Calcul scientifique et équations de réaction–diffusion

T. Dumont, M. Massot

Maply, Université Lyon 1 & CNRS,

S. Descombes, Ensl.

Problèmes de réaction diffusion

(1) $$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = f_i(u_1, \ldots.., u_n), \; i = 1...n, \; n > 1,$$

en dimension 2 ou 3, conditions aux limites (Neuman homogènes).

Problèmes de réaction diffusion

(2) $$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = f_i(u_1, ..., u_n), \; i = 1...n, \; n > 1,$$

en dimension 2 ou 3, conditions aux limites (Neuman homogènes).

Pourquoi s'intéresser à ces problèmes ?

- problèmes intéressants en eux mêmes :

- problèmes intéressants en eux mêmes :
  1. Structure de Turing

- problèmes intéressants en eux mêmes :

1. Structure de Turing
2. Réseaux de gènes

- problèmes intéressants en eux mêmes :
  1. Structure de Turing
  2. Réseaux de gènes
  3. Chimie complexe

- problèmes intéressants en eux mêmes :
  1. Structure de Turing
  2. Réseaux de gènes
  3. Chimie complexe
  4. Dynamique des populations

- problèmes intéressants en eux mêmes :
  1. Structure de Turing
  2. Réseaux de gènes
  3. Chimie complexe
  4. Dynamique des populations
- comme étape vers des problèmes plus difficiles :
  Chimie complexe = R & D + hydrodynamique.

Calcul scientifique :

Recherche d’une interaction Analyse numérique <-> Calcul scientifique.

Calcul scientifique :

Recherche d’une interaction Analyse numérique <-> Calcul scientifique.
Peu d’analyse numérique existante : démarche expérimentale.

Défis :

- nombre d'équations
  Exemple (réseaux de gènes) :

$$f_i(\vec{u}) = \sigma_i \; H(\; (A\vec{u} - \vec{b})_i \;)$$

avec $i = 1, n$ et $n > 100$.

Défis :

- nombre d'équations
  Exemple (réseaux de gènes) :

  $$f_i(\vec{u}) = \sigma_i \; H(\; (A\vec{u} - \vec{b})_i \;)$$

  avec $i = 1, n$ et $n > 100$.
- Raideur
  En dimension 2, f donnée par :
  $f_1(u_1, u_2)$ et $f_2(u_1, u_2)/\varepsilon$.

- Ondes :
  Ondes progressives et ondes spirales.

- Ondes :
  Ondes progressives et ondes spirales.
- Chimie comples : raideur + grand nombre d'équations

- Ondes :
  Ondes progressives et ondes spirales.
- Chimie comples : raideur + grand nombre d'équations
- Un problème posé par des paléontologues

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :
  1. multipas (Crouzeix),

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :
  1. multipas (Crouzeix),
  2. R.K.

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :
  1. multipas (Crouzeix),
  2. R.K.
- méthodes de directions alternées

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :
  1. multipas (Crouzeix),
  2. R.K.
- méthodes de directions alternées

Méthodes numériques :

Il faut diviser pour régner.

- méthodes implicites-explicites :
  1. multipas (Crouzeix),
  2. R.K.
- méthodes de directions alternées

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \ (\text{où} : U = (u_1, ...u_n)^t),$$

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \ (\text{où : } U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \ (\text{où} : U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

1. $D_{\delta t} \circ R_{\delta t}$ et $R_{\delta t} \circ D_{\delta t}$ (formules de Lie),

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t}: \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t}: \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \ (\text{où} : U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

1. $D_{\delta t} \circ R_{\delta t}$ et $R_{\delta t} \circ D_{\delta t}$ (formules de Lie),
2. $R_{\delta t/2} \circ D_{\delta t} \circ R_{\delta t/2}$ et $D_{\delta t/2} \circ R_{\delta t} \circ D_{\delta t/2}$ (formules de Strang).

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \text{ (où : } U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

1. $D_{\delta t} \circ R_{\delta t}$ et $R_{\delta t} \circ D_{\delta t}$ (formules de Lie),
2. $R_{\delta t/2} \circ D_{\delta t} \circ R_{\delta t/2}$ et $D_{\delta t/2} \circ R_{\delta t} \circ D_{\delta t/2}$ (formules de Strang).

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \ (\text{où} : U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

1. $D_{\delta t} \circ R_{\delta t}$ et $R_{\delta t} \circ D_{\delta t}$ (formules de Lie),
2. $R_{\delta t/2} \circ D_{\delta t} \circ R_{\delta t/2}$ et $D_{\delta t/2} \circ R_{\delta t} \circ D_{\delta t/2}$ (formules de Strang).

Méthodes de directions alternées

À partir de :

$$D_{\delta t} : \ \frac{\partial u_i}{\partial t} - \varepsilon_i \, \Delta u_i = 0, \ i = 1...n,$$

$$R_{\delta t} : \ \frac{\partial U}{\partial t} = F(U) \text{ (où : } U = (u_1, ...u_n)^t),$$

on peut définir les schémas :

1. $D_{\delta t} \circ R_{\delta t}$ et $R_{\delta t} \circ D_{\delta t}$ (formules de Lie),
2. $R_{\delta t/2} \circ D_{\delta t} \circ R_{\delta t/2}$ et $D_{\delta t/2} \circ R_{\delta t} \circ D_{\delta t/2}$ (formules de Strang).