

ALLEGRI NI PAOLA
FROESSEL CLAIRE
KEHZRI NEJAD MAHSHID

Émergence de patterns en système de réaction-diffusion

Tutrice : Mme. NARDONI CHIARA



Introduction

Depuis toujours, l'environnement qui nous entoure comporte de nombreux mystères que nous résolvons progressivement. Un phénomène qui intrigue encore les chercheurs aujourd'hui est l'apparition de motifs dans la nature comme par exemple les tâches sur le pelage des animaux. Plusieurs travaux de recherche ont été consacrés à la compréhension de ce mécanisme. Une des idées avancées pour expliquer ce phénomène est l'action des morphogènes (substances à l'origine des changements chez l'embryon) durant le développement de l'animal qui déterminerait le futur motif de son pelage. Pour étudier leur comportement, Alan Turing proposa en 1952 dans son article historique "The Chemical Basis of Morphogenesis", d'utiliser les équations de réaction-diffusion. Selon son idée, les morphogènes se propageraient par diffusion dans l'organisme causant des réactions en chaîne qui induiraient des changements dans la structure de l'embryon. En effet, la diffusion des réactants, modifiant l'état initial stable, ne possède pas la propriété de stabilisation qu'on associe habituellement à ce processus.

Ces équations sont de la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \quad (1)$$

Où D_u est un coefficient associé aux propriétés diffusives de u (le réactant) et $f(u)$ une fonction qui décrit comment u croît ou se désintègre en fonction de son état actuel.

Les solutions des équations de réaction-diffusion présentent un large éventail de comportements, y compris la formation de phénomènes ondulatoires ainsi que d'autres patterns auto-organisés comme des rayures, des hexagones ou des structures plus complexes.

Nous considérerons dans un premier temps le système d'équation de réaction sans la diffusion, puis celui avec la diffusion. Pour représenter correctement le comportement des morphogènes, la solution stationnaire du système sans diffusion doit être asymptotiquement stable. Puis, lorsque la diffusion entre en jeu, les morphogènes réagissent et la solution stationnaire doit devenir instable pour former un motif. C'est par exemple le cas pour les motifs apparaissant sur le pelage de certains animaux. Ce phénomène se nomme l'instabilité de Turing.

Suivant l'idée de Turing nous essaierons d'obtenir des **solutions stationnaires hétérogènes**. Ces solutions hétérogènes apparaîtront suite à la perte de stabilité d'une solution stationnaire homogène, c'est-à-dire indépendante des variables temporelle et spatiales.

Table des matières

1	Stabilité et instabilité de l'équation de réaction-diffusion	3
1.1	Définition et Théorème : Notion de stabilité	3
1.2	Modèle de l'équation de réaction-diffusion	3
1.3	Linéarisation de l'équation de réaction-diffusion	4
1.4	Conditions de stabilité pour un système	5
1.4.1	Pour un système de la forme $Y'=AY$	5
1.4.2	Pour l'équation de réaction	8
1.4.3	Pour l'équation de réaction-diffusion	9
2	Mise en oeuvre numérique	11
2.1	Équation de diffusion	11
2.1.1	Énonciation du problème à résoudre	11
2.1.2	Approximation de l'opérateur Laplacien par des différences finies	11
2.1.3	Méthode explicite directe	12
2.1.4	Autre modèle implicite de Crank Nicholson	13
2.1.5	Comparaison avec la solution exacte de l'équation de la chaleur	13
2.2	Réaction-Diffusion	15

Chapitre 1

Stabilité et instabilité de l'équation de réaction-diffusion

1.1 Définition et Théorème : Notion de stabilité

On considère une équation différentielle $y' = f(t, y)$ où $f : \mathbb{R} \times U \rightarrow \mathbb{R}^n$ est une fonction continue, et U est un ouvert de \mathbb{R}^n . On fixe t_0 un élément de \mathbb{R} . Pour tout z élément de U , on note $t \rightarrow y(t, z)$ la solution maximale de l'équation différentielle répondant à la condition de Cauchy $y(t_0) = z$. On fixe enfin z_0 un élément de U .

Définition 1 On dit que la solution $y(t, z_0)$ est stable s'il existe une boule $B(z_0, r)$ et une constante $C > 0$ tels que

1. Pour tout z de $B(z_0, r)$, $t \rightarrow y(t, z)$ est définie sur $[t_0, +\infty[$;
2. Pour tout z de $B(z_0, r)$ et tout $t > t_0$, on a :

$$\|y(t, z) - y(t, z_0)\| \leq C \|z - z_0\|$$

Elle est dite asymptotiquement stable si elle est stable et si de plus il existe une boule $B(z_0, r)$ telle que, pour tout z de $B(z_0, r)$ on a :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|y(t, z) - y(t, z_0)\| = 0$$

Le cas le plus simple est celui d'un système autonome $y' = f(y)$, au voisinage d'un point critique que l'on peut toujours supposer être 0, c'est-à-dire que l'on suppose $f(0) = 0$. La fonction identiquement nulle est alors solution, et nous pouvons étudier sa stabilité. On a le résultat suivant :

Théorème 1 On considère l'équation différentielle autonome $y' = f(y)$ où f est de classe C^1 . Alors, si toutes les valeurs propres de la différentielle de f' en 0 sont de partie réelle strictement négative, la solution nulle est asymptotiquement stable.

1.2 Modèle de l'équation de réaction-diffusion

Nous nous intéressons en premier à la modélisation de la diffusion. L'équation classique de la diffusion s'écrit :

$$(1) \quad \frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c$$

où $c \in \mathbb{R}_+$ est la concentration de la substance qui dépend des variables spatiales et du temps, $D > 0$ le coefficient de diffusion et Δc le laplacien de c par rapport aux variables spatiales.

Ayant déterminé l'équation de la diffusion, nous pouvons alors définir l'équation de réaction-diffusion. Il faut considérer qu'il y a création de matière dans le domaine. On obtient l'équation :

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \Delta c - F = 0$$

avec F le terme de création.

