

Fronts de réaction-diffusion et défauts localisés

Benoît Sarels

▶ **To cite this version:**

Benoît Sarels. Fronts de réaction-diffusion et défauts localisés. Mathématiques générales [math.GM]. INSA de Rouen, 2012. Français. NNT : 2012ISAM0005 . tel-00824602

HAL Id: tel-00824602
https://theses.hal.science/tel-00824602

Submitted on 22 May 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

en vue de l'obtention du titre de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Mathématiques appliquées
Spécialité : Équations aux dérivées partielles

présentée par

Benoît Sarels

Sujet :

Fronts de réaction-diffusion et défauts localisés

Soutenue le 15 mai 2012

Composition du Jury :

Président	
Aziz Alaoui	Université du Havre
Rapporteurs	
Jacques Demongeot	Université Joseph Fourier et Institut Universitaire de France
Messoud Efendiyev	Helmholtz Zentrum München
Examinateurs	
Laurent Desvillettes	École Normale Supérieure de Cachan et Institut Universitaire de France
Mads Peter Sørensen	Technical University of Denmark
Directeur	
Jean-Guy Caputo	Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

THÈSE

en vue de l'obtention du titre de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Mathématiques appliquées
Spécialité : Équations aux dérivées partielles

présentée par

Benoît Sarels

Sujet :

Fronts de réaction-diffusion et défauts localisés

Soutenue le 15 mai 2012

Composition du Jury :

Président	
Aziz Alaoui	Université du Havre
Rapporteurs	
Jacques Demongeot	Université Joseph Fourier et Institut Universitaire de France
Messoud Efendiyev	Helmholtz Zentrum München
Examinateurs	
Laurent Desvillettes	École Normale Supérieure de Cachan et Institut Universitaire de France
Mads Peter Sørensen	Technical University of Denmark
Directeur	
Jean-Guy Caputo	Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Copyright © Benoît Sarels, 2012 - http://sarels.disque.math.cnrs.fr
Cette œuvre est publiée sous une licence Creative Commons «Attribution - Partage dans les Mêmes Conditions». Vous pouvez la reproduire, la diffuser et en tirer des œuvres dérivées, à condition de respecter les termes de la licence, consultable à l'adresse
http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/fr

Remerciements

Ce travail n'aurait pas été possible sans la gentillesse et le dévouement de mon directeur. Jean-Guy, ta disponibilité, ta culture scientifique et tes conseils auront été l'auxiliaire précieux de mes recherches. Je suis particulièrement content d'avoir pu utiliser à bon escient tout ton savoir-faire de physicien dans la démarche scientifique qui a été la mienne et dans l'élaboration des concepts développés dans ce mémoire. Les termes *adiabatique, relaxation* et d'autres en sont les fruits. Qui plus est, bon gré mal gré, tu m'as aidé au début à me retrousser les manches et à mettre les mains dans le cambouis. Les apprentissages de *AIX, Fortran, vi* resteront comme des moments forts de ces années.
Je remercie chaleureusement les personnes qui ont bien voulu donner de leur temps pour relire ce mémoire et les membres du jury qui ont accepté d'examiner ce travail.
Dear Messoud, thank you for your kindness. I remember how warmly you welcomed me in München and gave me the best possible pieces of advice.
Quant à toi Jacques, je suis particulièrement heureux et fier d'avoir pu compter sur ton soutien. Merci pour les riches discussions, la science biologique et médicale que tu partages et les anecdotes -scientifiques ou non- dont tu n'es pas avare !
Laurent, je suis touché par l'attention que tu as porté à ma thèse et honoré par ta présence dans mon jury.
Dear Mads, thank you so much for your support. I have this strong feeling about the moment we first met in Athens for my first international conference. You greeted me with warmness and modestly gave me advices for heterogeneities in the bistable case.
Aziz, merci pour ton regard de bio-mathématicien, ton dynamisme exemplaire et tes commentaires bienveillants sur mon travail.
Ce travail a eu lieu au sein d'un laboratoire dont j'ai grandement apprécié l'ambiance et la sympathie. Grâce doit en être rendue à ses directeurs successifs : Witold et Christian. Merci à Arnaud, Adel, Bernard, Carole, Rachida, Bruno et Brigitte.
Je tiens à remercier les personnes avec qui j'ai enseigné au cours de ces années : à l'INSA Jean-Marc et Cyril, à l'ÉNS Frédéric et Claudine ; ainsi que les nombreux étudiants passionnés que j'ai eu la chance d'avoir et qui m'ont souvent encouragé dans mes recherches. J'ai vu dans leurs yeux incrédules et amusés la raison de

