monôme en ϵ , les deux premiers étant ceux d'ordre 0 et 1, immédiatement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d_c \end{pmatrix} c_0'' + f(c_0) = 0 \\ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d_c \end{pmatrix} c_1'' + df(c_0)c_1 = 0 \end{array} \right. \quad (15)$$

La première équation donne la solution d'équilibre, que l'on notera \bar{c} , pour c_0 comme on aurait pu s'y attendre d'après la simulation numérique. Pour la deuxième équation, il peut être intéressant d'écrire c_1 dans la base des fonctions cosinus. Une fois cela fait on tombe sur le même problème vu dans la section concernant les diagrammes de Turing, de plus pour la valeur choisi de d on peut simplifier en remarquant qu'il existe un unique entier j tel que le déterminant de la matrice B_j soit nul. En effet, cela signifie que c_1 est forcément de la forme :

$$c_1(x) = A \cos(jx) e_j \quad (16)$$

Où A est une constante réelle et e_j le vecteur générateur du noyau de B_j . En réalité on se doute que $j = 2$, cela pourrait vraisemblablement être vérifié par un calcul numérique. À ce stade de la résolution, on peut raisonnablement penser que la constante ξ est strictement positive, et que dans ce cas la solution c s'approximerait assez bien par $\bar{c} + A \epsilon^{\xi} \cos(jx) e_j$ ce qui confirmerait fortement nos résultats numérique. À présent un moyen de déterminer ξ est d'utiliser les ordres suivant sachant les conditions trouvées sur c_0 et c_1 .

À cause du terme $d_c + \epsilon$ dans la matrice de diffusion, un terme porté par $\epsilon^{\xi+1}$ apparaît :

$$\epsilon^{\xi+1} v_1'' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

À supposer que $\xi + 1$ ne s'écrit pas sous la forme $n\xi$, alors le terme ci-dessus est le seul d'ordre $\xi + 1$ et donc est nul. Or cela est contradictoire avec la forme trouvée de c_1 . Nécessairement, il existe n entier supérieur ou égal à 2 tel que $\xi + 1 = n\xi$. En ne rentrant pas plus dans le détail, il s'agit ici d'exploiter l'alternative de Fredholm pour montrer que la seule possibilité est que le terme d'ordre $\xi + 1$ doit se mêler à celui en 3ξ . Cela donne $\xi = \frac{1}{2}$ et donc :

$$c(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (\sqrt{\epsilon})^n c_n(x) \quad (18)$$

Par ailleurs, l'alternative de Fredholm montre que la constante A vaut soit 0, soit $\pm A_0$ où A_0 est une constante caractéristique de la fonction f . Enfin, nous avons :

$$c(x) \simeq \bar{c} \pm A_0 \sqrt{\epsilon} \cos(jx) e_j \quad (19)$$

5.1 Confirmation par simulation

On peut aller plus loin en tentant numériquement de retrouver cette dépendance en $\sqrt{\epsilon}$. Voici des résultats de plusieurs simulations : En théorie la deuxième ligne de graphiques est censée représenter des graphes de

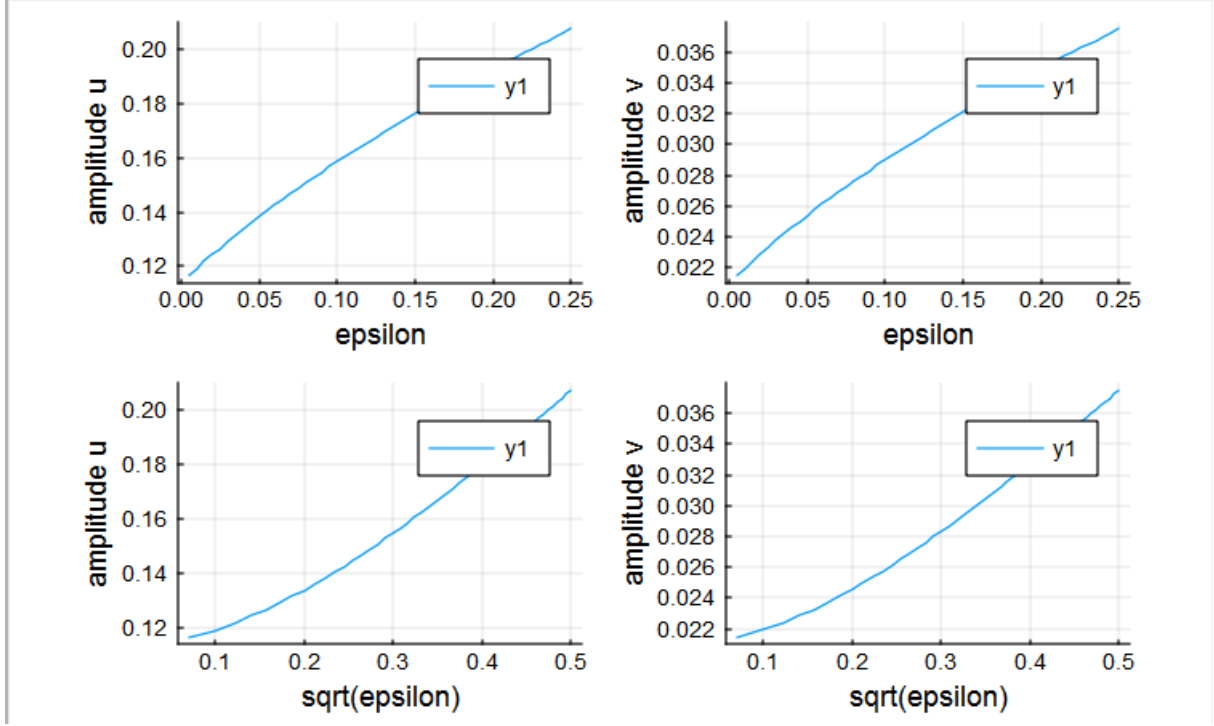


FIGURE 15 – Évolution de l'amplitude en fonction de ϵ et $\sqrt{\epsilon}$

fonctions linéaires or pour ϵ proche de 0 ce n'est pas ce qu'on observe. Les premiers graphes auraient du présenter une courbe plus redressée pour des valeurs proches de 0. Cependant la tendance asymptotique semble mieux correspondre les résultats théoriques, si on exploite cette partie de la courbe en $\sqrt{\epsilon}$, on trouve une pente d'environ 0,5.

6 Conclusion

Euuuh...