Il ne nous reste plus qu'à bien définir le problème. Puisque nous voulons modéliser une réaction chimique, nous savons que le vecteur $c = (c_1, \dots, c_n)$ contient les concentrations des différentes substances impliquées dans la réaction. La réaction chimique entre les composantes est représentée par la fonction non linéaire $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. En considérant aucun apport extérieur de substances, nous utilisons une condition de Neumann nulle aux limites. Ainsi le problème de réaction-diffusion pour des réactions chimiques s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c + F(c) \\ \frac{\partial c}{\partial n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (1.1)$$

La dérivée partielle par rapport au vecteur normal \vec{n} nulle sur le bord signifie qu'en un point du bord on ne reçoit pas d'interaction avec le complémentaire de celui-ci. Cela implique que la concentration modélisée a tendance à devenir constante lorsque qu'on se rapproche du bord dans une direction orthogonale à celui-ci (en revanche elle est loin d'être constante lorsque on se déplace de manière tangente).

Dans ce rapport, on étudiera l'évolution d'un système constitué de deux réactants pour concentration respective u et v . Après avoir adimensionalisé le système, on obtient :

$$\begin{cases} u_t = \gamma f(u, v) + \Delta u \\ v_t = \gamma g(u, v) + d\Delta v \text{ sur } \Omega \\ (n \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \text{ sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (1.2)$$

avec $\gamma > 0$, proportionnel à l'aire du système et $u_t = \frac{\partial u}{\partial t}$, $v_t = \frac{\partial v}{\partial t}$ et $d = \frac{D_b}{D_a}$.
Si (u_0, v_0) est solution du système :

$$f(u, v) = 0, g(u, v) = 0 \text{ sur } \Omega \quad (1.3)$$

$$u_t = \gamma f(u, v), v_t = \gamma g(u, v) \text{ sur } \Omega \quad (1.4)$$

$$(n \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad (1.5)$$

Alors $u_t(u_0, v_0) = 0$ pour $\forall t$. La solution ne dépend donc pas du temps : c'est une solution stationnaire du système sans diffusion. De plus le terme de diffusion ne dépend pas non plus du temps, ainsi (u_0, v_0) est aussi une solution stationnaire homogène du système avec diffusion.

Puisque le système est non linéaire, pour déterminer les conditions nécessaires à la stabilité d'une solution nous devons travailler avec le système linéarisé.

1.3 Linéarisation de l'équation de réaction-diffusion

Par le théorème de Grobmann-Hartman [1] nous savons que les conditions de stabilité et d'instabilité au voisinage du point d'équilibre d'un système non-linéaire sont identiques à celles du système linéarisé correspondant (avec le développement de Taylor). Ainsi pour les systèmes non-linéaires nous pouvons étudier leurs conditions de stabilité et instabilité en utilisant le système linéarisé[6] :

Théorème 2 Stabilité en première approximation

Soit $x' = f(x)$ un système d'équations différentielles où $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$. Soit $x_0 \in \mathbb{R}^d$ un équilibre de f . Si $x_0 \in \mathbb{R}^d$ est un équilibre asymptotiquement stable du système linéarisé $x' = df(x_0)(x - x_0)$, alors c'est un équilibre asymptotiquement stable du système $x' = f(x)$.

Théorème 3 Non stabilité en première approximation

Soit $x' = f(x)$ un système d'équations différentielles, $f \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$. Soit $x_0 \in \mathbb{R}^d$ un équilibre de f . On suppose que $df(x_0)$ a une valeur propre de partie réelle strictement positive. Alors x_0 n'est pas un équilibre stable pour le système $x' = f(x)$.

On veut donc se ramener à un système de la forme :

$$u' = Au \quad (1.6)$$

avec $A \in M_{n,n}$,

pour définir les conditions de stabilité de notre système.

Définition 2 Soit $\bar{x} = 0$ une solution stationnaire de $x' = f(x)$ avec $f \in C^1$. 0 est asymptotiquement stable si :

$$\tilde{x} = v(t), \text{ avec } \tilde{x} \text{ petite perturbation autour de } 0 \quad (1.7)$$

avec :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{x} = 0 \quad (1.8)$$

En dérivant par rapport au temps : $\tilde{x}' = v'(t)$ on a également $\tilde{x}' = f(v(t))$

Ainsi $f(\bar{x} + v(t)) = v'(t)$.

Par développement limité en 0 :

$$v'(t) = f(v(t)) = f(0) + Df(0)v(t) + O(\|v(t)\|^2)$$

Or $f(0) = 0$ et en négligeant les termes d'ordre supérieur ou égal à 2 :

$$v'(t) = Df(0)v(t) \quad (1.9)$$

Ce cheminement peut s'appliquer à notre système d'équations de réaction-diffusion. Soit (u_0, v_0) une solution stationnaire homogène, i.e. u_0 et v_0 des constantes que nous supposons égales à 0 pour simplifier l'écriture. Pour déterminer la stabilité nous devons prendre une petite perturbation $(\tilde{u}_t(t), \tilde{v}_t(t)) = (u_0 + u(t), v_0 + v(t))$ que nous reportons dans le système (1.2) pour obtenir :

$$\begin{aligned} \tilde{u}_t &= 0 + u_t = \gamma f(\tilde{u}(t), \tilde{v}(t)) + \Delta \tilde{u} = \gamma f(u_0 + u(t), v_0 + v(t)) + 0 + \Delta u \\ \tilde{v}_t &= 0 + v_t = \gamma g(\tilde{u}(t), \tilde{v}(t)) + d\Delta \tilde{v} = \gamma g(u_0 + u(t), v_0 + v(t)) + 0 + d\Delta v. \end{aligned}$$

Si nous utilisons le développement de Taylor autour de (u_0, v_0) nous retrouvons :

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \gamma \left(\begin{pmatrix} f(u_0, v_0) \\ g(u_0, v_0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_u(u_0, v_0) & f_v(u_0, v_0) \\ g_u(u_0, v_0) & g_v(u_0, v_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right) + \begin{pmatrix} \Delta u \\ d\Delta v \end{pmatrix} + O(\|(u, v)\|^2) \quad (1.10)$$

Puisque (u_0, v_0) est un point d'équilibre du système sans diffusion, nous avons $f(u_0, v_0) = 0$ et $g(u_0, v_0) = 0$. De plus, si nous négligeons les termes d'ordre ≥ 2 , nous obtenons le système linéarisé :

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \gamma A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & d\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

qui devient :

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

$$\text{avec } M = \gamma A + \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & d\Delta \end{pmatrix}$$

Nous allons travailler par la suite avec cette équation, où A est la matrice jacobienne de f, g en (u_0, v_0) .