faire ce métier.
Ont été de la partie tous les copains doctorants ou jeunes docteurs à l'INSA : Lamia, Nga, Florentina, Khaled, Mohamed, Mamadou, Manh ; à l'ÉNS : Claire, Adrien, Cyrille ; ailleurs : Juan, Mathieu, Muriel et le très fameux groupe du CIES Grand-Ouest : Jean-Baptiste (x2), Hadrien, Mathilde, Loïc, Caroline, Fanny, Carlo ; tous les copains qui ne connaissent pas ça et ne savent pas ce qu'ils ratent : Théo, Clément, Colin, Maxime, Arnaud, Tamba. Merci aussi à Réjane et Sammy.
Je remercie les personnes qui *ne* m'ont *pas* demandé des nouvelles de ma thèse à chaque fois qu'elles me croisaient dans la rue.
Last but not least, je remercie ma famille.

Introduction

Commençons par énoncer une tautologie : un phénomène naturel est dit de réaction-diffusion lorsqu'il combine réaction et diffusion ! La réaction peut être entendue dans son sens premier de réaction chimique : plusieurs espèces ou molécules (les *réactants*) se rencontrent et réagissent pour en créer de nouvelles (les *produits* de la réaction). Pour que cette rencontre ait lieu, il faut que les substances considérées se déplacent. Ce déplacement n'est pas intentionnel, il est le fruit de l'agitation thermique au niveau microscopique. La diffusion rend compte de cette tendance naturelle des espèces ou molécules à se déplacer dans le milieu ou l'espace considéré (l'image classique est celle d'une goutte d'encre dans un verre d'eau). Les modèles de réaction-diffusion rendent compte de la variation des concentrations au cours du temps.

De tels phénomènes abondent dans la nature, dépassant largement le cadre de la chimie. C'est ainsi que ces modèles s'appliquent à d'autres branches des sciences, en adaptant la ou les variables considérées. En théorie de la combustion, c'est la température ; en génétique, la prévalence d'un gène au sein d'une population ; en épidémiologie, le taux d'infection, *e*tc.

C'est au début du vingtième siècle qu'une théorie mathématique a vu le jour, proposant de modéliser ces phénomènes de réaction-diffusion. Ses grands contributeurs historiques sont Fisher, Kolmogorov, Petrovskii, Piscounov, Zeldovich, Frank-Kamenetsky dans un premier temps. Le premier a jeté les bases en génétique des populations. Le trio qui suit a travaillé de manière parallèle et semble-t-il indépendante sur un problème proche. Il faut citer aussi le travail de Rashevsky dans ce sens. Quant à Zeldovich et Frank-Kamenetsky, ils ont élaboré un modèle utilisé en théorie de la combustion.

Il y eut ensuite une intense activité dans ce domaine après la seconde guerre mondiale, avec Turing, Hodgkin, Huxley, FitzHugh, Nagumo, Kanel et d'autres. Alan Turing, l'un des pères de l'informatique, a étudié à la fin de sa vie l'apparition des formes lors du développement des embryons. Ce processus est l'un des trois aspects fondamentaux de la biologie du développement avec la croissance cellulaire et la différentiation cellulaire. Mentionnons que ce travail est parfois considéré comme fondateur également en théorie du chaos. Alan Lloyd Hodgkin et Andrew Huxley, en 1952, ont établi un modèle décrivant l'initiation et la propagation des potentiels d'action dans l'axone géant du calmar, ce qui leur vaudra le prix Nobel onze années plus tard. Ce modèle a initié la théorie

de l'électrophysiologie : les communications cardiaques ou neurales induites par des signaux électriques ou des rythmes neuraux. Richard FitzHugh et Jin-Ichi Nagumo en proposèrent une version simplifiée décrivant un système excitable.
En 1937, cette théorie naît d'une simple extension de l'équation de la chaleur. Elle devient vite une branche à part entière des équations aux dérivées partielles : la théorie des *équations de réaction-diffusion*.[1]
Si ces modèles se sont imposés, c'est qu'ils ont apporté nombre de succès dans la description de phénomènes naturels. Les solutions de ces équations ont un sens biologique ou physique (c'est heureux !) ; elles recouvrent en effet beaucoup de situations observées dans la nature : fronts (progressifs ou stationnaires), pics (progressifs ou stationnaires), motifs tels que bandes, spirales, cibles (motifs de Turing). La profonde unité de la nature (mêmes mécanismes fondamentaux à l'échelle moléculaire) fait ainsi florès aux échelles supérieures.

