

Exploration de phénomènes émergents du système à réaction-diffusion de Fitzhugh-Nagumo

Gabriel Chaves d'Oliveira and Bertrand Asselin de Williencourt

11 juin 2017



CentraleSupélec

Table des matières

Introduction	3
1 Le choix du système	4
2 L'intégration du système sans perturbations	5
2.1 Une première méthode : la méthode d'Euler classique	5
2.2 Une méthode plus élaborée : la méthode ETD 'exponential-time dif- ferencing'	6
2.3 Application à notre système	7
3 L'influence des perturbations sur le système	8
Conclusion	9

Introduction

Dans des domaines tels que la chimie ou la biologie, on est souvent confronté à des phénomènes de diffusion, régissant la répartition des espèces dans l'espace, mélangés à des réactions locales qui représentent les transformations de ces espèces. Les modèles mathématiques utilisés pour étudier ce genre de systèmes sont appelés *système à réaction-diffusion*. Ils sont régis par des équations de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \Delta u_1 + R_1(u_1, \dots, u_n) \\ \vdots \\ \frac{\partial u_n}{\partial t} = D_n \Delta u_n + R_n(u_1, \dots, u_n) \end{array} \right.$$

Δu_i est le laplacien de u_i , D_1, \dots, D_n sont les différents coefficients de diffusion, et les $R_i(u_1, \dots, u_n)$ sont les termes non linéaires de chaque équation, représentant les réactions locales, variant d'un système à un autre. Les variables u_i représentent ainsi les concentrations des espèces i .

Étant donné un tel modèle, on peut alors intégrer numériquement ce genre de système, pour simuler son évolution dans l'espace au cours du temps.

L'objet de ce projet était de s'inspirer d'un code python simulant un système de Gray-Scott[3], et de l'adapter à un système à réaction-diffusion de notre choix, l'étendre afin de mettre en avant les caractéristiques propres à notre système. Nous avons également utilisé le module CV2 d'OpenCv permettant de visualiser le système sur écran et de créer des effets particuliers.

Il a donc fallu dans un premier temps choisir un système à réaction-diffusion à étudier, puis réaliser une implémentation efficace pour ce système, observer l'évolution 'brut' du système, et enfin ajouter des perturbations à l'aide d'une caméra Kinect.

1 Le choix du système

Nous avons d'abord pensé à différents systèmes à réaction-diffusion, comme les systèmes de Ginzburg-Landau et de Belousov-Zhabotinsky.

C'est finalement sur le système de Fitzhugh-Nagumo que nous nous sommes penchés, pour son application à la propagation ondulatoire dans les des neurones excités qui nous a particulièrement plu. Le système comporte deux équations de réaction diffusion liées :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u + (a - u)(u - 1)u - v + I \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + e(bu - v) \end{cases}$$

Il permet de modéliser les différents comportements d'un neurone suite à une excitation extérieure, que représente ici I . Le comportement général du système est donc influencé non seulement par l'excitation I mais aussi par les valeurs des paramètres $\{a, b, e\}$ ainsi que par l'état initial des grandeurs qui va déterminer la forme de l'onde propagée. Ainsi, grâce au document *Parameters Analysis of FitzHugh-Nagumo Model for a Reliable Simulation*[4], nous avons pu obtenir différentes informations.

Ce document nous a permis d'identifier trois modes de d'évolution du systèmes, déterminés par les grandeurs $\{a, b, e, I\}$:

- Réfractoire : l'excitation initiale est immédiatement atténuée dans le neurone
- Propagation : l'excitation initiale se propage le long du neurone
- Oscillation : l'excitation initiale se propage et l'onde produite est répétée périodiquement le long du neurone.

Le passage en mode 'oscillation' est notamment déterminé par le signe de a , il faut $a < 0$, et dans ce mode, nous avons aussi eu une information importante sur la rapidité du système, qui est l'influence de $\epsilon = e * b$ sur la période d'oscillation :

$$P = 3.065 * \epsilon^{-0.8275} + 4.397$$

De plus, ce document nous a montré la dépendance forte du système à l'état initial des concentrations. Nous avons donc envisagé 3 conditions initiales différentes sur l'interface pour les concentrations de la grandeur u :

- (1) Carré central
- (2) Bande initiale sur le côté gauche
- (3) Point excentré

Ainsi, nous avons donc observé neuf possibilités de comportement du système de réaction-diffusion de Fitzhugh-Nagumo.