1.4 Conditions de stabilité pour un système

1.4.1 Pour un système de la forme $Y' = AY$

[2] On considère le système $Y' = AY$ où :

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_2 \end{pmatrix} \text{ et } A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdot & \cdot & a_{1,n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n,1} & \cdot & \cdot & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

avec $\det(A) \neq 0$

1. Si $n = 1$ alors $A = a$. Les solutions sont de la forme : $y(t) = z_0 \exp^{a(t-t_0)}$, elles sont :

- asymptotiquement stables si et seulement si $\Re a < 0$
- instables si $\Re a > 0$

2. Pour n quelconque

si A est diagonalisable, on se ramène par changement de base à :

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \ddots & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \lambda_n \end{pmatrix}$$

Comme il s'agit d'un système linéaire constitué de n équations, l'espace des solutions est un espace vectoriel de dimension n . Par conséquent, toute solution s'écrit comme combinaison linéaire des fonctions de base $y_i(t, z) = z_i \exp^{\lambda_i(t-t_0)}$ pour $1 \leq i \leq n$ et $z = (z_i)_{1 \leq i \leq n}$.

Théorème 4

Les solutions sont :

- asymptotiquement stables si et seulement si $\Re \lambda_i < 0$ pour tout $1 \leq i \leq n$
- instables si et seulement si $\exists i$ tel que $\Re \lambda_i > 0$

[4]

Quelques exemples

Considérons le système suivant :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

avec a, b, c et $d \in \mathbb{R}$ et $ad - bc \neq 0$.

Les points d'équilibre du système sont les solutions de l'équation :

$$\begin{pmatrix} x' = 0 \\ y' = 0 \end{pmatrix}$$

Comme A est inversible, les points d'équilibres sont donnés par :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi le seul point d'équilibre pour un système linéaire est 0.

Exemple 1 : équilibre stable :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 6 \\ -3 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Calcul des valeurs propres :

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 6 \\ -3 & -5 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 4\lambda + 13$$

On a : $\Delta < 0$ donc $\Re(\lambda_1) = \Re(\lambda_2) = \frac{-4}{2} = -2 < 0$ Ainsi la solution est stable. Représentons le champs vectoriel engendré par le système d'équations :

$$\begin{aligned} x' &= x + 6y \\ y' &= -3x - 5y \end{aligned}$$

Dans la figure 1.1, le vecteur de coordonnées (x', y') est associé au point (x, y) .

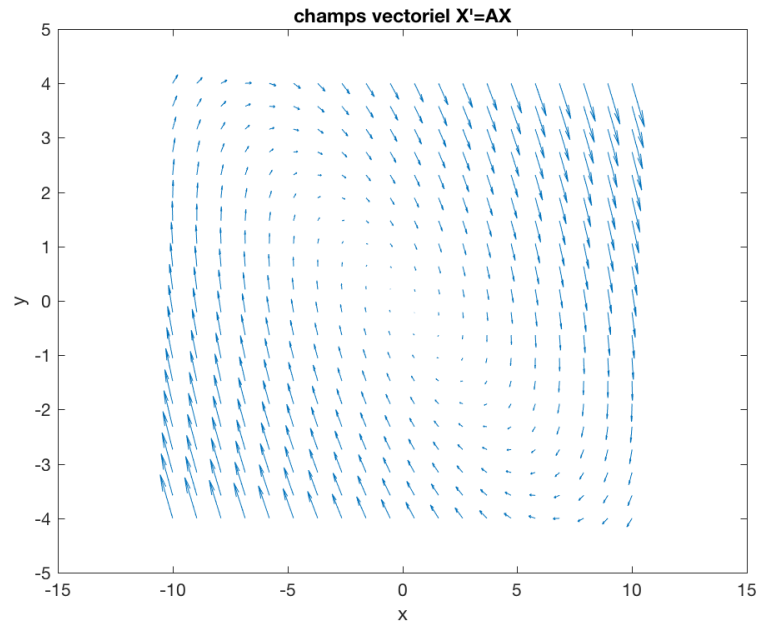


FIGURE 1.1 – Convergence vers le point d'équilibre stable

Exemple 2 : équilibre instable :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 & 6 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Calcul des valeurs propres :

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 8 - \lambda & 6 \\ 1 & 3 - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + 4\lambda + 13$$

On a : $\Delta = 49 = 7^2$ donc $Re(\lambda_1) = Re(\lambda_2) = \lambda_1 = \lambda_2 = \frac{11 \pm 7}{2} > 0$, donc la solution est instable. Représentons sur la figure 1.2 le champs vectoriel engendré par le système d'équations :

$$x' = 8x + 6y$$

$$y' = x + 3y$$

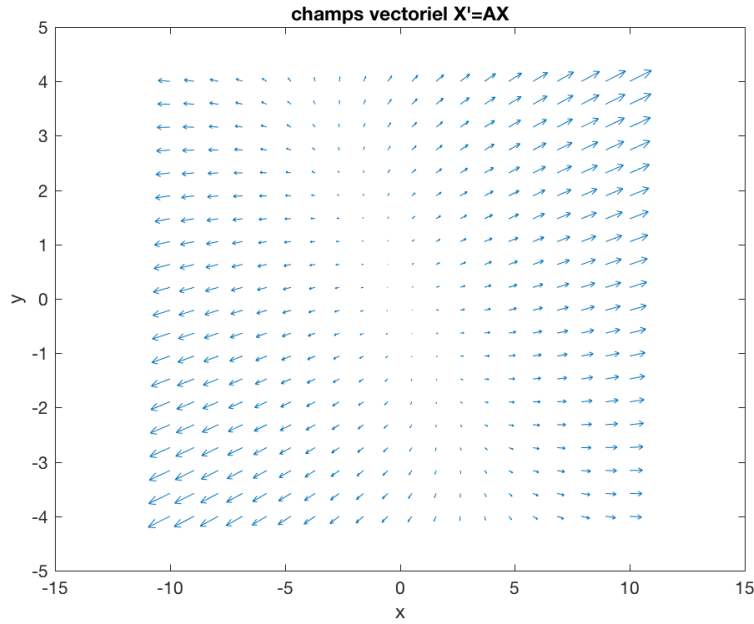


FIGURE 1.2 – Divergence autour du point d'équilibre instable

Dans notre cas

La solution homogène (u_0, v_0) est stable si $Re(\lambda) < 0$ pour toutes les valeurs propres de

$$M = \gamma A + \begin{pmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & d\Delta \end{pmatrix}$$