Dans cette nature dont nous prétendons parler, les milieux ne sont pas monotones. Il y a des aspérités, des paysages, un environnement qui les façonnent : dans le jargon scientifique, on dit que les milieux sont hétérogènes. Ce n'est qu'assez récemment que les mathématiciens se sont intéressés à l'influence de cette hétérogénéité sur les solutions évoquées plus haut. Il fallait d'abord défricher la situation en milieu homogène ! À notre connaissance, les premiers travaux datent de la fin des années 1990. On trouve une revue presque exhaustive de ces travaux dans [Xin00]. C'est dans ce contexte que cette thèse a vu le jour.
Avec Loïc Forest, j'avais travaillé sur des modèles en épidémiologie dans des situations «réelles». Il s'agissait précisément d'étudier l'influence de l'environnement ou des saisons sur des fronts. Dans l'exemple historique de la peste noire, la pandémie qui a touché l'Europe à partir de 1347 s'est propagée à partir des points d'entrée que constituent les ports (Marseille, Gênes...). Elle fut d'une mortalité exceptionnelle ; on estime en effet que de 30 à 50% de la population européenne disparut (vingt-cinq millions de victimes). Nous disposons de données précises concernant cette épidémie, consignées dans les registres paroissiaux [Gau+10]. Ils nous permettent aujourd'hui de retracer des «lignes de front» montrant l'avancée de la peste noire avec les années. D'un point de vue mathématique, il est tout à fait intéressant de faire la rétro-prédiction de cette épidémie. Dans ce contexte, c'est l'altitude qu'on propose comme influence principale (en première approximation) ; la virulence de la bactérie *Yersinia pestis* diminuant avec la température (l'optimum est à 28-30 degrés Celsius).
En écologie, dans les problèmes d'invasion de milieux par des espèces non-endémiques, on mesure l'avancée de ces populations pour retracer de même des lignes de front. De nombreux cas sont documentés, comme l'invasion de l'Europe centrale par les rats musqués au début du vingtième siècle, ou (plus proche de

1. Domaine 35K57 de la classification MSC2010.

nous dans l'espace et le temps) l'invasion de la France par la chenille processionnaire du pin. Parties de la Bourgogne, ces chenilles hautement urticantes ont atteint l'Île-de-France, causant de sérieux problèmes de santé publique.
Dans des conditions de laboratoire, lorsqu'on arrive à effacer la variabilité statistique naturelle, on observe des lignes de front quasi-circulaires (comme pour une bactérie en culture dans une boîte de Pétri). En revanche, dans des conditions réelles, ces lignes de front ont tendance à se déformer, parfois violemment. Cela se comprend aisément car la variabilité du climat (température, précipitations) ou simplement de l'altitude entraîne les populations vers les zones les plus favorables à leur survie ou leur épanouissement et les éloigne des zones moins favorables. La tendance naturelle est de suivre la «ligne de plus grande pente» (autrement dit, la loi du moindre effort !). C'est une première cause d'hétérogénéité influençant les fronts.
Nous soutenons qu'il est une autre cause possible d'hétérogénéité influençant les fronts, à savoir les obstacles à la fois naturels (montagnes, fleuves...) et artificiels (villes, routes...) que rencontrent les populations dans leurs déplacements. Puisque ces obstacles modifient fortement les paramètres du système (coefficients de diffusion, coefficients de réaction), nous avons proposé de les appeler «défauts». Il est donc nécessaire de regarder les échelles en jeu : d'un côté l'échelle du front, et de l'autre l'échelle du défaut. Les deux causes possibles d'hétérogénéité évoquées nous conduiront à deux études séparées (voir II.2.3).

Le but de cette thèse est donc d'étudier l'influence des milieux naturels sur les fronts progressifs. Nous dégageons la problématique suivante :

1. De quelle manière les fronts sont-ils affectés par l'environnement ?
2. Les fronts peuvent-ils se casser ? Ou au contraire se déforment-ils pour s'adapter à l'environnement sans se casser ? Y a-t-il une limite à la déformation ?
3. Les fronts peuvent-ils accélérer ou ralentir ? Y a-t-il une vitesse maximale, et surtout une vitesse minimale ; autrement dit un front peut-il s'arrêter ?
4. Y a-t-il une chance d'appréhender le profil des fronts en milieu hétérogène ? Si un certain profil est conservé, même approximativement, quels paramètres varient ?
5. Quel rôle joue la non-linéarité ? Faut-il attendre des différences qualitatives entre les différents types de termes de réaction ? Et si oui, peut-on quantifier ces différences ?

