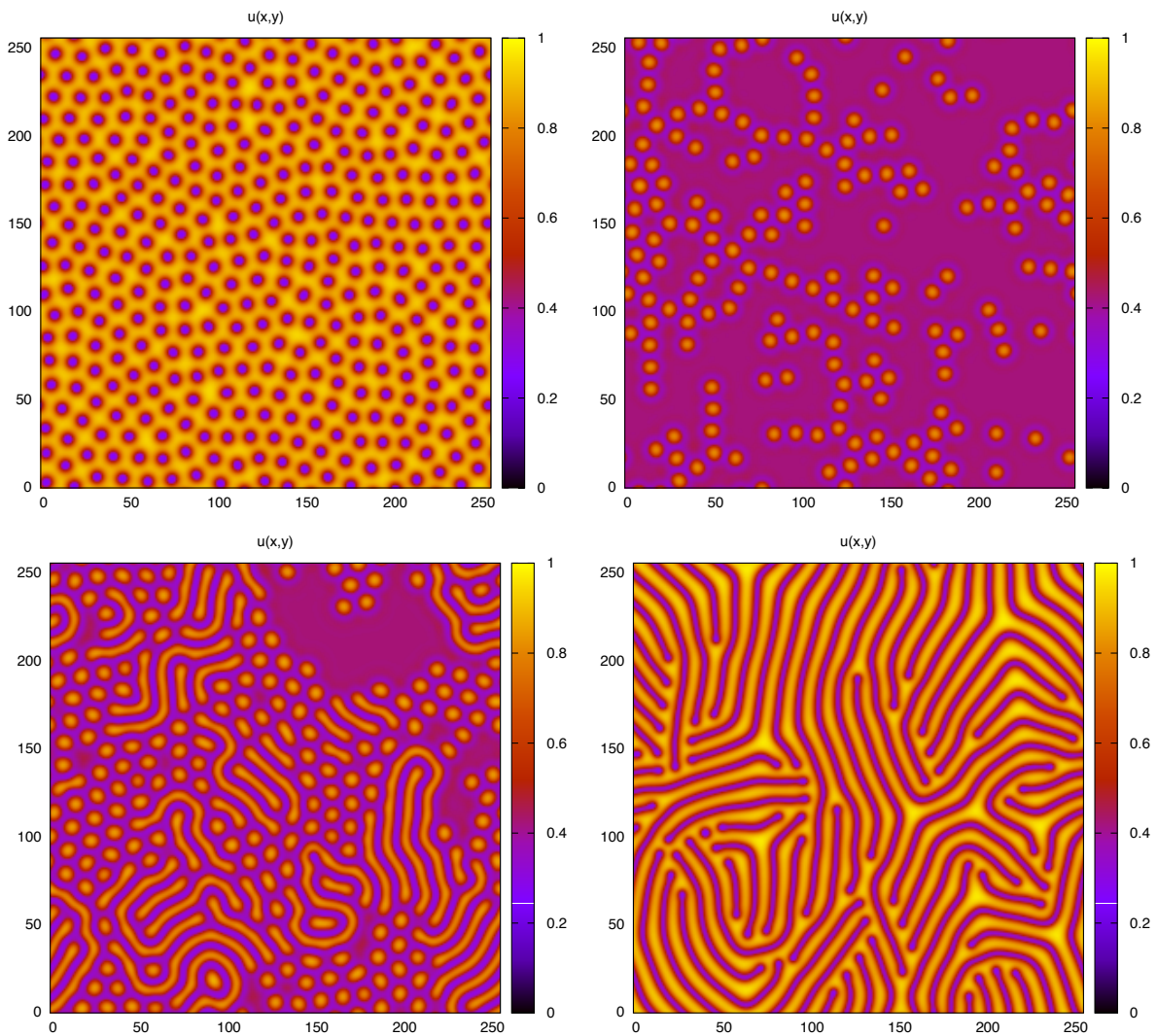


Morphogénèse de Turing

Le but de ce projet est d'étudier certains aspects de la morphogénèse, c'est à dire de la formation des motifs et des structures dans la nature. Les premiers modèles remontent au milieu du siècle dernier, avec l'article fondateur *The Chemical Basis of Morphogenesis* d'Alan Turing (1952). Bien que les formes observées résultent d'une physique très complexe au niveau cellulaire, on arrive à les reproduire avec des équations très simples. Ces équations sont des équations aux dérivées partielles non-linéaires qu'il faudra résoudre numériquement.