Il faut donc vérifier le signe des valeurs propres de la matrice γA pour le système sans diffusion et de l'opérateur M pour le système avec diffusion.

1.4.2 Pour l'équation de réaction

Nous pouvons à présent définir les conditions pour que la solution stationnaire soit asymptotiquement stable en l'absence de diffusion. Il est important de rappeler que si $Re(\lambda) < 0$, alors le point d'équilibre stable du système linéarisé est aussi un équilibre stable pour le non-linéarisé.

D'après ce qui a été énoncé précédemment, les valeurs propres de la matrice jacobienne γA doivent toutes avoir leur partie réelle négative d'après le théorème 4.

Calculons le polynôme caractéristique de γA :

$$|\gamma A - \lambda I| = \begin{vmatrix} \gamma f_u - \lambda & \gamma f_v \\ \gamma g_u & \gamma g_v - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

On aboutit au polynôme de degré 2 suivant :

$$\lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) = 0$$

Les solutions du polynôme sont :

$$\lambda_1, \lambda_2 = \frac{1}{2}\gamma((f_u + g_v) \pm ((f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u))^{\frac{1}{2}})$$

Les valeurs propres de γA sont en fait les valeurs propres de A multipliées par $\gamma > 0$. On cherche donc directement les valeurs propres de A . De plus la trace de A est la somme des coefficients diagonaux de A mais aussi la somme de ses valeurs propres. Le déterminant de A correspond au produit des valeurs propres. Comme A est une matrice 2×2 , on veut :

$$tr(A) < 0 \text{ et } det(A) > 0$$

Démonstration :

1. Soit λ_1 et λ_2 , les valeurs propres de la matrice A :

$$tr(A) = \lambda_1 + \lambda_2$$

$$det(A) = \lambda_1 \lambda_2$$

Ainsi on a $tr(A) < 0$ et $det(A) > 0 \Rightarrow Re(\lambda) < 0$

2. Si λ_1 et λ_2 , les valeurs propres de la matrice A alors :

$$\lambda_1 = \overline{\lambda_2}$$

On a ainsi :

$$tr(A) = 2Re(\lambda) < 0 \Rightarrow Re(\lambda) < 0$$

et $det(A) > 0$ quelques soit λ_1 et λ_2 , des complexes.

On peut donc mettre en place les conditions suivantes sur A :

$$\text{en } (u_0, v_0), tr A = f_u + g_v < 0 \text{ et } |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0 \iff Re(\lambda) < 0 \quad (1.16)$$

Ainsi (1.16) nous donne les conditions pour que la solution soit stable en l'absence de diffusion.

1.4.3 Pour l'équation de réaction-diffusion

Maintenant que nous disposons des conditions à respecter pour avoir la solution stationnaire homogène stable dans le système sans diffusion, nous devons trouver celles nécessaires pour l'instabilité en présence de diffusion. Mais le calcul des valeurs propres de l'opérateur M est plus complexe dû à la présence du laplacien. Nous nous intéressons premièrement aux valeurs propres de celui-ci. On cherche donc : $\Delta w = -k^2 w$. Il existe une infinité de valeurs propres associées et par conséquent une infinité de solutions que nous noterons w_k et ne dépendant pas du temps. Ainsi, nous cherchons des solutions de la forme :

$$w(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \exp(\lambda t) w_k(x) \quad (1.17)$$

En remplaçant Δw dans M, on obtient :

$$\lambda w_k = \gamma A w_k - D k^2 w_k \text{ avec } \lambda \text{ les valeurs propres de M.} \quad (1.18)$$

Le polynôme caractéristique correspondant est alors :

$$|\lambda I - \gamma A - D k^2| = 0 \quad (1.19)$$

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] + h(k^2) = 0 \quad (1.20)$$

$$\text{avec } h(k^2) = d k^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2|A| \quad (1.21)$$

En posant $c = k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)$, on reconnaît un polynôme du 2nd degrés, avec $\Delta = c^2 - 4h(k^2)$.

Comme nous souhaitons avoir les conditions minimales pour que le système devienne instable, il nous faut au minimum une valeur propre tel que $Re(\lambda(k)) > 0$ pour un $k \neq 0$

Or puisque $f_u + g_v < 0$ et $k^2(1+d) > 0$, $c > 0$ donc il faut que $h(k^2) < 0$.

De plus, puisque $|A| > 0$, pour que la condition soit vérifiée, on cherche $df_u + g_v > 0$. Cependant, ce n'est pas une condition suffisante pour que $h(k^2)$ soit négatif. On cherche maintenant les conditions pour que le minimum de h soit aussi négatif.

En dérivant h par rapport à k^2 on obtient $h'(k) = 0$ pour $k_m^2 = \gamma \frac{(df_u + g_v)}{2d}$ et $h_{min} = \gamma^2 [|A| - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}]$.

Pour avoir $h_{min} < 0$, il nous faut donc $|A| < \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}$.

Lors d'un changement de signe, $h_{min} = 0$ donc $|A| = \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}$.

Or $|A| = f_u g_v - f_v g_u$, nous devons alors trouver une valeur seuil d_c de d pour que les deux égalités soient vérifiées.

