

Les structures de Turing

Vachon Victor

Table des matières

1	Introduction au projet	2
2	Définition du modèle	2
2.1	Reaction Diffusion Equations	2
2.2	Simulation des EDP	3
2.3	Simulation de l'équation de réaction	4
3	Modèle complet	7
3.1	Équation numérique	7
3.2	Implémentation	7
4	Validation du modèle	10
4.1	Conservation	10
4.2	Valeur attendu	12
4.3	Stabilité numérique	13
5	Analyse	14
5.1	Analyse de stabilité	14
5.2	Exploration des paramètres	16
5.3	Conditions initiales	17
5.3.1	Conditions aux Limites	18
5.3.2	Concentrations Initiales	18
6	Lien avec la biologique	22
7	Conclusion	23

1 Introduction au projet

De la disposition géométrique des pétales d'une fleur aux motifs complexes sur la peau des animaux, la nature démontre une capacité remarquable à générer des structures ordonnées. Très tôt, les scientifiques ont étudié cette diversité de formes et de motifs. Au XIIIe siècle déjà, le mathématicien Fibonacci a identifié une séquence de nombres où chaque nombre est la somme des deux précédents. Cette progression mathématique se retrouve étonnamment souvent dans les arrangements naturels, comme l'agencement des pétales de fleurs, des cônes de pin et des coquillages. La célèbre spirale de Fibonacci est ainsi devenue un exemple emblématique de la manière dont les principes mathématiques peuvent se manifester dans le monde naturel.

Plus récemment, Alan Turing, dans son article de 1952 intitulé "The Chemical Basis of Morphogenesis", a proposé que certains motifs, tels que les rayures des zèbres ou les motifs sur les coquilles, pourraient émerger à partir de processus chimiques simples. Plus précisément, il a introduit l'idée que certaines réactions chimiques, lorsqu'elles sont couplées à des processus de diffusion, peuvent conduire à l'apparition spontanée de motifs réguliers dans un système initialement homogène. Ces processus sont appelés réactions-diffusion.

Aujourd'hui, grâce à l'informatique moderne, on peut simuler ces effets naturels et tenter de reproduire une grande variété de structures semblables à celles observées dans la nature. Ma démarche dans ce projet s'articule autour du développement physique d'équations réaction-diffusion et de leur résolution numérique pour réaliser une simulation, puis d'effectuer une analyse physique et numérique des différents résultats obtenus par l'ajustement des paramètres du modèle.

2 Définition du modèle

2.1 Reaction Diffusion Equations

Les équations de réaction-diffusion sont une classe d'équations aux dérivées partielles qui décrivent des phénomènes où interviennent deux processus principaux : la diffusion et la réaction. Nous allons examiner le cas avec deux composants, qui se présente sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\frac{\partial a(x, y, t)}{\partial t} &= D_a \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \right) + R_a(a(x, y, t), b(x, y, t)) \\ \frac{\partial b(x, y, t)}{\partial t} &= D_b \left(\frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 b}{\partial y^2} \right) + R_b(a(x, y, t), b(x, y, t))\end{aligned}$$

Ici, $a(x, t)$ et $b(x, t)$ représentent la concentration des substances chimiques a et b au point x et au moment t . Les fonctions R_a et R_b déterminent comment les concentrations

changent en raison des réactions interspécifiques, et D_a et D_b sont les coefficients de diffusion.

La partie diffusion de ces équations provoque l'étalement des zones de haute concentration vers des zones de plus faible concentration, tout en conservant la quantité totale du produit chimique. Pour mieux comprendre ce phénomène, concentrons-nous sur l'équation suivante :

$$\frac{\partial a(x, y, t)}{\partial t} = D_a \left(\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \right)$$

Cette équation est fondamentale en physique car elle apparaît sous différentes formes dans de nombreux domaines, comme dans l'étude de la diffusion, l'équation de la chaleur... Elle possède une solution analytique, qui pour une distribution gaussienne initiale est :

$$a(x, y, t) = \frac{a_0}{2\pi\sigma^2(t)} \exp \left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2(t)} \right)$$

où

$$\sigma^2(t) = \sigma_0^2 + 2D_a t$$

Une distribution gaussienne centrée qui se disperse avec le temps en deux dimensions. Le terme $\sigma^2(t)$ montre comment la dispersion augmente avec le temps, influencée par le coefficient de diffusion D_a .

2.2 Simulation des EDP

Pour simuler les équations aux dérivées partielles (EDP), je vais utiliser la méthode des différences finies explicites. Dans ce schéma, nous approchons la dérivée temporelle de la concentration a en un point (x, y) comme suit :

$$\frac{\partial a(x, y, t)}{\partial t} \approx \frac{a_{x,y,t+\Delta t} - a_{x,y,t}}{\Delta t}$$

Cela représente une approximation avant pour le taux de changement temporel de a . Pour le Laplacien, qui modélise la diffusion dans les deux dimensions spatiales, nous utilisons :

$$\frac{\partial^2 a(x, y, t)}{\partial x^2 + \partial y^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} (a_{x+1,y,t} + a_{x-1,y,t} - 2a_{x,y,t}) + \frac{1}{\Delta y^2} (a_{x,y+1,t} + a_{x,y-1,t} - 2a_{x,y,t})$$

de plus comme $\Delta x = \Delta y$:

$$\frac{\partial^2 a(x, y, t)}{\partial x^2 + \partial y^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} (a_{x+1,y,t} + a_{x-1,y,t} + a_{x,y+1,t} + a_{x,y-1,t} - 4a_{x,y,t})$$

Cette formule calcule le Laplacien en sommant les valeurs de concentration aux points adjacents autour du point (x, y) dans les deux directions x et y , et en soustrayant quatre fois la valeur au centre, divisée par le carré du pas spatial Δx^2 .

La mise à jour de la concentration de a à chaque pas de temps t est alors donnée par :

$$a_{x,y,t+\Delta t} = a_{x,y,t} + \Delta t \left(\frac{D_a}{\Delta x^2} (a_{x+1,y,t} + a_{x-1,y,t} + a_{x,y+1,t} + a_{x,y-1,t} - 4a_{x,y,t}) \right)$$

Voici un exemple numérique de l'effet de la diffusion :

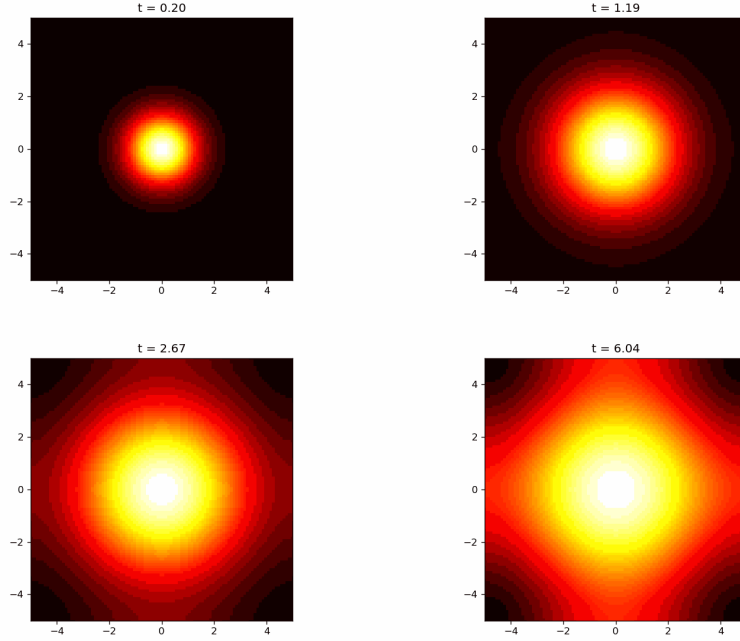


FIGURE 1 – Simulation numérique de l'effet de la diffusion sur la concentration d'un composé au cours du temps.