Beaucoup de questions que nous préciserons dans le manuscrit. Devant ce copieux programme, j'ai établi dès le départ la nécessité de faire intervenir le calcul numérique. Des simulations judicieuses, systématiques, variées, sont le point de départ d'un tel travail. Elles sont au mathématicien d'aujourd'hui les expériences

des biologistes, comme le bureau avec ordinateur est sa paillasse.[2] Lorsque les simulations montrent des régularités, des similarités, cela incite à proposer des hypothèses. C'est la base de la méthode scientifique ! Ces hypothèses sont ensuite vérifiées et soumises à l'analyse mathématique. Réciproquement, lorsque cette dernière avance un résultat, il est fondamental de le valider par des simulations. Ainsi le travail a-t-il comporté deux parties, l'une numérique, l'autre analytique.

Nous avons obtenu des réponses aux questions dressées plus haut ! Certaines sont approchées, certaines sont partielles ; néanmoins la voie est défrichée pour les personnes qui souhaiteront poursuivre ces recherches, car nous produisons un nouvel outil que nous espérons utile.
Nous soutenons la thèse suivante : *il existe une large gamme de situations où la propagation des fronts en milieu* hétérogène *peut être appréhendée en utilisant les fronts solutions des équations en milieu* homogène*.*
Précisément, la forme de ceux-ci est une excellente approximation de la forme de ceux-là, pour peu qu'on s'autorise translations et dilatations. C'est à dire qu'il suffit d'introduire deux paramètres pour avoir un modèle satisfaisant des situations rencontrées. Cette idée est nouvelle, et nous pensons modestement qu'elle peut s'avérer fructueuse dans d'autres situations que celles étudiées ici. Nous reviendrons sur ces perspectives en conclusion.

Le manuscrit est organisé comme suit : dans un premier chapitre I, nous rappelons les résultats historiques qui concernent les équations considérées en milieu homogène ; dans un deuxième chapitre II, nous abordons le cœur du sujet : modélisation, méthodes numériques, analyse en coordonnées collectives. C'est ici que l'on construit l'outil évoqué plus haut.
Au chapitre III, nous présentons les conséquences de ce travail dans le cas d'un terme de réaction bistable, et au chapitre IV, dans le cas d'un terme de réaction monostable. C'est là que les résultats parlants d'un point de vue biologique sont exposés : arrêt du front, éclosions secondaires (les termes seront définis).
Enfin, nous présentons au chapitre V deux extensions de nos résultats, et esquissons les suites qu'il est possible de donner à ce travail.

2. L'expression *in silico* désigne de telles simulations.

Sommaire

Introduction v

I Théorie des équations de réaction-diffusion 1

II Équations de réaction-diffusion dans des milieux hétérogènes 25

III Cas bistable 47

IV Cas monostable 75

V Généralisation : plusieurs dimensions, plusieurs composants 93

Conclusion 101

Chapitre I

Théorie des équations de réaction-diffusion

Abstract

In this introductive chapter, we make a summary of the known results in homogeneous situations. The cases we consider are those of a bistable reaction term, and a monostable one. Particular attention is devoted to explicit solutions, namely Huxley front and Ablowitz front.

Résumé

Nous rappelons dans ce chapitre les résultats connus en milieu homogène pour les équations de réaction-diffusion. Les cas traités sont ceux d'un terme de réaction bistable et d'un terme de réaction monostable. Une attention particulière est portée aux solutions explicites de ces équations, respectivement le front de Huxley et le front d'Ablowitz.

Sommaire

I.1 En compagnie de Fisher, Kolmogorov, Skellam... 3
I.2 Définitions 5
I.3 Aspect problème de Cauchy 7
I.4 Équation bistable 7
I.4.1 États stationnaires et stabilité 7
I.4.2 Solutions progressives 8
I.4.3 Analyse de stabilité 8
I.4.4 Front explicite 9
I.4.5 Équation non adimensionnée 12
I.5 Équation de Fisher–KPP 13

I.5.1 États stationnaires et stabilité 13
I.5.2 Solutions progressives 14
I.5.3 Analyse de stabilité 14
I.5.4 Existence d'un front progressif 15
I.5.5 Existence d'une infinité de fronts progressifs ; vitesse critique 18
I.5.6 Fronts particuliers 19
I.5.7 Équation non adimensionnée 22

I.1 En compagnie de Fisher, Kolmogorov, Skellam...