Ainsi d_c vérifie :

$$(d_c f_u + g_v)^2 - 4d_c(f_u g_v - f_v g_u) = 0 \text{ et } h_{min} \text{ est alors négatif } \forall d > d_c.$$

Nous pouvons maintenant rassembler les conditions d'instabilité en présence de diffusion :

$$df_u + g_v > 0, \quad (1.22)$$

$$\text{et } (df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0. \quad (1.23)$$

$$(1.24)$$

Les conditions de stabilité sans diffusion restent : $f_u + g_v < 0$ et $f_u g_v - f_v g_u > 0$.

Notez que : $h(k^2) < 0$ pour certaines valeurs de k^2 soit $\forall k^2 \in [k_1^2, k_2^2]$ avec $k_{1,2}$ solutions de $h(k^2) = 0$.

Chapitre 2

Mise en oeuvre numérique

2.1 Équation de diffusion

2.1.1 Énonciation du problème à résoudre

Nous cherchons à étudier le système suivant en dimension 1 :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad 0 < x < L, D > 0 \quad (2.1)$$

avec D le coefficient de diffusion et L la longueur totale de la tige.

Le terme $\frac{\partial u}{\partial t}$ permet de décrire l'évolution de la chaleur au cours du temps. Le but est de définir la température à chaque instant à partir de $t=0$. Le terme $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ correspond à une variation de u par rapport à sa moyenne locale ; par exemple, un point x_f tel que $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_f) > 0$ est un point plus froid que son entourage direct et dont la température va augmenter.

L'équation respecte certaines conditions :

- Les conditions aux limites de Dirichlet : $u(t, 0) = \alpha(t), u(t, l) = \beta(t), t \geq 0$ sélectionnées dans le but de modéliser l'absence d'interactions avec l'environnement extérieur.
- Les conditions initiales : $u(0, x) = f(x), 0 \leq x \leq L$ avec f une fonction définissant la température initiale selon la position.

2.1.2 Approximation de l'opérateur Laplacien par des différences finies

Afin d'approximer la solution en appliquant des méthodes numériques, nous cherchons à approcher le terme $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ à l'aide de différences finies afin de l'exprimer en fonction de u et h le pas. En supposant que $u \in C^2$, nous pouvons utiliser la formule de Taylor telle que :

$$u(x + h) = u(x) + u'(x)h + u''(x)\frac{h^2}{2} + u'''(x)\frac{h^3}{6} + O(h^4)$$

$$u(x - h) = u(x) - u'(x)h + u''(x)\frac{h^2}{2} + u'''(x)\frac{h^3}{6} + O(h^4)$$

Ainsi en sommant ces deux expressions, on obtient :

$$U''(x) = \frac{[u(x + h) - 2u(x) + u(x - h)]}{h^2} + O(h^2) \quad (2.2)$$

Par conséquent :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u[(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)]}{\Delta x^2} \quad (2.3)$$

De plus en remplaçant $\frac{\partial u}{\partial t}$ par son taux d'accroissement, on obtient :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{[u(x, t + \Delta t) - u(x, t)]}{\Delta t} \quad (2.4)$$

En utilisant les différences finies l'erreur sur $\frac{\partial u}{\partial t}$ est de l'ordre de Δt (1er ordre) et sur $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, elle est de l'ordre de Δx^2 (ordre 2). Pour être cohérent dans nos calculs, il faudra donc choisir par la suite Δt et Δx^2 du même ordre de grandeur.

2.1.3 Méthode explicite directe

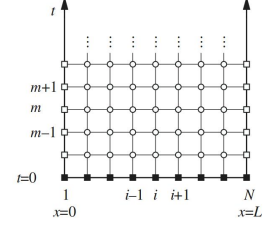
[5] Afin d'approcher numériquement la solution, il nous faut discrétiser le temps et l'espace en une grille de pas k de temps et h en espace tel que :

$t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_k$ pour tout $i \in N : t_{i+1} - t_i = \Delta t$

$x_0 = 0 < x_1 < \dots < x_n = L$ pour $j \in N : x_{j+1} - x_j = h$.

La solution de l'équation de réaction $u(x_j, t_{i+1})$ est alors calculée à partir des informations au temps t_i , en particulier en utilisant les données proches de x_j soit $u(x_j, t_i)$, $u(x_{j-1}, t_i)$ et $u(x_{j+1}, t_i)$.

Pour simplifier les notations on prendra n , l'indice du temps et m l'indice de x tel que $u(x_j, t_i) = u_m^n$. L'équation précédente correspond donc à :



$$\frac{u_n^{m+1} - u_n^m}{\Delta t} = D \frac{u_{n+1}^m - 2u_n^m + u_{n-1}^m}{\Delta x^2} \quad (2.5)$$

$$u_n^{m+1} = u_n^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{n+1}^m - 2u_n^m + u_{n-1}^m) \quad (2.6)$$

en posant $\mu = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$ on a :

$$u_n^{m+1} = \mu u_{n+1}^m + (1 - 2\mu)u_n^m + \mu u_{n-1}^m \quad (2.7)$$

Convergence de la méthode

En appliquant la méthode avec différents paramètres, on remarque que l'approximation peut être assez éloignée de la solution exacte. Il nous faut alors déterminer les conditions pour trouver une solution numérique correcte à notre équation.

Nous savons que la solution générale de l'équation de la chaleur peut être décomposée en une somme de Fourier (démonstration dans la suite du rapport). A partir de là, nous pouvons comprendre comment la méthode se comporte avec une fonction exponentielle.