2.3 Simulation de l'équation de réaction

Il est maintenant nécessaire de déterminer les réactions chimiques intéressantes à modéliser. Dans son article, Turing explique que les réactions chimiques classiques telles que :



sont généralement bien mélangées et ne conduisent pas à des changements spatiaux de concentration si l'on suppose que les substances sont initialement distribuées de manière homogène ; elles tendent vers un état d'équilibre sans créer de motifs spatiaux. En revanche, des réactions telles que :





peuvent créer une instabilité, car elles peuvent entraîner une accumulation locale de la substance B . Si B se diffuse également dans l'espace, cette accumulation peut perturber l'homogénéité du système et conduire à la formation de motifs. Ces réactions ont été plus tard identifiées comme étant biologiquement pertinentes dans les processus chimiques du vivant.

La première réaction, $A + 2B \rightarrow 3B$, indique que deux molécules de l'inhibiteur B réagissent avec une molécule de l'activateur A pour produire trois molécules de l'inhibiteur. C'est un mécanisme d'auto-renforcement pour l'inhibiteur, où la présence de l'activateur accélère la production de l'inhibiteur.

La deuxième réaction, $B \rightarrow P$, représente la transformation en une autre substance P , qui ne participe pas activement à la réaction. Ceci peut servir à moduler la concentration de l'inhibiteur, ajoutant un mécanisme de régulation qui affecte la dynamique globale du système.

Pour simplifier, nous supposons que les réactions inverses ne se produisent pas. Ainsi, le comportement chimique du système est décrit par les équations de réaction :

— Pour A :

$$R_A = -A \times B^2 + F \times (1 - A)$$

— Pour B :

$$R_B = A \times B^2 - (F + K) \times B$$

1. $-A \times B^2$ (**pour** A) et $A \times B^2$ (**pour** B) :

— Ces termes indiquent une réaction où A est consommée proportionnellement au carré de la concentration de B , tout en générant B à un taux dépendant de la concentration actuelle de A et du carré de B . Cette interaction complexe peut entraîner une diminution rapide de A et une augmentation correspondante de B , formant un cycle potentiellement auto-amplificateur.

2. $F \times (1 - A)$ (**pour** A) :

— Ce terme représente la régénération ou production de A , ajoutée au système à un taux proportionnel à F , agissant comme un facteur externe ou source pour A , augmentant sa concentration lorsque A est faible.

3. $-(F + K) \times B$ (**pour** B) :

- Ce terme représente la perte ou dégradation de B , influencée par la somme de F et K . K est spécifique à la dégradation de B , tandis que F influence également la production de A .

J'attire l'attention du lecteur sur l'importance des valeurs de F et K qui seront au centre de nos préoccupations, ces valeurs vont moduler la "force" des réactions nous permettant un contrôle complet sur ce jeu complexe de réaction entre A et B . Nous reviendrons plus en détail sur le sujet dans la partie concerne la stabilité, mais pour le moment, regardons comment la variation de F et K affecte notre système :

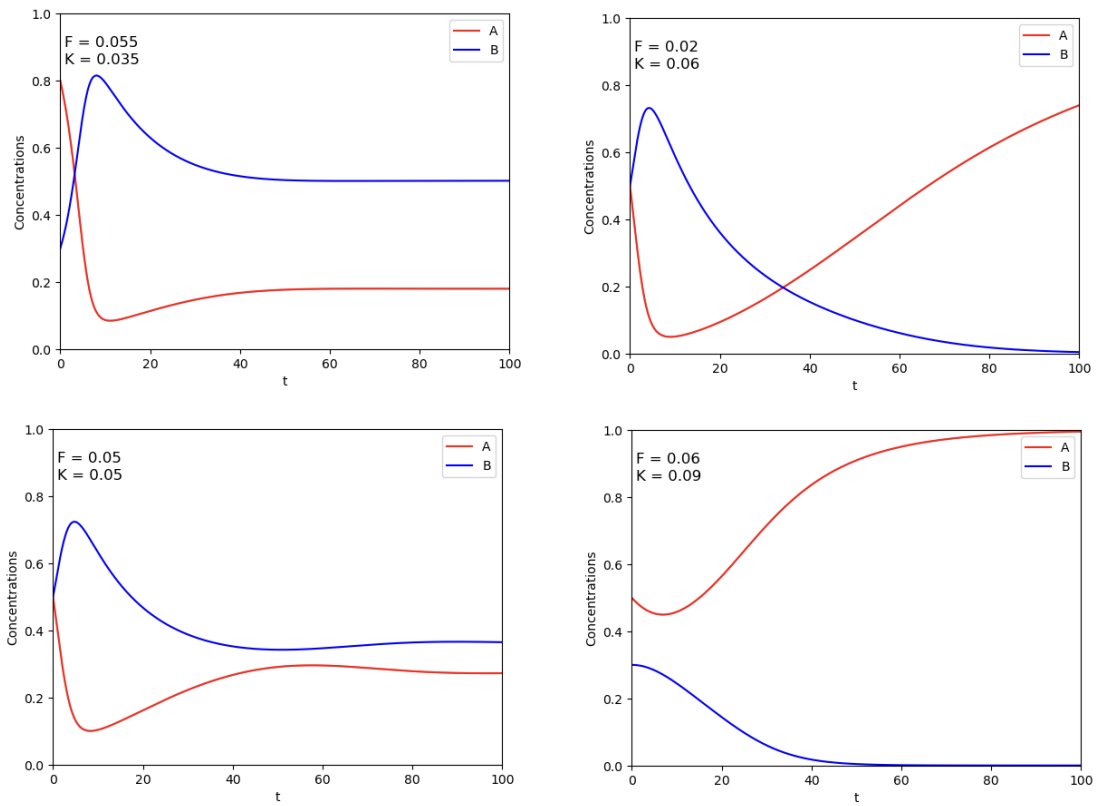


FIGURE 2 – Impact des variations des paramètres F et K sur la dynamique du système.

On remarque que le système est très sensible aux valeurs de F et K et une variété de scénarios différents peuvent aboutir comme des extinctions ou basculements, des oscillations... Chaque modification de F ou K peut donc entraîner un comportement très différent dans le système, nécessitant une analyse attentive pour comprendre et prévoir les résultats de tels changements.

3 Modèle complet

3.1 Équation numérique

Nous pouvons maintenant écrire les équations de réaction-diffusion pour deux composés chimiques, A et B au complet :

$$\frac{\partial A}{\partial t} = D_A \nabla^2 A - AB^2 + F(1 - A) \quad (4)$$

$$\frac{\partial B}{\partial t} = D_B \nabla^2 B + AB^2 - (F + k)B. \quad (5)$$

En version numérique celle donne :

$$A_{\text{new}} = A + \Delta t \left(D_A \frac{A_{x+1,y} + A_{x-1,y} + A_{x,y+1} + A_{x,y-1} - 4A_{x,y}}{\Delta x^2} - AB^2 + F(1 - A) \right)$$

$$B_{\text{new}} = B + \Delta t \left(D_B \frac{B_{x+1,y} + B_{x-1,y} + B_{x,y+1} + B_{x,y-1} - 4B_{x,y}}{\Delta x^2} + AB^2 - (k + F)B \right)$$

Ici, A_{new} et B_{new} représentent les concentrations mises à jour de A et B au temps $t + \Delta t$, et Δx est le pas spatial de la grille sur laquelle les solutions sont calculées.