Nous commençons par donner un historique des équations de réaction-diffusion. Fisher, en 1937 [Fis37], étudie une population distribuée uniformément dans un habitat linéaire tel qu'une ligne côtière, et la façon dont une mutation avantageuse se répand parmi cette population. Avec l'élégance britannique qui le caractérise, Fisher établit en quelques lignes une équation restée célèbre.

> Let p be the frequency of the mutant gene, and q that of its parent allelomorph, which we shall suppose to be the only allelomorph present. Let m be the intensity of selection in favour of the mutant gene, supposed independent of p. Suppose that the rate of diffusion per generation across any boundary may be equated to $-k\frac{\partial p}{\partial x}$ at that boundary, x being the co-ordinate measuring position in the linear habitat. Then p must satisfy the differential equation
>
> $$\frac{\partial p}{\partial t} = k\,\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \ mpq\ ,$$
>
> where t stands for time in generations. The constant k is a coefficient of diffusion analogous to that used in physics. Its use should be appropriate in many cases.

Fisher précise explicitement que seuls deux allèles sont présents, ce qui lie p et q par la relation $p+q=1$.

La même année, par l'un de ces hasards que recèle l'histoire des sciences, Kolmogorov, Petrovskii et Piskunov publient un article intitulé *Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique* [KPP37]. Il commence ainsi :

> For the sake of simplicity we consider the two-dimensional diffusion equation $\frac{\partial v}{\partial t} = k\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right)$, $k > 0$, where x and y are the coordinates of a point in the plane, t is time and v is the density of substance at the point (x, y) at time t. We now assume that diffusion is accompanied by increase in the amount of substance at a rate which depends on the density at the given point and time. We then obtain the equation
>
> $$\frac{\partial v}{\partial t} = k\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) + F(v)$$

De manière synthétique, et néanmoins générale, nous écrirons dans la suite toute équation de réaction-diffusion en une dimension sous la forme :

$$\partial_t u = d\ \Delta u + s\ R(u)$$

où d dénote le coefficient de **d**iffusion également appelé diffusivité et s un coefficient que l'on peut nommer réactivité (pour des raisons liées à l'origine de ce

travail il est pour nous un coefficient de sélection). On peut par un changement d'échelle ($t' = t, x' = \frac{x}{\sqrt{d}}$) se ramener à

$$\partial_t u = \Delta u + s\ R(u) \tag{I.1}$$

Quand le milieu est hétérogène, l'équation devient

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u, x), \tag{I.2}$$

et c'est l'objet de cette thèse d'étudier semblable équation. Nous renvoyons le lecteur au début du chapitre II pour une présentation de la problématique.

Nous présentons maintenant les différents R classiques en expliquant leur origine physique ou biologique.

1. Le paradigme du terme de réaction est un terme de *croissance logistique* $R(u) = u(1 - \frac{u}{K})$. Le paramètre K est appelé capacité d'accueil, il représente la taille maximale de la population que peut supporter l'environnement. On peut supposer $K = 1$ quitte à adimensionner, et on définit ainsi le terme de réaction monostable :

   $$R_m(u) = u(1 - u), \tag{I.3}$$

   appelé ainsi en raison de la stabilité de ses zéros (voir I.5.1). Comme nous l'avons vu plus haut, il est dû à Fisher d'une part, Kolmogorov, Petrovskii et Piscounov d'autre part. Il est pour cette raison dénommé Fisher–KPP.

2. Un autre terme de réaction classique est un terme polynomial du troisième degré, introduit par FitzHugh et Nagumo comme partie d'un modèle plus compliqué.On le dit aussi bistable (on en verra la raison en I.4.1) et il s'écrit

   $$R_b(u) = u(1 - u)(u - a), \tag{I.4}$$

   où a est une constante positive comprise entre 0 et 1 strictement. D'un point de vue de dynamique des populations, il traduit l'existence d'un effet Allee (corrélation positive entre la densité d'une population et son taux de croissance) fort (existence d'une densité critique en dessous de laquelle la population décroît). Nous allons voir que ce terme de réaction plus compliqué conduit à une théorie en fait plus simple, ce qui motive de la présenter en premier dans notre exposé.