Considérons simplement que $u(t_i, x) = \exp(ikx)$ soit $u(t_i, x_j) = \exp(ikx_j)$ En substituant les $u(t_i, x_j)$ par leurs valeurs on obtient :

$$u(t_{i+1}, x_j) = \mu e^{ik(x_j + \delta x)} + (1 - 2\mu)e^{ikx_j} + \mu e^{ik(x_j - \delta x)} \quad (2.8)$$

$$= (\mu e^{ik\delta x} + 1 - 2\mu + \mu e^{-ik\delta x})e^{ikx_j} \quad (2.9)$$

$$= \lambda e^{ikx_j} \quad (2.10)$$

$$(2.11)$$

où $\lambda = \mu e^{ik\delta x} + 1 - 2\mu + \mu e^{-ik\delta x}$

Ainsi à chaque pas de temps, l'exponentielle est multipliée par λ . Et quand $t \rightarrow \infty$ u aussi. Le résultat n'est donc pas cohérent avec les conditions en $x = 0$ et $x = L$ et l'hypothèse de continuité de la fonction n'est pas vérifiée. Pour éviter que le modèle explose, il faut absolument $|\lambda| \leq 1$. Pour que cette condition soit respectée et que l'algorithme soit stable, on utilise le critère de stabilité de Von Neumann soit :

$$\mu = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \iff \Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D} \quad (2.12)$$

Cette méthode n'est donc pas stable pour tout pas de temps choisi, on parle de méthode conditionnellement stable.

2.1.4 Autre modèle implicite de Crank Nicholson

Etant donné que la méthode explicite directe n'est pas inconditionnellement stable, nous avons étudié un autre modèle numérique appelé Crank Nicholson. Il s'agit d'une méthode implicite : les dérivées spatiales sont à moitié évaluées au temps m et à moitié en $m+1$ ce qui diminue la marge d'erreurs. Le principe est le même que pour la méthode explicite sauf que l'on effectue un développement de Taylor autour du point u_n^m et u_n^{m+1} .

On obtient la formule :

$$\frac{u_n^{m+1} - u_n^m}{\Delta t} = \frac{D}{2\Delta x^2} [(u_{n+1}^m - 2u_n^m + u_{n-1}^m) + (u_{n+1}^{m+1} - 2u_n^{m+1} + u_{n-1}^{m+1})] \quad (2.13)$$

en posant $\mu = \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2}$ et en déplaçant les termes en $m+1$ à gauche de l'égalité et ceux en m à droite on a :

$$-\mu u_{n+1}^{m+1} + (1 + 2\mu)u_n^{m+1} - \mu u_{n-1}^{m+1} = \mu u_{n+1}^m + (1 - 2\mu)u_n^m + \mu u_{n-1}^m \quad (2.14)$$

Pour implémenter cette méthode de manière efficace sous Matlab, nous cherchons à l'exprimer sous forme matricielle soit de la forme :

$$Bu^{m+1} = Cu^m \quad (2.15)$$

$$(2.16)$$

Avec B et C deux matrices carrées de taille $N \times N$ (nb de pas dans L) telles que :

$$B = \begin{pmatrix} 1+2\mu & -\mu & 0 & \dots & 0 \\ -\mu & 1+2\mu & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & -\mu \\ 0 & \dots & 0 & -\mu & 1+2\mu \end{pmatrix}$$

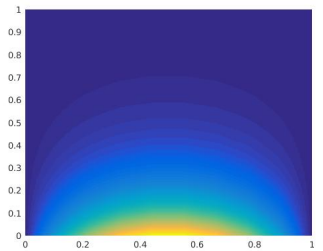
et

$$C = \begin{pmatrix} 1-2\mu & \mu & 0 & \dots & 0 \\ \mu & 1-2\mu & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \mu \\ 0 & \dots & 0 & \mu & 1-2\mu \end{pmatrix}$$

L'intérêt de cette méthode est quelle est inconditionnellement stable, simple et efficace. Cependant elle nécessite certaines conditions de régularité sur les équations pour que le résultat ait une précision satisfaisante.

Voici un exemple de simulation de diffusion de la chaleur avec cette méthode :

On trouvera la position en abscisses et le temps en ordonnées. On observe que la température est initialement plus chaude au centre de la tige puis se diffuse progressivement vers les bords jusqu'à obtenir une température homogène sur l'ensemble de celle-ci (égale à la température constante des bords).



2.1.5 Comparaison avec la solution exacte de l'équation de la chaleur

Afin de connaître l'efficacité de ces deux modèles numériques, il nous faut les comparer avec la solution exacte de l'équation de la chaleur $T(x, t)$ que nous étudions en une dimension. On utilisera la méthode de résolution de l'équation de la chaleur par les séries de Fourier.

Le système est le suivant :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.17)$$

en considérant les conditions aux limites :

$$\begin{cases} T(x, 0) = f(x) & \forall x \in [0, L] \\ T(0, t) = T(L, t) = 0 \end{cases}$$

En supposant que la solution s'écrit comme le produit de deux fonctions indépendantes, nous utilisons la méthode de séparation des variables pour t et x afin d'exprimer $T(x, t)$ en fonction de $X(x)Y(t)$.

Ainsi on a :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} = Y'(t)X(x) \\ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = DY(t)X''(x) \end{cases}$$

Et donc : $\frac{Y'(t)}{DY(t)} = X''(x)X(x)$

Or les deux quotients de fonction sont égaux mais pourtant indépendants ; de ce fait, ils sont forcément égaux à une constante que l'on notera λ .

Ainsi : $Y'(t) = -\lambda Y(t)$ et $X''(x) = -\lambda X(x)$

Réolvons $X(x)$ selon le signe de λ :

– Si $\lambda < 0$:

$$X(x) = B \exp(\sqrt{-\lambda}x) + C \exp(-\sqrt{-\lambda}x) \quad B, C \in R$$

Or les conditions de Dirichlet impliquent $B=C=0$ donc $T(x,t)=0$

– De même, si $\lambda = 0$:

$$X(x) = Bx + C = 0$$

– Il nous reste plus que $\lambda > 0$:

$$Y(t) = A \exp(-\lambda Dt) \quad A \in R$$

$$X(x) = B \sin(\sqrt{\lambda}x) + C \cos(-\sqrt{\lambda}x)$$

De plus on a :

$$X(0) = C \cos(-\sqrt{\lambda}0) = 0 \Rightarrow C = 0$$

$$X(L) = B \sin(\sqrt{\lambda}L) = 0 \Rightarrow \sqrt{\lambda} = \frac{n\pi}{L} \quad n \in N$$

On obtient alors :

$$T(x, t) = B_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right) \exp\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt\right) \quad (2.18)$$