3.2 Implémentation

Concernant l'implémentation, j'ai créé une classe comprenant toutes les fonctions nécessaires au bon déroulement de la simulation. Elle suit les étapes suivantes :

1 - Initialisation

Au démarrage, nous initialisons une grille, numériquement une matrice, qui représentent les concentrations des substances A et B en chaque point de l'espace. Voici un exemple visuel d'une grille, les concentrations sont ici aléatoires :

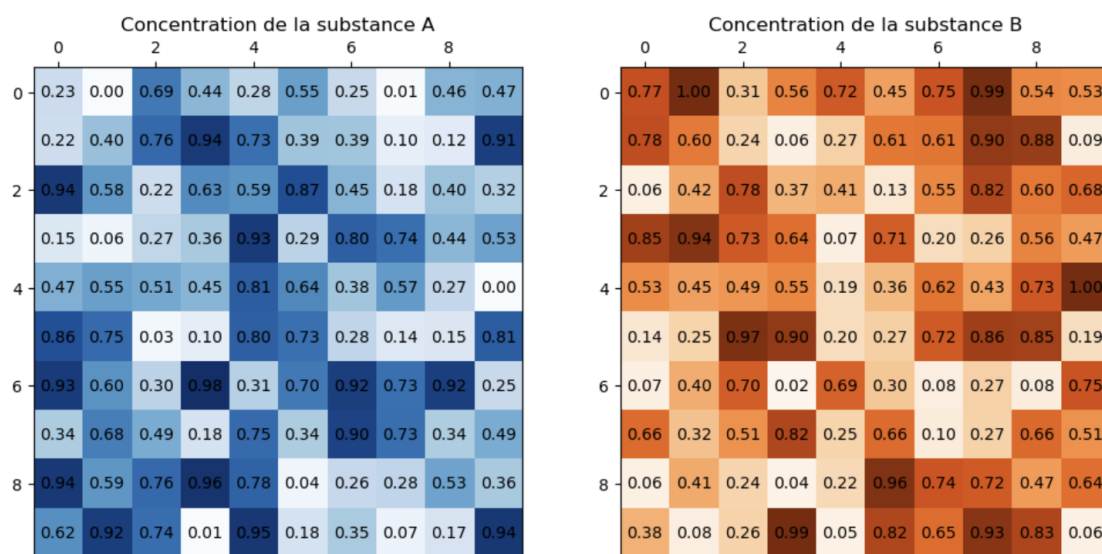


FIGURE 3 – Grille initiale aléatoire représentant les concentrations des substances A et B dans l'espace de simulation.

mais en pratique nous commencerons généralement par une grille qui simule une "goutte" de B dans un réservoir de substance A :

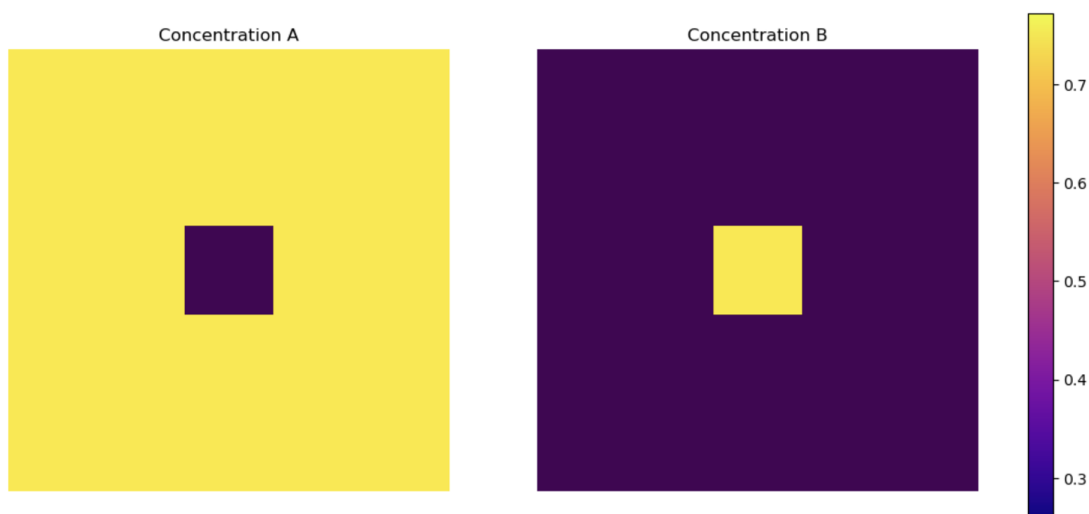


FIGURE 4 – Grille de départ simulant une concentration initiale élevée de B au centre, entourée de A .

Numériquement, pour A , nous remplissons un tableau avec des valeurs initiales de 1 :

```
A = np.ones(shape)
```

et pour B , avec des valeurs de 0 :

```
B = np.zeros(shape)
```

Une région centrale dans chaque grille est ensuite ajustée à 0.5 pour introduire une hétérogénéité initiale :

```
A[centre-20:centre+20, centre-20:centre+20] = 0.5  
B[centre-20:centre+20, centre-20:centre+20] = 0.5
```

On peut aussi, pour ajouter un réalisme supplémentaire, intégrer une petite perturbation gaussienne :

```
A += np.random.normal(scale=0.05, size=shape)  
B += np.random.normal(scale=0.05, size=shape)
```

2 - Calcul du Laplacien

Le Laplacien, joue un rôle crucial dans la modélisation de la diffusion des substances A et B . Il est approximé en utilisant la méthode des différences finies. Nous calculons le Laplacien en deux dimensions comme ceci :

$$\frac{\text{np.roll}(a, 1, \text{axis} = 0) + \text{np.roll}(a, -1, \text{axis} = 0) + \text{np.roll}(a, 1, \text{axis} = 1) + \text{np.roll}(a, -1, \text{axis} = 1) - 4a}{\Delta x^2}$$

La fonction 'np.roll' de NumPy décale les éléments de notre grille (ou matrice) dans une direction spécifiée. Par exemple, 'np.roll(a, 1, axis=0)' décale tous les éléments de la matrice a d'une position vers le bas, tandis que 'np.roll(a, -1, axis=0)' les décale d'une position vers le haut. Ce décalage permet de simuler des conditions périodiques, où les valeurs qui "sortent" d'un côté de la matrice "entrent" de l'autre côté, mimant un espace continu et sans frontières. On va utiliser cette fonction à notre avantage pour calculer efficacement et parallèlement la somme des valeurs des cellules voisines et la valeur de la cellule centrale sera soustraite quatre fois conformément à l'approximation des différences finies. Pour des conditions au frontière fixe, on va utiliser une méthode similaire sauf qu'on va imposer un "padding" de 0 aux frontières.

3 - Simulation des étapes de temps

L'évolution du système à chaque intervalle de temps est gérée par la méthode 'update', qui utilise l'approximation d'Euler pour intégrer les effets de la diffusion et des réactions chimiques :

```
# Calcul du Laplacien
La = laplacien2D(a, dx)
Lb = laplacien2D(b, dx)

# Application de la formule
delta_a = dt * (Da * La + Ra(a,b))
delta_b = dt * (Db * Lb + Rb(a,b))

# Ajout à la concentration actuelle
self.a += delta_a
self.b += delta_b
```

4 - Simulation et Visualisation

On est désormais prêt pour lancer la simulation! On effectue une boucle de l'étape 3 pour un pas de temps et spatial prédéfini (pour rappel $dx = dy$) sur chaque case de la grille jusqu'à un temps final. Pour afficher nos résultats, j'ai créé deux fonctions différentes pour la visualisation, l'une affiche simplement la grille à la fin de la simulation et l'autre enregistre à intervalle régulier l'affichage de la grille pour en faire une animation (gif).

4 Validation du modèle

La validation de mon modèle est une étape cruciale. Pour cela je vais me concentrer sur trois aspects principaux : la conservation de la concentration, la reproduction de motifs et la stabilité numérique.

4.1 Conservation

La conservation de la concentration est une propriété fondamentale des systèmes fermés dans lesquels aucune matière n'est ajoutée ou retirée. Dans le cadre de notre modèle, cette propriété devrait être conservée si on ajoute aucune nouvelle concentration A ($F=0$) et on dégrade aucun B ($K=0$). Pour vérifier ceci, on va rajouter pour chaque pas de temps un calcul de la concentration totale sur toute la grille de A et B puis l'enregistrer.

Comme prévu, les résultats montrent une parfaite conservation des concentrations.