3. Le troisième terme de réaction que nous présentons modélise une *combustion*. On se donne une température seuil θ_0 (prise normalisée entre 0 et 1) telle qu'aucune réaction n'a lieu en-deçà du seuil (si on ne chauffe pas assez) : $R(u) = 0$ si $u < \theta_0$ et $R(u) > 0$ pour $\theta_0 < u < 1$. Ce terme a été introduit par Zeldovich et Frank-Kamenetskii [Zel92].

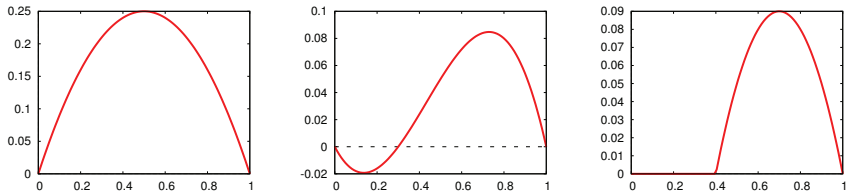


FIGURE I.1 – Termes de réaction.

Dans la suite de ce chapitre, nous allons

1. donner quelques définitions concernant les équations considérées,
2. présenter les résultats d'existence,
3. discuter plus précisément des solutions progressives (et stationnaires) et
4. discuter de l'existence de solutions explicites.



I.2 Définitions

Définition 1 (Onde progressive) : On appelle *onde progressive* une solution de (I.1) de la forme

$$u(x,t) = U(z),\ z = x - ct, \tag{I.5}$$

avec c une constante appelée *vitesse* de l'onde progressive.

Une façon d'étudier les ondes progressives est de se placer dans le *repère mobile*, repère qui se déplace à vitesse c par rapport au repère canonique dans l'espace (x,t). On écrit

$$u(x,t) = \tilde{u}(z,t),\ z = x - ct,$$

et $\tilde{u}$ vérifie alors l'équation

$$\partial_t \tilde{u} = \Delta_z \tilde{u} + c\ \partial_z \tilde{u} + s\ R(\tilde{u}). \tag{I.6}$$

À une solution progressive de (I.1) correspond donc une solution stationnaire de (I.6) :

$$\Delta_z \tilde{u} + c\ \partial_z \tilde{u} + s\ R(\tilde{u}) = 0,$$

et réciproquement.

Définition 2 (Front) : On appelle *front* une fonction monotone sur $\mathbb{R}$ admettant des limites finies en $\pm\infty$.

Nous verrons que les équations étudiées admettent des solutions de type front et onde progressive que nous appelons *front progressif*. Ces fronts connectent deux états d'équilibre de l'équation, c'est-à-dire deux zéros de R. Ainsi, pour un front décroissant, on a par exemple

$$\lim_{z\to-\infty} U(z) = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{z\to+\infty} U(z) = 0$$

dans le cas monostable, et

$$\lim_{z\to-\infty} U(z) = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{z\to+\infty} U(z) = 0$$

ou

$$\lim_{z\to-\infty} U(z) = 1 \quad \text{et} \quad \lim_{z\to+\infty} U(z) = a$$

ou

$$\lim_{z\to-\infty} U(z) = a \quad \text{et} \quad \lim_{z\to+\infty} U(z) = 0$$

dans le cas bistable. La plupart des fronts considérés dans cette thèse sont en fait *strictement* monotones, ce qui permet d'introduire la définition suivante :

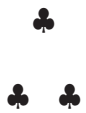
Définition 3 (Position) : Soit U un front strictement monotone de limites u_l en $-\infty$ et u_r en $+\infty$. On appelle *position* (ou *position centrale*) de U l'unique point z_0 vérifiant $U(z_0) = \frac{u_l+u_r}{2}$.

Un front strictement décroissant, reliant u_l à u_r et symétrique par rapport à sa position centrale possède une autre caractéristique qu'il est essentiel de mesurer : sa *raideur* (mesurée par $U'(z_0)$ si U est dérivable). Si $U'(z_0)$ est grand, le front est étroit (ou raide) ; si $U'(z_0)$ est petit, le front est large (il n'est pas raide). Une autre façon de voir cela est de considérer que U' n'est pas significatif au voisinage de $\pm\infty$, où U vaut u_l ou u_r.