2 L'intégration du système sans perturbations

Le choix du système étant fait, il faut à présent le simuler numériquement, en choisissant la méthode la plus rapide possible, pour pouvoir étudier l'évolution du système sur des temps grands, dans la mesure du possible. Nous avons donc utilisé deux méthodes d'intégration. Dans cette partie, nous nous limitons à un système sans perturbations, pour tester le fonctionnement simple de l'implémentation du système.

2.1 Une première méthode : la méthode d'Euler classique

Une première méthode très naturelle pour intégrer un tel système est la méthode d'Euler explicite, qui calcule la solution u , en fonction de son état précédent comme ceci :

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n + h * D_{u_n} \Delta u_n + (a - u_n)(u_n - 1)u_n - v_n + I \\ v_{n+1} = v_n + h * D_{v_n} \Delta v_n + e(bu_n - v_n) \end{cases}$$

L'inconvénient de cette méthode est qu'elle nécessite un pas de temps h extrêmement faible, car si cette condition n'est pas validée, les valeurs de u divergent et ne peuvent plus être traitées informatiquement. Après tests, nous avons donc choisi $dt = 0,1$, ce qui donne une évolution très lente du système. Cela est principalement dû à la présence de termes non linéaires dans les équations, qui complexifient le temps de calcul, typiquement un terme en u^3 dans la première équation.

Nous obtenons alors les résultats suivants :



FIGURE 1 – Évolution du système, en mode oscillation-Euler, pendant 1mn, état initial (1)

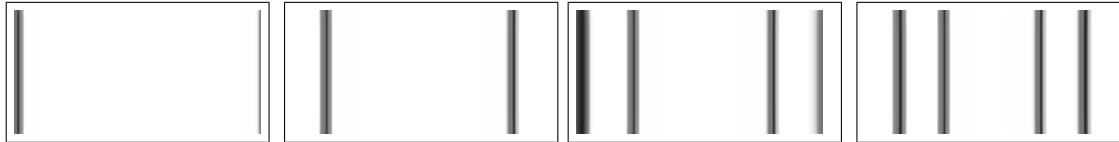


FIGURE 2 – Évolution du système, en mode oscillation-Euler, pendant 1mn30s, état initial (2)

Dans le cas d'un système en mode 'oscillation', on voit que le système met plus d'une minute à faire apparaître un deuxième motif, ce qui est très lent. Ainsi, cette

méthode d'intégration n'est pas très adaptée à notre système, à cause de sa 'rigidité' (ou stiffness), qui caractérise les systèmes ne pouvant être résolus numériquement de façon explicite. Nous nous sommes donc penchés sur un autre modèle d'intégration.

2.2 Une méthode plus élaborée : la méthode ETD 'exponential-time differencing'

Afin de pouvoir visualiser une évolution plus rapide du système, nous avons appliqué la méthode *exponential time differencing*. Cette méthode suppose que le système soit de la forme suivante :

$$\frac{dU}{dt} = L * U(t) + N(U(t))$$

où L est un coefficient de la partie linéaire de l'équation, et N(U(t)) est la partie non linéaire de l'équation.

Le principe de la méthode, comme expliqué dans les articles de Cox & Mathews et de Kassam & Trefethen [2][1], est le suivant :

Notant $V(t) = e^{-Lt}U(t)$, on a : $\frac{dV}{dt} = e^{-Lt} * (\frac{dU}{dt} - LU(t)) = e^{-Lt} * N(U(t))$

Donc $\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{dV}{dt} dt = e^{-Lt_{n+1}}U(t_{n+1}) - e^{-Lt_n}U(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-Lt} N(U(t)) dt$

Et Avec $t_{n+1} = t_n + h$, on obtient :

$$U(t_{n+1}) = U(t_n) * e^{Lh} + e^{Lh} * \int_0^h N(U(t + \tau)) e^{-L\tau} d\tau$$

Ensuite, selon la précision que l'on souhaite, on peut approximer plus ou moins l'intégrale, si bien que par exemple, pour une approximation du premier ordre, on obtienne :

$$U_{n+1} = U_n * e^{Lh} + N(U_n) * \frac{e^{Lh} - 1}{L}$$

et nous utilisons également une version s'appuyant sur la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4.