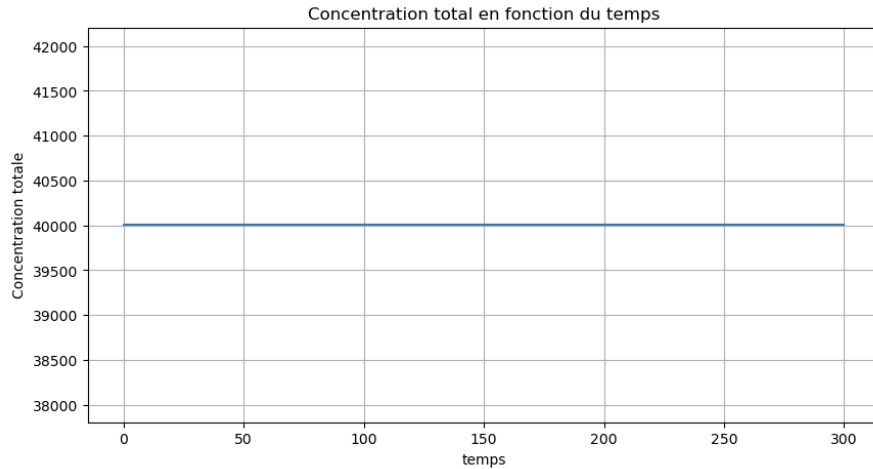


FIGURE 5 – Graphique vérifiant la conservation de la concentration totale des composants A et B au fil du temps.

Un autre comportement attendu serait que si F est maintenu à zéro tandis que K est supérieur à zéro, permettant ainsi uniquement la dégradation de B , cela devrait entraîner une diminution de la concentration totale de B jusqu'à épuisement, après quoi la concentration totale devrait se stabiliser.

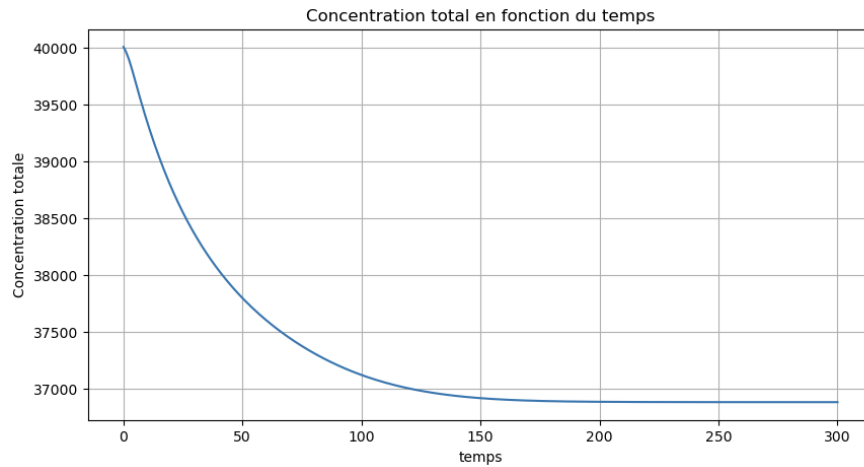


FIGURE 6 – Suivi de la concentration totale de B en présence de dégradation, montrant une diminution jusqu'à stabilisation.

La concentration totale a progressivement diminué, conforme aux attentes théoriques. Une fois tout le B dégradé, la concentration totale s'est stabilisée.

4.2 Valeur attendu

Le modèle que j'utilise est connu pour sa capacité à générer une variété de motifs complexes sous certaines conditions. Pour cette partie de la validation, j'ai sélectionné des ensembles de paramètres spécifiques connus pour produire des motifs distincts selon la littérature. Ainsi, le modèle a été configuré avec des paramètres spécifiques correspondant à différents motifs documentés par Pearson pour des valeurs de F et de K bien spécifique :

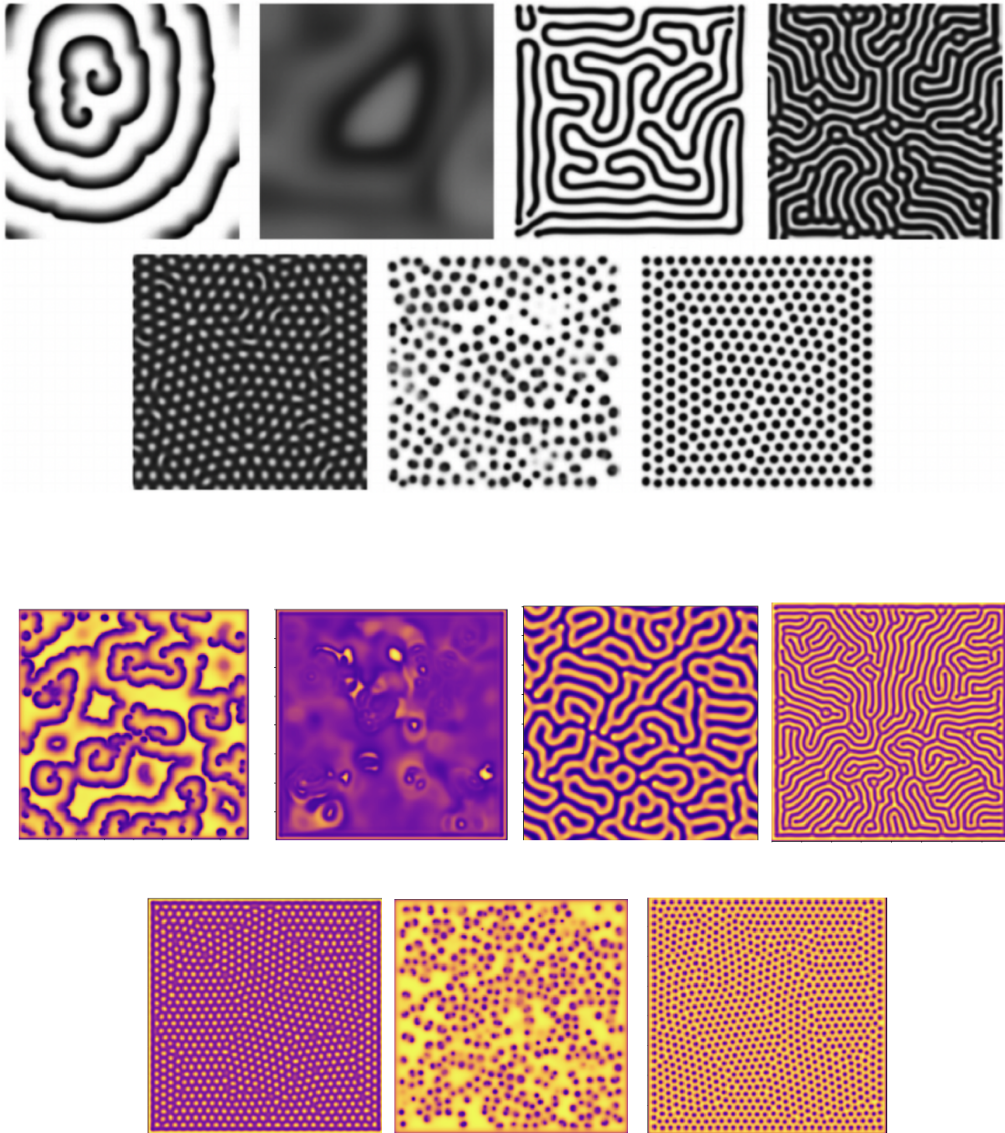


FIGURE 7 – Comparaison entre les motifs prédits par Pearson et ceux obtenus par simulation pour des valeurs spécifiques de F et K .

Dans tous les cas, les motifs observés dans les simulations correspondaient étroitement aux descriptions publiées, démontrant la capacité du modèle à reproduire fidèlement des comportements dynamiques complexes.