La plupart des fronts considérés possèdent des symétries, précisément on a symétrie centrale par rapport à $(z_0, \frac{u_l+u_r}{2})$: $U(z_0 + z) = u_l + u_r - U(z_0 - z)$. On définit donc la largeur d'un tel front de la manière (arbitraire) suivante :

Définition 4 (Largeur) : Soit un seuil η compris entre 0 et $\frac{u_l-u_r}{2}$ strictement. On définit la *largeur* y (ou la *η-largeur* s'il est nécessaire de préciser) d'un front U (strictement décroissant, reliant u_l à u_r et symétrique par rapport à sa position centrale z_0) par l'une ou l'autre des relations (équivalentes) suivantes : $U(z_0 + y) = \frac{u_l+u_r}{2} - \eta$ ou $U(z_0 - y) = \frac{u_l+u_r}{2} + \eta$.

Nous avons donc un choix via ce paramètre η, choix que nous utiliserons !



I.3 Aspect problème de Cauchy

Nous rappelons un résultat préliminaire concernant le problème de Cauchy suivant :

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta u + s\ R(u) \\ u(\cdot, 0) = u_0 \end{cases} \tag{I.7}$$

Nous supposons que $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ est de classe $\mathcal{C}^1$ et que u_0 est continue. Alors on peut énoncer la proposition suivante :

Proposition 1 (Existence et unicité locale pour (I.7)) : Il existe une unique solution classique, maximale.

On peut se référer à [CH90] ou [QS07].



I.4 Équation bistable

Comme nous l'avons expliqué, nous considérons d'abord l'équation bistable à diffusivité et réactivité unitaires :

$$\partial_t u = \Delta u + u(1-u)(u-a) \tag{I.8}$$

où a est une constante positive que nous prenons comprise entre 0 et 1 strictement.

I.4.1 États stationnaires et stabilité

En régime stationnaire, la fonction u vérifie

$$\Delta u + u(1-u)(u-a) = 0.$$

Cela est en particulier le cas lorsque $u \equiv 0$, $u \equiv a$ ou $u \equiv 1$. Nous appelons ces états les états stationnaires de l'équation et voulons maintenant regarder leur stabilité. Écrivons pour cela $u = u^* + v$, où u^* est l'un des trois états stationnaires, et v une petite variation autour de cet état. En remplaçant dans l'équation, il vient

$$\partial_t v = \Delta v + R_b(u^* + v)$$

On en écrit un développement limité $R_b(u^* + v) = R_b(u^*) + R_b'(u^*)v + O(v^2)$ et on obtient donc

$$\partial_t v = \Delta v + R_b'(u^*)v + O(v^2)$$

En première approximation, on a $\partial_t v = \Delta v + R_b'(u^*)v$. Une famille de solutions de cette équation linéaire est donnée par $v_k(x,t) = \exp(ikx + \omega t)$ pour $k \in \mathbb{R}$, où

on doit avoir $\omega = -k^2 + R_b'(u^*)$ et donc $v_k(x,t) = \exp(ikx + (-k^2 + R_b'(u^*))t)$ pour $k \in \mathbb{R}$. La fonction v_k n'explose pas ssi $R_b'(u^*) < k^2$. Ainsi, l'état est stable si et seulement si $R_b'(u^*) < 0$. Or on a

$$R_b'(u) = -a + 2u(1+a) - 3u^2,$$

et donc $R_b'(0) = -a < 0$, $R_b'(a) = a(1-a) > 0$ et $R_b'(1) = a - 1 < 0$. Ainsi 0 et 1 sont stables et a est instable, ce qui est la raison pour laquelle ce terme R est appelé bistable.

I.4.2 Solutions progressives

Nous faisons l'hypothèse qu'une onde progressive existe et nous l'écrivons

$$u(x,t) = U(z),\ z = x - ct$$

où c est la vitesse de propagation. Cette hypothèse est fondamentale, et nous servira constamment dans la suite de l'exposé. En substituant u par U dans l'équation, nous obtenons que la fonction U vérifie

$$U'' + cU' + U(1-U)(U-a) = 0$$

Utilisant une technique classique, nous travaillons dans l'espace des phases en introduisant $V = U'$ et (U,V) est solution du système

$$\begin{cases} U' = V \\ V' = -cV - U(1-U)(U-a) \end{cases} \tag{I.9}$$

Les trajectoires dans l'espace des phases sont alors les solutions de

$$\frac{dV}{dU} = \frac{-cV - U(1-U)(U-a)}{V},$$

soit encore :

$$\frac{dV}{dU} = \frac{U(U-a)(U-1)}{V} - c.$$

On remarque le rôle joué par $(0,0)$, $(a,0)$ et $(1,0)$; ce sont les états stationnaires précédemment étudiés. Il faut procéder à une analyse de stabilité autour de chaque équilibre.