1 Les équations

Dans ce projet, on s'intéresse aux motifs de couleur présents sur la peau de nombreux animaux et la surface de nombreux végétaux. Ces couleurs sont dues à la présence de pigments dont la concentration locale dépend d'interactions et d'échanges multiples.

L'évolution de la concentration en pigment est modélisée par des équations de *réaction-diffusion*. Celles-ci mettent en jeu deux espèces chimiques distinctes : le pigment lui-même U aussi appelé *activateur* car il est responsable de la formation des motifs de couleur, et une autre espèce appelée *inhibiteur* V . On notera $u(t, x, y)$ et $v(t, x, y)$ leurs concentrations respectives à tout instant t et en tout point (x, y) d'une surface 2D. Le nom de ces équations illustre les deux aspects qui sont en compétition à tout instant et en chaque point de l'espace :

- **Diffusion** : Les deux espèces diffusent à travers l'espace. Si une forte concentration d'une espèce chimique est localisée en un endroit, elle tend à diminuer et à s'étendre dans une zone plus grande. La variation temporelle de la concentration $c = u$ ou $c = v$ due à la diffusion dépend d'un coefficient de diffusion D est décrite par l'équation de diffusion : $\partial_t c = D \nabla^2 c$ (où $\nabla^2 = \partial_{x^2}^2 + \partial_{y^2}^2$ est l'opérateur Laplacien). Des comportements particulièrement intéressants sont observés lorsque les deux espèces ne diffusent pas à la même vitesse.
- **Réaction** : Les deux espèces interagissent ensemble par réaction chimique. Dans cette réaction, l'inhibiteur tend à faire disparaître l'activateur (d'où son nom). L'évolution des concentrations respectives dépend de la réaction exacte. Dans la suite, nous considérerons la réaction suivante : $U + 2V \rightarrow 3V$. La variation temporelle des concentrations d'activateur et d'inhibiteur sont alors : $\partial_t u = -\alpha uv^2$ et $\partial_t v = +\alpha uv^2$ respectivement (où α est la constante de réaction).

Si le système n'est soumis qu'à ces deux effets, alors tout l'activateur est rapidement détruit et converti en inhibiteur, et rien d'intéressant n'est observé. La nature est un peu plus complexe et les cellules subissent également des échanges avec le milieu extra-cellulaire (en dehors du plan $x - y$).

- Le milieu extra-cellulaire est caractérisé par une concentration constante en pigment u_0 . L'activateur peut alors filtrer à travers la membrane dans un sens ou dans l'autre selon les valeurs respectives des concentrations dans et en dehors de la cellule. L'évolution de sa concentration dans la cellule est alors caractérisée par $\partial_t u = \beta(u_0 - u)$ où β est un coefficient de perméabilité de la membrane.
- L'inhibiteur lui n'est pas présent du tout dans le milieu extra-cellulaire et ne fait que s'échapper à un rythme : $\partial_t v = -\gamma v$ qui dépend d'un coefficient de perte γ .

En re-normalisant un peu les quantités et en re-définissant un peu les constantes, on peut finalement modéliser l'évolution de ce système par les deux équations aux dérivées partielles suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \nabla^2 u - uv^2 + f(1 - u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_v \nabla^2 v + uv^2 - (k + f)v \end{aligned}$$

Ce système correspond à l'**équation de Gray-Scott**. Il est paramétré par deux coefficients f et k , et son évolution dépend **très précisément** de leur valeur.

2 Travail préliminaire

Avant de se lancer dans la résolution numérique de cette équation, il convient de faire quelques travaux préliminaires...

- Justifier l'expression de la variation de concentration due à la réaction chimique. Que se passerait-il si la réaction était : $U + 3V \rightarrow 4V$?
- Expliciter les normalisations nécessaires à obtenir l'équation de Gray-Scott.
- Chercher les solutions stationnaires et uniformes de l'équation de Gray-Scott. Montrer qu'il en existe 1 seule ou bien 3 distinctes selon les valeurs des paramètres k et f . Tracer la courbe qui délimite les régions de l'espace (k, f) avec 1 ou 3 solutions. Cette courbe est très importante pour la suite, car les comportements les plus intéressants sont proches de cette courbe.
- Rechercher différents schémas numériques permettant de calculer le Laplacien en 2D.