4.3 Stabilité numérique

La stabilité numérique est cruciale pour garantir que les simulations restent fiables sur un large éventail de paramètres. Ainsi, j'ai testé diverses combinaisons de pas de temps (Δt) et d'espace (Δx), et exécuté le modèle avec différentes valeurs des paramètres Da , Db , K et F que j'utiliserai lors de mes tests. Si le système détecte une valeur excessivement élevée, cela indique une instabilité. Ces graphiques de test me permettent de délimiter clairement les frontières de validité de mes simulations dans chacune de mes simulations, voici un exemple pour une configuration :

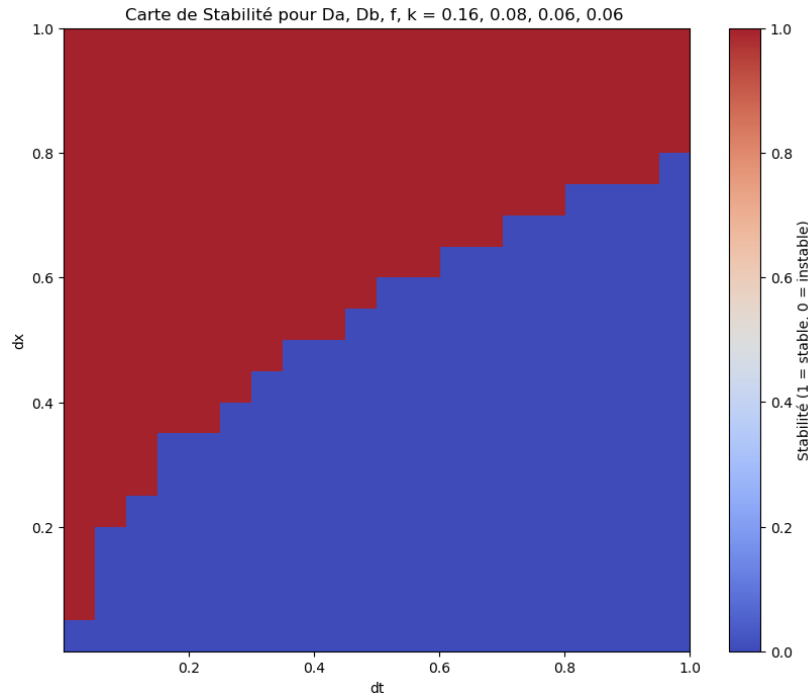


FIGURE 8 – Analyse de stabilité numérique pour une configuration de Da , Db , K , et F .

Grâce à cette démarche, j'ai pu confirmer la stabilité numérique de mon modèle. Pour le moment, tout semble indiquer que le modèle fonctionne correctement dans les limites de cette simulation. La prochaine section sera toutefois déterminante, car elle me permettra de comparer mes résultats avec des résultats analytiques reconnus, assurant ainsi une validation supplémentaire.

5 Analyse

5.1 Analyse de stabilité

Comme on l'a vu dans les sections précédentes, le système est extrêmement variable et arbore un grand nombre de scénarios possibles, parfois avec l'apparition de motifs et parfois non. Nous allons essayer de comprendre comment et pourquoi nous avons cette présence de diversité, pour cela il est nécessaire d'analyser la stabilité des équations de réaction. Considérons initialement un modèle homogène qui ignore les termes spatiaux. Cela simplifie notre système complexe d'équations aux dérivées partielles en un système plus gérable d'équations différentielles ordinaires. Pour notre cas avec les substances A et B , les équations modifiées sont :

$$\begin{aligned}\frac{dA}{dt} &= -AB^2 + F(1 - A) \equiv f(A, B), \\ \frac{dB}{dt} &= AB^2 - (F + k)B \equiv g(A, B).\end{aligned}$$

Nous déterminons les états stationnaires en annulant $f(A, B)$ et $g(A, B)$:

$$\begin{aligned}F(1 - A) - AB^2 &= 0, \\ AB^2 - (F + k)B &= 0.\end{aligned}$$

Nous identifions un état trivial à $(A^*, B^*) = (1, 0)$ et deux autres états, que nous notons (A^+, B^-) et (A^-, B^+) , qui dépendent des paramètres F et k . Ces états sont exprimés comme suit :

$$\begin{aligned}(A^+, B^-) &= \left(\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4(F + k)^2}{F}} \right), \frac{1}{2} \frac{F}{F + k} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4(F + k)^2}{F}} \right) \right), \\ (A^-, B^+) &= \left(\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4(F + k)^2}{F}} \right), \frac{1}{2} \frac{F}{F + k} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4(F + k)^2}{F}} \right) \right).\end{aligned}$$

Ces états sont valides uniquement sous certaines conditions sur F et k qui permettent l'existence de racines réelles pour l'équation quadratique dérivée, spécifiquement :

$$0 < k < \frac{1}{2}(\sqrt{F} - 2F), \quad 0 < F < \frac{1}{4}.$$

Pour évaluer la stabilité de ces états, nous analysons les valeurs propres de la matrice Jacobienne $\mathbf{J}$, calculées pour chaque état :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -F - B^2 & -2AB \\ B^2 & 2AB - (F + k) \end{pmatrix},$$

où les valeurs propres λ sont déterminées par :

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\text{tr}(\mathbf{J}) \pm \sqrt{\text{tr}(\mathbf{J})^2 - 4|\mathbf{J}|} \right),$$

et un état est jugé stable si toutes les valeurs propres présentent une partie réelle négative. L'état $(1, 0)$ est toujours stable. L'état (A^+, B^-) est toujours un point selle, tandis que l'état (A^-, B^+) est stable si :

$$F > \frac{1}{2} \left(-\sqrt{k - 4k^{3/2}} - 2k + \sqrt{k} \right),$$

et instable autrement. Cette analyse révèle, la présence de ce qu'on appelle dans le cadre des équations non linéaires, des "bifurcations". Ici nous avons une bifurcations de nœud-selle et de Hopf. Ces bifurcations signalent des transitions entre différents comportements du système.

Une bifurcation de nœud-selle marque un point où le système bascule entre attraction et répulsion le long d'une trajectoire, suggérant un changement fondamental dans la stabilité de l'état d'équilibre. Il définit une sorte de "frontière" entre différents comportements possibles

La bifurcation de Hopf, quant à elle, est produite lorsqu'un point d'équilibre d'un système dynamique perd sa stabilité à cause d'un paramètre qui traverse une valeur critique, résultant en l'apparition d'un cycle limite. Cela signifie que le système commence à exhiber des oscillations autour de l'état d'équilibre voir même chaotique.

Mathématiquement nos conditions de stabilités peuvent être traduit comme ceci :

1. **Bifurcation de nœud-selle** : Elle se produit quand

$$0 < k < \frac{1}{2}(\sqrt{F} - 2F) \quad \text{pour} \quad 0 < F < \frac{1}{4}.$$

2. **Bifurcation de Hopf** : Elle se produit quand :

$$F > \frac{1}{2} \left(-\sqrt{k - 4k^{3/2}} - 2k + \sqrt{k} \right).$$

graphiquement cela donne :

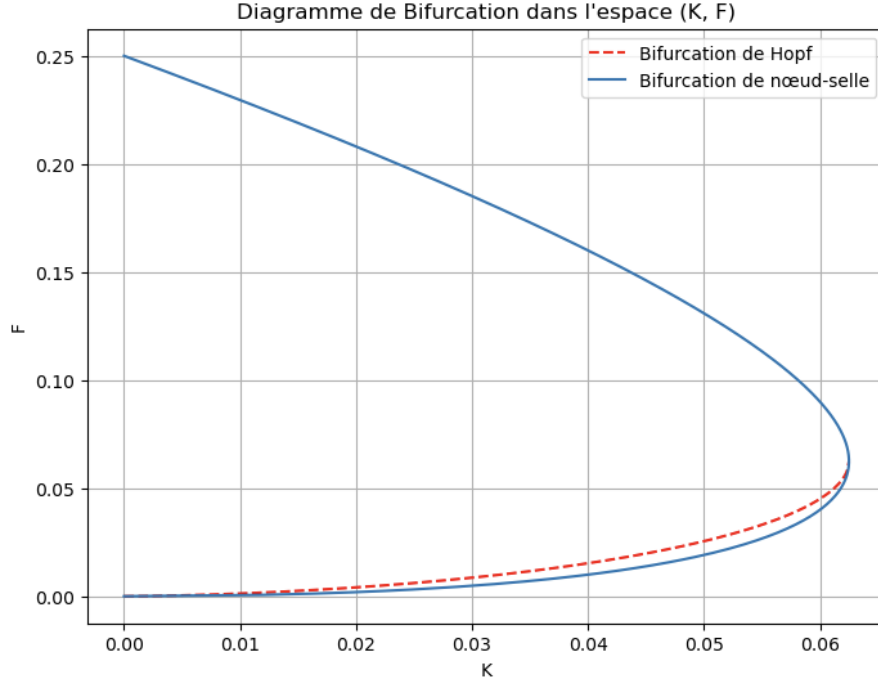


FIGURE 9 – Diagramme montrant les lignes de bifurcation de nœud-selle et de Hopf, et leur influence sur la dynamique du système.