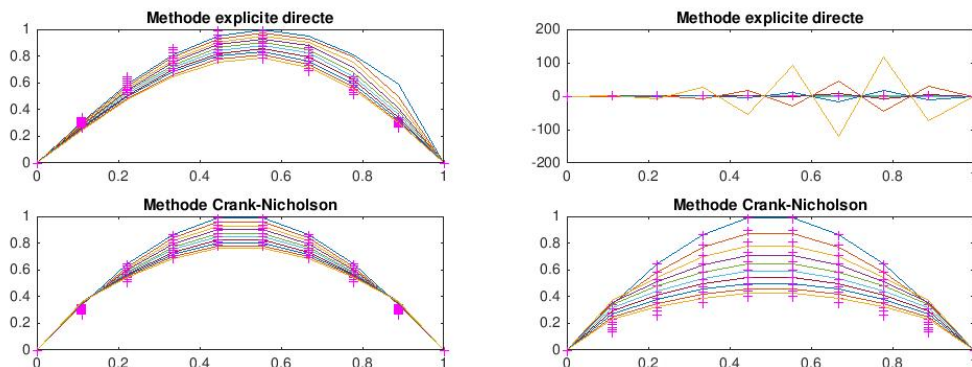
Comme l'équation étudiée est linéaire, toute combinaison linéaire de solution est aussi solution, la forme générale de la solution est alors donnée par :

$$T(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} D_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right) \exp\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}Dt\right) \quad (2.19)$$

On reconnaît alors un développement en série de Fourier ce qui nous permet de définir le terme D_n par :

$$D_n = \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad (2.20)$$

Maintenant que nous connaissons la solution générale de l'équation, nous pouvons comparer l'efficacité des deux modèles. Pour illustrer nos propos, nous avons choisi de représenter la chaleur en fonction de la position sur la tige au cours du temps. Nous avons considéré deux cas : $\gamma = 0.25$ (où $\mu \leq \frac{1}{2}$) et $\gamma = 1$ (où $\mu \geq \frac{1}{2}$) :



Pour chaque graphe, on représente la solution approchée par le modèle et la solution exacte[7] (courbe en rose) pour plusieurs pas de temps. On observe bien sur la deuxième figure que avec $\gamma = 1$ la méthode explicite directe ne converge plus vers la solution.

2.2 Réaction-Diffusion

Pour résoudre l'équation de réaction nous avons utilisé la méthode d'Euler explicite avec :

$$U_{n+1} = U_n + dt f(U_n)$$

Pour résoudre l'équation uniquement avec le terme de diffusion, il a fallu linéariser le Laplacien à partir d'une étude probabiliste puis nous avons utilisé une méthode explicite et ensuite implicite (pour avoir une méthode inconditionnellement stable) pour approcher la solution. Maintenant, pour approximer la solution de l'équation de réaction-diffusion selon la méthode explicite, il suffit d'ajouter les deux termes.

Sous forme matricielle on obtient alors :

$$u_{n+1} = BU_n + dt f(U_n)$$

Le modèle de Gierer-Meinhardt

[3] Dans notre cas, nous prendrons une version simplifiée du modèle de Gierer-Meinhardt :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^2}{v} - bu + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = u^2 - v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}$$

avec u notre "activateur" et v notre inhibiteur, D_u et D_v les coefficients de diffusion, et b une constante correspondant à la dégradation de u . Considérons le système sans diffusion :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{u^2}{v} - bu \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= u^2 - v \end{aligned} \quad (2.22)$$

$u_0 = \frac{1}{b}$ et $v_0 = u_0^2 = \frac{1}{b^2}$ nous donnent l'état d'équilibre stable. En linéarisant avec un développement de Taylor autour du point $[u_0, v_0] = [\frac{1}{b}, \frac{1}{b^2}]$ on obtient la Jacobienne :

$$J(1/b, 1/b^2) = \begin{pmatrix} -b + \frac{2u}{v} & -\frac{u^2}{v^2} \\ 2u & -1 \end{pmatrix}_{(1/b, 1/b^2)} = \begin{pmatrix} b & -b^2 \\ \frac{2}{b} & -1 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

Pour que le point d'équilibre soit stable il faut :

$$Tr(J) = b - 1 < 0 \text{ donc } b < 1$$

$$\text{et } Det(J) = b > 0 \text{ donc } b > 0$$

Alors il faut que : $0 < b < 1$

ajout du term de diffusion :

En ajoutant une petite perturbation à l'état d'équilibre stable nous souhaitons que le système soit instable et donc que cette perturbation augmente avec le temps. Cette perturbation est liée à la diffusion.

Soient $u(x, t) = u_0 + \tilde{u}$ et $v(x, t) = v_0 + \tilde{v}$, avec \tilde{u} et \tilde{v} très petits, le système linearisé est :

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = b \tilde{u} - b^2 \tilde{v} + D_u \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = \frac{2}{b} \tilde{u} - \tilde{v} + D_v \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial x^2} \quad (2.25)$$

Le système peut être résolu par la séparation des variables, donc on cherche les solution de la forme :

$$\begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(t)e^{iqx} \\ B(t)e^{iqx} \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

où q est le mode de Fourier. Le système devient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta \tilde{u} \\ \delta \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - q^2 D_u & -b^2 \\ \frac{2}{b} & -1 - q^2 D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \tilde{u} \\ \delta \tilde{v} \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