3 Travail numérique

Il est maintenant possible de passer à résolution numérique de cette équation.

- Écrire un programme qui produit les conditions initiales suivantes : $u(x, y) = 1$, $v(x, y) = 0$ et qui les stocke dans un fichier. On prendra pour commencer une boîte de largeur $L = 1$ et une grille de $n = 128$ points dans chaque direction. Chaque fichier devra donc contenir 128 lignes et 128 colonnes.
- Avec Gnuplot, visualiser ces résultats en utilisant une palette de couleur (en utilisant par exemple `plot "fichier.dat" matrix with image`).
- Écrire un programme qui résout l'équation de Gray-Scott avec les contraintes suivantes :
 - Méthode de Euler en temps
 - Un pas de temps dt qui vérifie la condition CFL pour l'équation de diffusion : $dt < dx^2/D$
 - Conditions aux bords périodiques
 - On prendra $D_u = 2 \times 10^{-5}$ et $D_v = 10^{-5}$ pour que activateur et inhibiteur ne diffusent pas à la même vitesse.
- En les prenant comme condition initiale, tester la stabilité de l'unique solution dans la région où il n'en existe qu'une (par ex pour $f = 0.01$, $k = 0.06$) et des trois solutions dans la région où il en existe 3 (par ex pour $f = 0.04$, $k = 0.04$).

Dans la suite, on utilisera la solution $u = 1$, $v = 0$ comme concentrations de fond initiales. Pour observer des effets, il faut supposer qu'une perturbation initiale **suffisamment importante** modifie localement cette solution.

- Changer l'état d'un point de la condition initiale en le mettant à $u = 0$, $v = 1$, et observer l'évolution (par exemple pour $k = 0.06$, $f = 0.03$). Tester l'effets des différents schémas pour la calcul du Laplacien. Interpréter.
- Modifier le programme pour y ajouter des zones carrées (ou circulaires) placées de manière aléatoire, de taille fixe (ou aléatoire) $\Delta \approx 0.2$, et dans lesquelles on perturbe les concentrations avec des valeurs fixes (ou aléatoires) : $u \approx 0.5$, $v \approx 0.25$.
- Afficher ces conditions initiales avec Gnuplot.

4 Analyse

Les solutions trouvées dépendent très fortement des valeurs des paramètres f et k .

- Observer l'évolution des solutions pour différentes valeurs de ces paramètres. On se limitera à la zone définie par $0.01 < f < 0.08$ et $0.03 < k < 0.07$, en portant une attention particulière aux valeurs proches de la séparation entre la zone avec une unique solution stationnaire et uniforme, et la région où il en existe 3. Dans certains cas, il pourra être plus efficace de prendre des perturbations plus fortes ($u \approx 0$, $v \approx 1$). Pour vous guider, n'hésitez pas à consulter les différentes références données en fin de sujet..
- Vérifier la robustesse des résultats en changeant la taille de la boîte et le nombre de points.
- Si le temps le permet, on pourra faire des animations pour quelques solutions intéressantes (avec Gnuplot).

5 Références

- Complex patterns in a simple system, John E. Pearson, Science, New Series, Vol. 261, No. 5118. (Jul. 9, 1993), pp. 189-192.
- <http://www.mcs.sdsmt.edu/jmcgough/research/docs/rdb.pdf>
- <http://mrob.com/pub/comp/xmorphia/#ready>
- <http://mrob.com/sci/talks/v-1213.0117.pdf>
- <http://mrob.com/sci/papers/munafo2010-0601.pdf>
- <http://groups.csail.mit.edu/mac/projects/amorphous/GrayScott/>
- <http://www.aliensaint.com/uo/java/rd/>

- Il existe aussi de nombreux applets que vous pouvez faire tourner en ligne par ex :
[https ://media4.obspm.fr/public/M2R/applettes/Turing/AutomateTuring.html](https://media4.obspm.fr/public/M2R/applettes/Turing/AutomateTuring.html).