5.2 Exploration des paramètres

Pour faire la connections entre comment les variations des paramètres F et K influencent la dynamique du système et la formation de motifs via les mécanismes d’instabilité, il est nécessaire d’explorer l’espace des paramètres.

Pour cela, j’ai rajouté lors de la simulation un gradient des valeurs de F et K sur la grille, c’est-à-dire qu’une zone à une autre, les valeurs de F et K variaient, mais le principe de la simulation restait le même. Ainsi chaque point de la grille correspond à une configuration spécifique du système, permettant d’observer comment des petites variations dans ces paramètres peuvent déclencher des transitions entre différents comportements dynamiques, de l’homogénéité à des motifs structurés.

Les résultats de cette grille ont été extrêmement révélateurs. En alignant les données recueillies avec les lignes de bifurcation théoriques identifiées précédemment, on constate une correspondance précise entre les prédictions théoriques et les comportements observés par simulation. Plus particulièrement, les zones proches des lignes de bifurcation font l’apparition d’un changement extrême dans le système avec l’apparition d’un basculement de régime, de motifs variés et même de solution oscillatoire et chaotique le long de la bifurcation de Hopf, confirmant le rôle crucial de ces seuils d’instabilité dans la morphogènes des structures complexes observées.

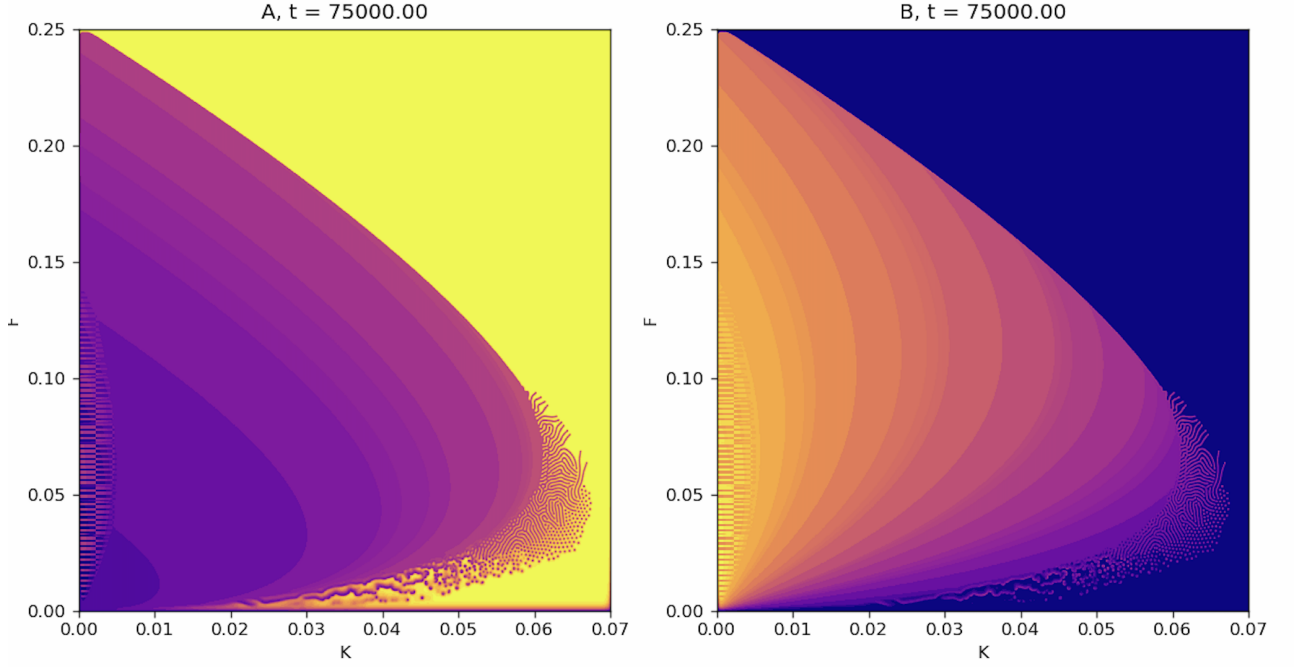


FIGURE 10 – Effets des variations des conditions initiales F et K sur la formation et le type des motifs dans le modèle de réaction-diffusion.

En effet, l'émergence de motifs près des lignes de bifurcation s'explique par le mécanisme d'instabilité de Turing, où une perturbation dans un système autrement stable mène à un état où l'activateur et l'inhibiteur ne se diffusent pas à la même vitesse. Cette différence de diffusion est critique : elle permet à l'inhibiteur de supprimer les augmentations locales de l'activateur de manière inégale, résultant en une auto-amplification des perturbations qui rompent la symétrie initiale de la solution homogène.

5.3 Conditions initiales

L'objectif de cette section est d'explorer l'impact de différentes conditions initiales sur les dynamiques et les motifs émergents dans un système de réaction-diffusion. Pour cela, nous avons varié les conditions aux limites, les concentrations initiales des substances A et B , ainsi que les coefficients de diffusion. Ces expérimentations permettent de comprendre leur influence sur la formation et la stabilité des motifs. Dans toutes les simulations, les taux de F et K sont maintenus constants à 0.06 et 0.062 respectivement, avec des coefficients de diffusion $D_a = 0.16$ et $D_b = 0.08$. Chaque simulation modifie uniquement un paramètre d'intérêt tout en gardant les autres constants.

5.3.1 Conditions aux Limites

Comme discuté précédemment, l'implémentation du Laplacien dans notre modèle permet de simuler des conditions périodiques ou fixes. Nous avons réalisé des simulations comparatives, où seule la condition aux limites variait entre périodique et fixe.

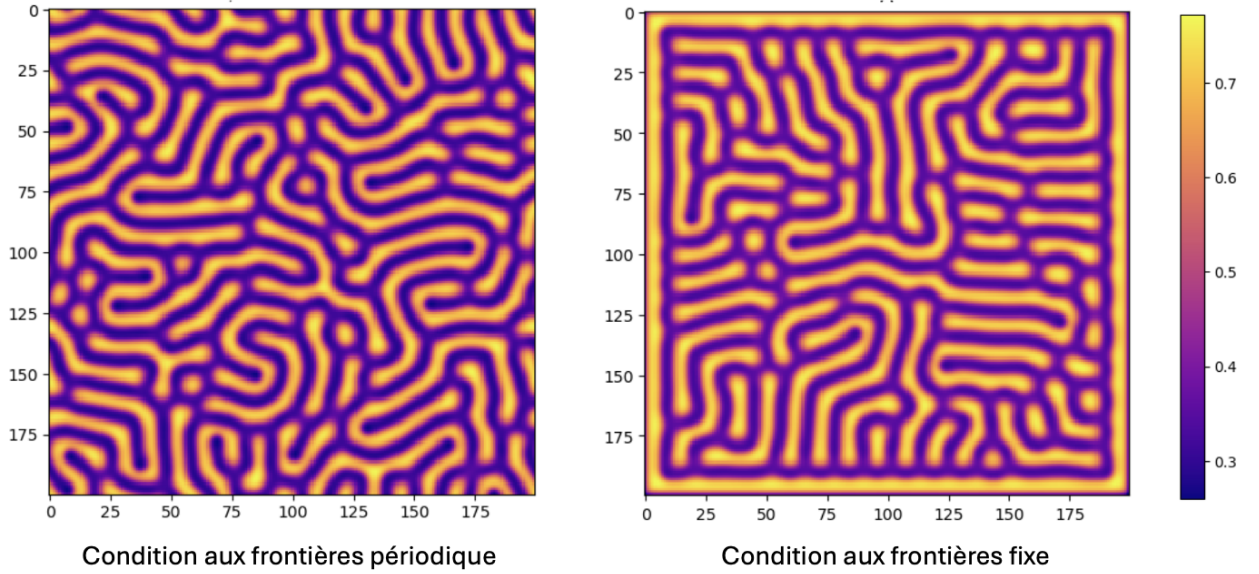


FIGURE 11 – Comparaison des motifs résultant des simulations avec des conditions aux limites périodiques et fixes.