Nous utiliserons également la formule de Cauchy :

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} * \int_{\Gamma} \frac{f(\xi)}{\xi - z} d\xi$$

pour calculer certaines valeurs sans risquer d'annulations numériques, notamment pour les calculs liés à L, qui sont cruciaux pour l'intégration du système. [1]

2.3 Application à notre système

On remarque cependant que notre système n'a pas (encore) la forme attendue pour pouvoir être traité par la méthode ETD. Nous allons pour cela travailler dans le domaine spectral avec les transformées de Fourier spatiales de u, v : $\mathcal{F}(u)(k_1, k_2) = U(k_1, k_2)$, $\mathcal{F}(v)(k_1, k_2) = V(k_1, k_2)$. Les équations deviennent, une fois transformées :

$$\begin{cases} \frac{dU}{dt}(k_1, k_2) = [-D_u(4\pi^2(k_1^2 + k_2^2) + a)] * U + [(a + 1)\mathcal{F}(\mathcal{F}^{-1}(U)^2 - \mathcal{F}^{-1}(U)^3) - V] \\ \frac{dV}{dt}(k_1, k_2) = [-D_v(4\pi^2(k_1^2 + k_2^2)^2 + e)] * V + beU \end{cases}$$

On peut donc distinguer sur chaque équation une partie linéaire et une partie non linéaire, et donc appliquer la méthode ETD, réputée plus rapide que la méthode d'Euler classique utilisée dans la première partie. Une l'implémentation faite, et après quelques tests, nous avons pu choisir un pas de temps $dt = 2$ pour la version ETD1, et $dt = 2.5$ pour la version de Runge-Kutta ETDRK4. Nous avons donc pu multiplier le pas de temps par 20.

Nous obtenons les résultats suivants :



FIGURE 3 – Évolution du système, en mode oscillation-ETD1, pendant 5 s, état initial (1)

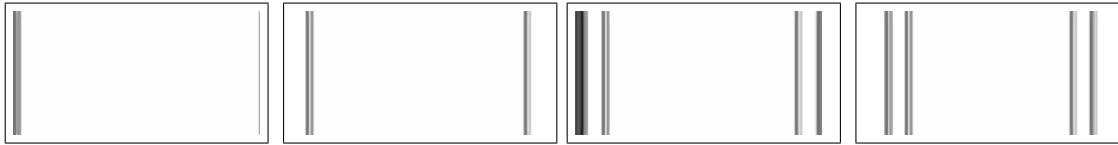


FIGURE 4 – Évolution du système, en mode oscillation-ETD1, pendant 6 s, état initial (2)

On constate ainsi qu'on obtient la même évolution du système qu'avec la méthode d'Euler explicite, mais sur des temps beaucoup plus faibles, ici 5 et 6 secondes. Avec la méthode ETD, l'évolution du système est donc 10 à 15 fois plus rapide qu'avec la méthode d'Euler. C'est donc une méthode bien plus efficace.

3 L'influence des perturbations sur le système

Le système 'à vide' étant bien réglé, on peut à présent ajouter quelques perturbations pour observer les réactions du système. Afin de simuler ces perturbations locales, nous avons utilisé une caméra Kinect. Nous avons pu la mettre en lien avec notre code de Fitzhugh-Nagumo à l'aide de CV2. La Kinect était préalablement programmée de telle façon que seuls des objets situés dans son champ de vision et à une distance entre 1 et 4 mètres agissent comme des perturbations. Les autres n'ont aucune influence sur le système.

Nous avons donc réalisé nos expériences sur la base de ces réglages. A noter qu'il faut se trouver dans une pièce assez grande pour ne pas avoir trop d'objets à une distance entre 1 et 4 mètres de la caméra.

L'un de nous s'est donc placé fixement à une distance de 3 mètres en face de la Kinect. Puis, nous avons visionné le comportement de notre système, selon les 3 conditions initiales préalablement définies et dans les modes 'Propagation' et 'Oscillation', car en effet, l'impact de cette perturbation sur le mode 'Réfraction' étant très faible, nous n'avons pas étudié cette situation.