On veut trouver les valeurs propres d'une matrice 2x2, il faut qu'elles soient distinctes et que au moins une des deux vérifie : $Re(\lambda_i) > 0, i \in \{1, 2\}$. Puisque $Tr(J) = b - 1 - q^2(D_u + D_v)$ est toujours négative et $b < 1$ et que D_u et D_v sont positives par définition, cette condition est toujours vraie. Pour que le système soit instable, il faut :

$$\det(J) = H(q^2) = (b - D_u q^2)(-1 - D_v q^2) + 2b < 0 \quad (2.28)$$

Notez que le déterminant est une fonction quadratique par rapport à q^2 . Nous n'obtiendrons pas de patterns pour b très petit mais on obtiendra des motifs une fois que le quadratique traversera l'axe des x. On obtiendra 2 racines réels quand :

$$-bD_v + D_u > 2\sqrt{(D_v D_v)b} \quad (2.29)$$

Domaine Spatiale : En appliquant des conditions périodiques aux limites¹ sur un domaine $x \in [0, L]$, la solution sera alors sous la forme :

$$\sum_k A_k e^{\lambda_k t} \cos(qx) \quad (2.30)$$

Et sur les valeurs autorisées de k :

$$q = \frac{n\pi}{L}, n \in \{1, 2, \dots\} \quad (2.31)$$

Puisque nous souhaitons l'émergence de patterns, alors le plus petit L valable pour qu'ils apparaissent doit être tel que :

$$q^2 = \frac{\pi^2}{L^2} > \frac{A + \sqrt{A^2 - B}}{2D_u D_v} = q_+^2 \quad (2.32)$$

où $A = bD_v - D_u, B = 4bD_u D_v$ et q_+^2 le maximum des deux solutions de $H(q^2)$. Donc la longueur critique sera : $L_c = \frac{\pi}{q_+}$.

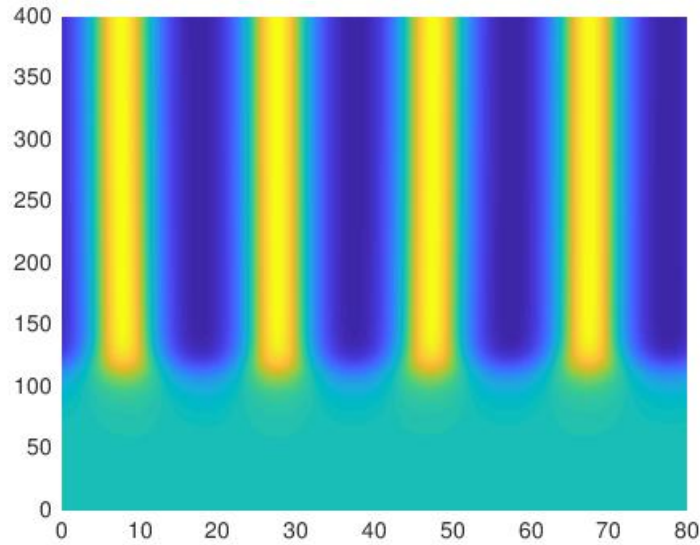


FIGURE 2.1 – Changement de densité de u en fonction du temps et la longueur $L = 80$

1. Les condition obtenues en remplaçant $(u_0, v_0) = (1/b, 1/b^2)$ dans les solution du système linéarisé

Conclusion

Dans ce projet nous avons testé l'effet de différents éléments reliés à un problème de réaction-diffusion utilisé en biologie pour représenter les motifs du pelage de certains animaux. Dans la première partie, nous avons vu que si la solution sans diffusion est stable et qu'elle devient instable en présence de diffusion, nous pouvons arriver à la création d'un motif. Nous avons ensuite cherché à représenter numériquement nos assertions mathématiques. Dans un premier temps le terme de diffusion, pour lequel nous avons implémenté deux méthodes : la méthode explicite directe et la méthode de Cranck Nicholson. Celle de Cranck Nicholson s'est avérée plus précise, et surtout convergente sans conditions. Ensuite pour y ajouter le terme de réaction, nous avons utilisé la méthode d'Euler explicite. Enfin, grâce au modèle de Gierer-Meinhardt nous avons réussi à modéliser ce que nous cherchions depuis le début : une formation de patterns. Nous avons obtenu que la concentration des réactifs est plus grande à certains endroits et bien plus faibles à d'autres, et ce de façon régulière. Il serait intéressant de pouvoir modéliser les patterns en 2D, et de voir les variations de motifs en fonction des conditions initiales.

Annexe 1

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c$$

Voyons comment on établit cette équation. Considérons une région bornée $V \subset \Omega$ de frontière S , de classe C_2 et où Ω est un ouvert de \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 . Par la loi de conservation de la masse, le taux de variation de la concentration dans V est égal au flux passant à travers la frontière S plus ce qui est créé dans V . Comme nous traitons ici seulement du problème de la diffusion de la matière, nous considérons le terme de création nul. Ainsi nous obtenons l'équation suivante.

$$\int_V \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div} J \right) dv = 0$$

Où nous écrivons la i^e composante de la divergence tensorielle par

$$(\operatorname{div} J)_i = \frac{\partial J_{i1}}{\partial x} + \frac{\partial J_{i2}}{\partial y} + \frac{\partial J_{i3}}{\partial z}$$

Puisque nous avons toujours la région V arbitraire et en utilisant la loi de Fick, $J = -D\nabla c$, avec

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{pmatrix}$$

Où les d_i sont les coefficients de diffusion des différentes substances, nous obtenons l'équation de la diffusion pour plusieurs éléments.

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(-D\nabla c) = 0$$

donc

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D\Delta c = 0 \text{ dans } \Omega$$

qui est l'équation classique de la diffusion pour une seule substance de concentration c .

Pour obtenir l'équation de diffusion pour plusieurs substances il faut refaire les mêmes manipulations en notation vectorielle.

Bibliographie

- [1] Philippe Chartier. Stabilité des systèmes non-linéaires. <http://www.pacm.princeton.edu/documents/Kimura.pdf>, 2013. pg. 2.
- [2] Ralph Chill. Equations différentielles et stabilité. pg. 36.. 40.
- [3] Yayoi Teramoto Kimura. The mathematics of patterns- the modeling and analysis of reaction-diffusion equations. <http://www.pacm.princeton.edu/documents/Kimura.pdf>, 2014.
- [4] J.D Murray. Mathematical biology- spatial models and biomedical applications, 2003. pg. 82..90.
- [5] J. Olver Peter. Numerical analysis lecture notes. pg. 192.. 198.
- [6] Julien Vovelle. Equation différentielles- stabilité et portraits de phase de phase des systèmes autonomes. <http://math.univ-lyon1.fr/~vovelle/4Cours.pdf>.
- [7] Wikipédia. Équation de la chaleur. https://fr.wikipedia.org/wiki/%C3%89quation_de_la_chaleur.