Les résultats montrent que, bien que le motif global évolue différemment avec chaque type de frontière, le type de motif reste qualitativement le même, suggérant une robustesse du système aux variations des conditions aux limites.

5.3.2 Concentrations Initiales

La variation des concentrations initiales a été testée en commençant par un mélange homogène de A et B , ce qui a aussi abouti à des motifs du même type.

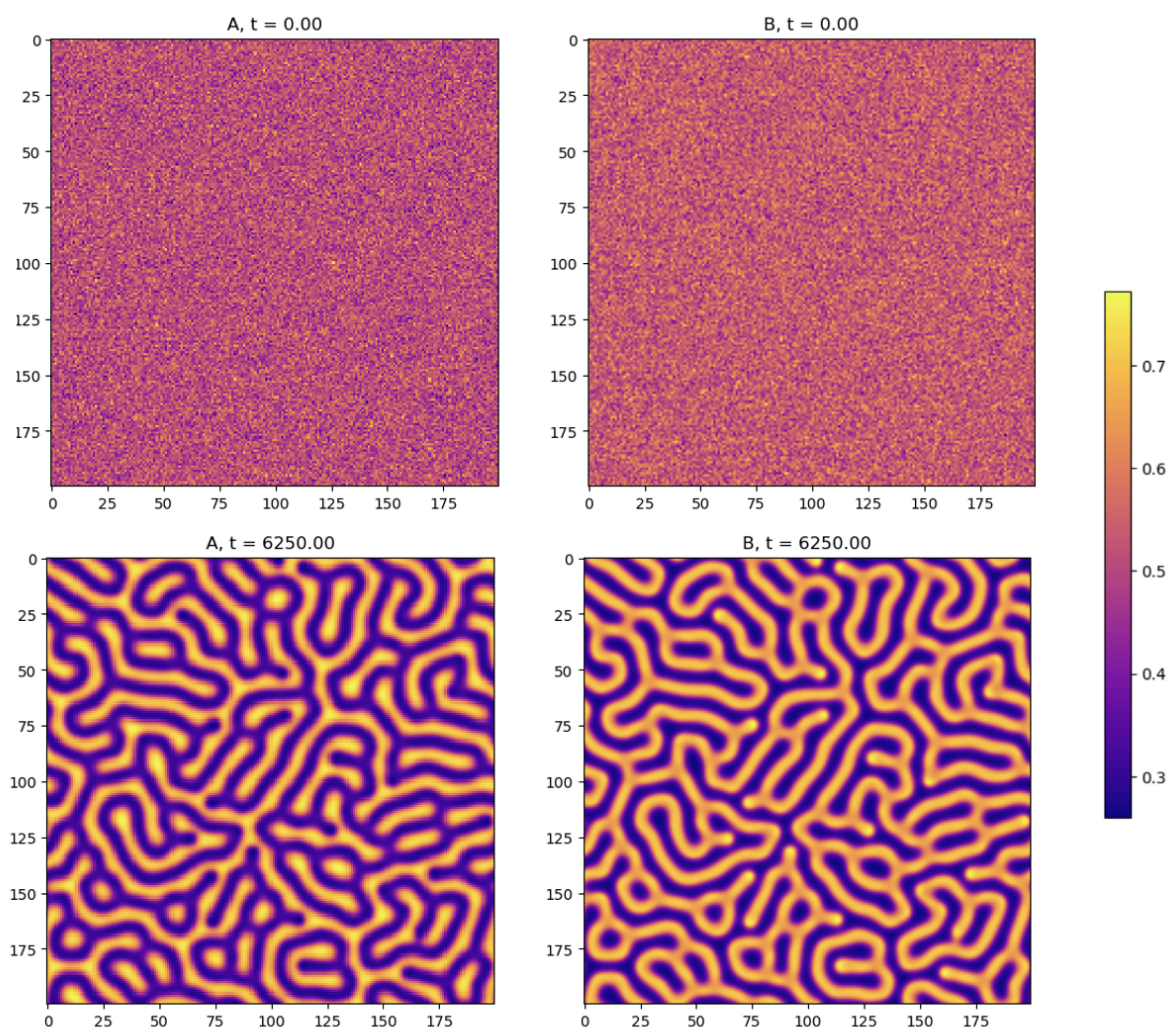


FIGURE 12 – Motifs formés à partir d’un mélange homogène initial des composés A et B , illustrant la cohérence des motifs malgré des conditions initiales variées.

Ensuite, j’ai simulé une très faible concentration de B dans un réservoir de A . Cette fois-ci on remarque l’apparition de structures symétriques. Cette symétrie semble résulter de la diffusion limitée de B , qui induit une réaction intense et localisée là où B est présente.

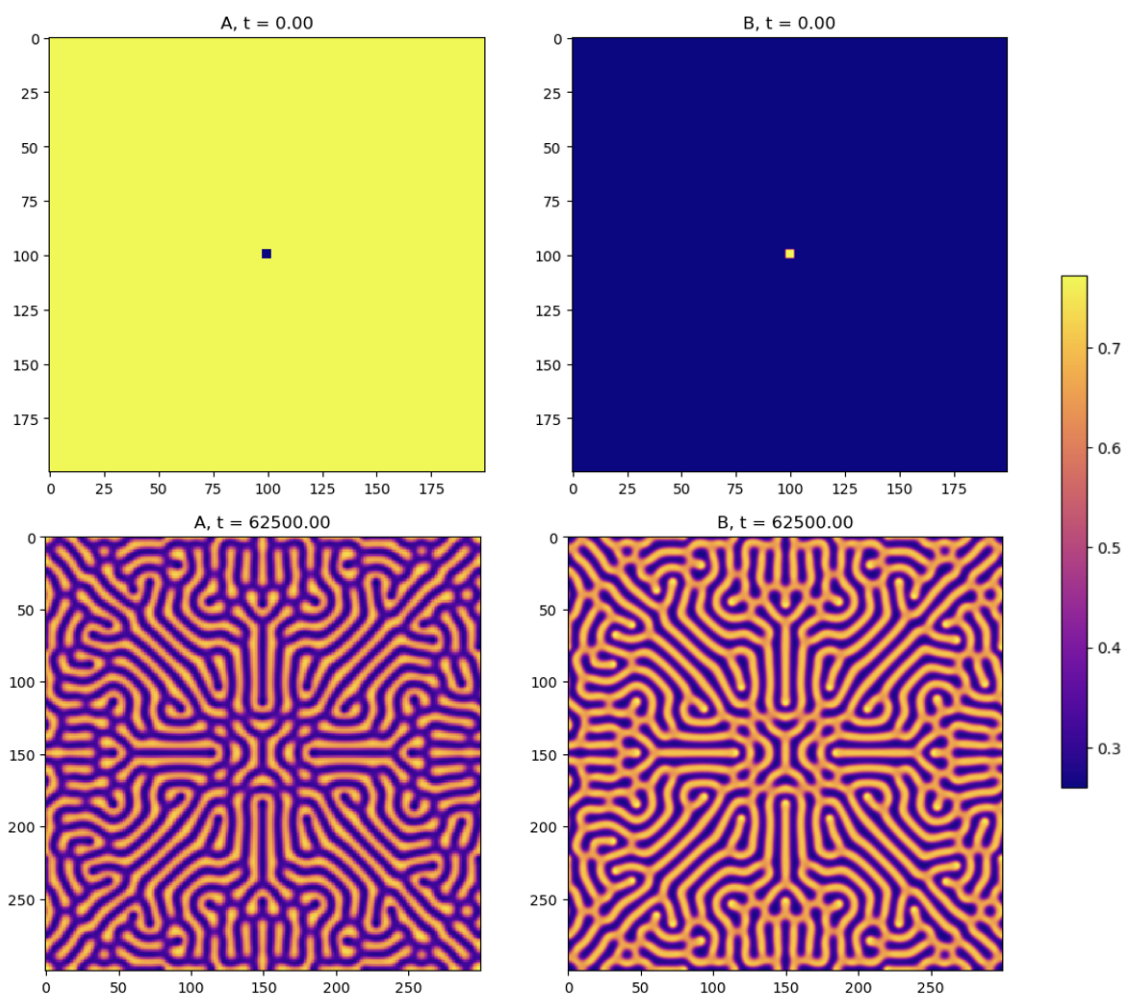


FIGURE 13 – Simulation illustrant l’impact d’une faible concentration initiale de B dans un réservoir de A .