Nous obtenons alors les résultats suivants :

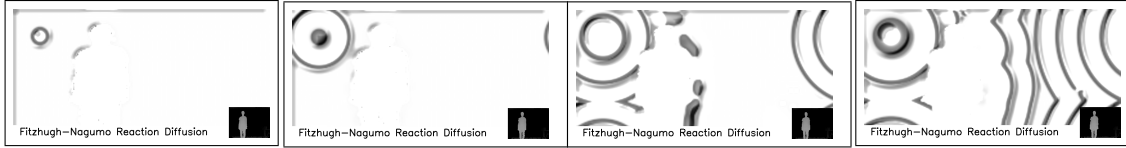


FIGURE 5 – Évolution du système, en mode oscillation-ETD1, avec perturbation, état initial (3)

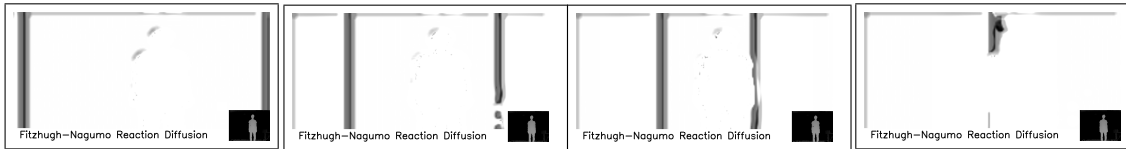


FIGURE 6 – Évolution du système, en mode propagation-ETD1, avec perturbation, état initial (2)

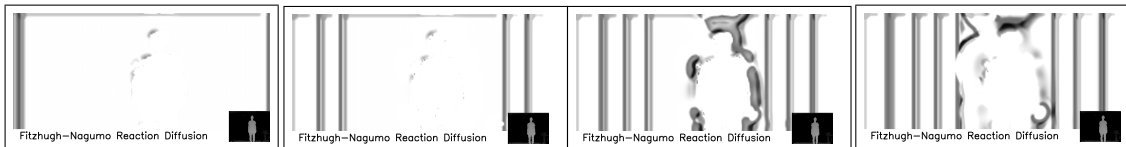


FIGURE 7 – Évolution du système, en mode oscillation-ETD1, avec perturbation, état initial (2)

On constate que la présence d'une propagation statique n'empêche pas la propagation de l'onde à travers cet obstacle, mais cependant change relativement sa forme, comme on peut le voir sur la figure 5. L'onde 'prend la forme' de l'obstacle dès qu'elle l'a traversé.

De part la symétrie des ondes, on a l'impression, notamment sur le mode oscillation de la bande, que l'objet perturbant crée sa propre onde. On peut également noter que le placement de l'obstacle par rapport à la position de la condition initiale influe beaucoup sur la forme que va prendre le système.

Conclusion

A travers ce projet, nous avons donc pu voir que les systèmes à réaction-diffusion font bel et bien partie des systèmes 'stiff', et qu'ils supportent mal l'implémentation par des méthodes trop classiques d'intégration.

En revanche, le modèle mathématique spectral d'intégration d'Exponential-Time Differencing permet d'obtenir de bien meilleurs temps d'exécution que le modèle classique d'intégration d'Euler et de diminuer largement le temps de propagation, et nous avons pu observer ces différences grâce à nos implémentations. Celles-ci nous ont permis de découvrir un système, ayant de multiples facettes, très influencé par l'état initial, ce qui permet au système de Fitzhugh-Nagumo de modéliser de nombreux phénomènes.

Par ailleurs, grâce à l'utilisation d'une Kinect, nous avons pu voir comment le système de Fitzhugh-Nagumo réagissait à des perturbations localisées, là où il y a des perturbations dans tout système réaliste. Nous avons donc pu observer leur influence sur la propagation de plusieurs types d'onde.

Nous remercions les auteurs des documents cités pour l'aide qu'ils nous ont apportés par leurs travaux.

Références

- [1] Lloyd N Trefethen Aly-Khan Kassam. Fourth-order time stepping for stiff pdes. *Numerical Analysis Group*, 2011.
- [2] S.M. Cox and P.C. Matthews. Exponential time differencing for stiff systems. *Journal of Computational Physics*, 176(2) :430 – 455, 2002.
- [3] Jeremy Fix. `grayscale.py`, 2016.
- [4] Binbin Xu, Stéphane Binczak, Sabir Jacquir, Oriol Pont, and Hussein Yahia. Parameters analysis of fitzhugh-nagumo model for a reliable simulation. In *36th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC'14)*, Chicago, United States, August 2014. IEEE Engineering in Medicine and Biology Society, IEEE.