Enfin, j’ai simulé des gouttes de B dispersées aléatoirement à travers un réservoir de A :

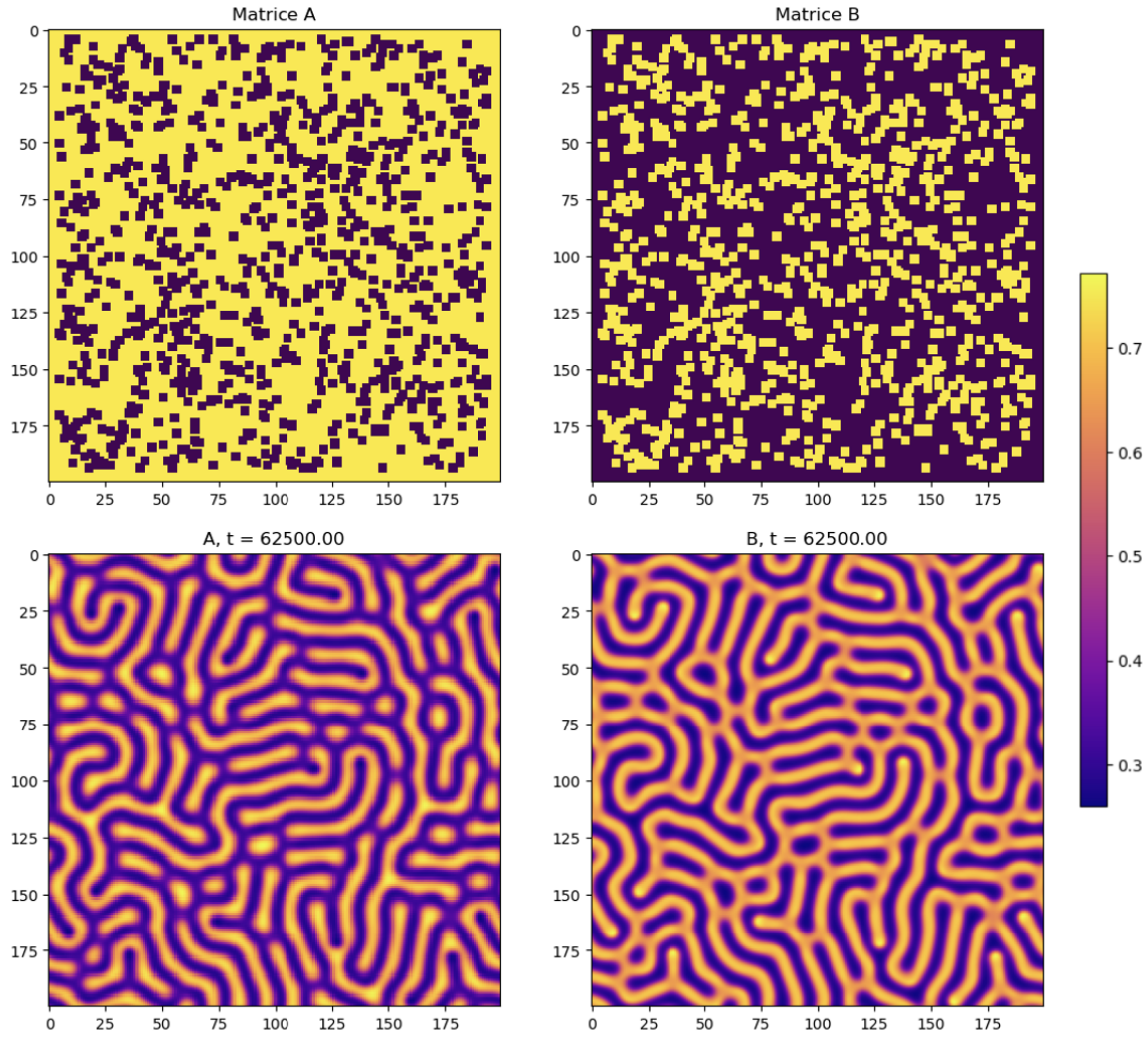


FIGURE 14 – Visualisation des motifs émergents lorsque des gouttes de B sont dispersées aléatoirement dans un réservoir de A .

De manière générale, on remarque qu'indépendamment des conditions initiales, les motifs résultants présentent une cohérence dans le type de forme émergente, bien que les motifs spécifiques variaient significativement d'une simulation à l'autre. Cela suggère une forme de stabilité dans l'instabilité, où, malgré l'apparence extérieure de désordre, le type de motif formé reste prévisible selon les paramètres du système K et F uniquement.

Finalement l'étude de la variation du taux de diffusion n'était pas très concluante, cela créait beaucoup d'instabilité et je devais adapter la simulation en conséquence, cependant j'arrivais toujours, avec le bon pas de temps et un temps de simulation suffisant, à retrouver le même motif. Cependant, une découverte notable a été que lorsque la diffusion de B surpassait celle de A , le système échouait à démarrer, menant à un état sans motif ou à un effondrement rapide du système.

6 Lien avec la biologie

Ce modèle de réaction-diffusion bien que simpliste, nous permet de créer des simulations qui ressemblent étonnamment aux motifs que l'on trouve dans la nature, comme les motifs sur les animaux, les poissons, ou même nos propres empreintes digitales. Ces motifs ne sont pas juste de belles curiosités ; ils sont le résultat de processus chimiques et biologiques que notre modèle cherche à comprendre et reproduire sur ordinateur. En ajustant les paramètres de notre modèle, nous pouvons voir comment de petites modifications dans les réactions chimiques peuvent transformer radicalement l'apparence d'un motif. Dans la nature, nous pourrions penser à des réactions de pigmentation sur la peau induisant des motifs. Voici un petit aperçu des motifs que l'on retrouve communément dans notre modèle et la nature :



FIGURE 15 – Exemples de motifs naturels comparables à ceux générés par le modèle de réaction-diffusion, illustrant le lien avec des phénomènes biologiques.

Mais les équations de réaction-diffusion ne sont pas seulement limitées aux motifs sur la peau des animaux et peuvent expliquer une large gamme de phénomène biologique.

Par exemple, très récemment à McGill, ils ont découvert que les "stries" dans le palais des mammifères étaient aussi régies par des équations de réaction diffusion, il y'a donc encore plein de chose à découvrir sur ces équations !

7 Conclusion

La capacité de la nature à concevoir des motifs complexes a longtemps captivé l'imagination humaine, inspirant des scientifiques de Fibonacci à Turing et j'espère vous aussi à travers ce rapport. En utilisant des méthodes numériques pour simuler la formation de motifs naturels, j'ai pu confirmer des théories historiques que Turing avait réalisé (sans ordinateur !) mais aussi découvrir des dynamiques complexes dans des réactions auxquelles je n'aurai jamais pensé.

Les résultats, notamment l'exploration des paramètres F et K ont révélés comment de petites variations peuvent induire des changements significatifs dans les comportements du système, conduisant à une diversité de motifs qui reflètent les processus naturels. De plus, la flexibilité du système à reproduire fidèlement ces motifs sous diverses conditions initiales et paramètres montre sa robustesse et son applicabilité dans la nature.

Finalement, voici des articles qui mon aidé à mieux comprendre et que j'aimerais mentionner :

Références

- [1] Comparaison des motifs. [en ligne]. <http://www.mrob.com/pub/comp/xmorphism/pearson-classes.html>
- [2] Stability and Instability in the Gray-Scott Model : The Case of Equal Diffusivities. [en ligne]. <https://core.ac.uk/download/pdf/82424777.pdf>
- [3] Localized Patterns in the Gray-Scott Model [en ligne]. https://personal.math.ubc.ca/~ward/papers/thesis_wanchen.pdf
- [4] Reaction Diffusion Patterns in Jaws of the Animal Kingdom [en ligne]. <https://bioengineering.hyperbook.mcgill.ca/reaction-diffusion-patterns-in-jaws-of-the-animal-kingdom/>