I.4.3 Analyse de stabilité

Le système différentiel (I.9) est de la forme

$$\begin{cases} U' = f_Z(U,V) \\ V' = g_Z(U,V) \end{cases}$$

La matrice jacobienne en un point (u_0, v_0) vaut

$$J_{(u_0,v_0)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_Z}{\partial U} & \frac{\partial f_Z}{\partial V} \\ \frac{\partial g_Z}{\partial U} & \frac{\partial g_Z}{\partial V} \end{pmatrix} (u_0, v_0)$$

et on considère donc la matrice jacobienne

$$J_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ a & -c \end{pmatrix}$$

pour le point $(0,0)$, la matrice jacobienne

$$J_{(a,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ a(a-1) & -c \end{pmatrix}$$

pour le point $(a,0)$ et la matrice jacobienne

$$J_{(1,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1-a & -c \end{pmatrix}$$

pour le point $(1,0)$. On obtient les valeurs propres λ et vecteurs propres e suivants :

$$(0,0): \quad \lambda = \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4a}\right) \quad \text{et} \quad e = \left(1, \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4a}\right)\right)$$

$$(a,0): \quad \lambda = \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4a(a-1)}\right) \quad \text{et} \quad e = \left(1, \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4a(a-1)}\right)\right)$$

$$(1,0): \quad \lambda = \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4(1-a)}\right) \quad \text{et} \quad e = \left(1, \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4(1-a)}\right)\right)$$

Rappelons que $0 < a < 1$. Les points $(0,0)$ et $(1,0)$ sont donc des points selles. Pour le point $(a,0)$, il est nécessaire de regarder de plus près : si $c^2 < 4a(1-a)$, alors $(a,0)$ est une spirale stable ; sinon c'est un nœud stable.

I.4.4 Front explicite

Nous voulons maintenant relier les points singuliers par des trajectoires physiquement réalistes. Nous suivons en cela la démarche de Huxley. Supposons donc l'existence d'une telle trajectoire, par exemple une trajectoire qui relie le point $(0,0)$ au point $(1,0)$. Nous formulons une seconde hypothèse :

$$V = C_0 U(U-1) \tag{I.10}$$

ce qui implique $\frac{dV}{dU} = C_0(2U-1)$.

Précédemment le calcul a donné $\frac{dV}{dU} = \frac{U(U-a)(U-1)}{V} - c$ et donc ici

$$\frac{dV}{dU} = \frac{U-a}{C_0} - c.$$

Nous voulons donc égaliser ces deux expressions :

$$C_0(2U-1) = \frac{U-a}{C_0} - c$$

Ce sont des expressions affines de U et donc nous égalisons les coefficients car U n'est pas constante, ce qui donne

$$\begin{cases} 2C_0 = 1/C_0 \\ -C_0 = -\dfrac{a}{C_0} - c \end{cases}$$

La première relation donne $C_0 = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ et la seconde donne ensuite $c = \pm\frac{1-2a}{\sqrt{2}}$. Nous choisissons une fois pour toutes la solution avec un $+$, qui nous permet d'avoir une vitesse positive (pourvu que $a < \frac{1}{2}$), ce qui est plus parlant d'un point de vue physique :

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{2}},\ c = \frac{1-2a}{\sqrt{2}}$$

Nous pouvons donc continuer le calcul puisque $U' = V$, on obtient

$$U' = \frac{U(U-1)}{\sqrt{2}}$$

que l'on peut intégrer par séparation des variables :

$$\frac{U'}{U-1} - \frac{U'}{U} = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

d'où :

$$\ln(U-1) - \ln U = \frac{z}{\sqrt{2}} + \ln(-C_1),$$

en notant de manière astucieuse $\ln(-C_1)$ la constante d'intégration ; puis

$$\frac{U-1}{U} = -C_1\ \exp(\frac{z}{\sqrt{2}})$$

soit finalement :

$$U(z) = \frac{1}{1 + C_1\ \exp(\frac{z}{\sqrt{2}})}$$

et cela s'exprime pour la fonction u initiale

$$u(x,t) = \frac{1}{1+\exp(\frac{x-ct}{\sqrt{2}})}$$

car nous prenons $C_1 = 1$ pour simplifier les définitions ci-dessous. Cela est remarquable pour trois choses.

– Premièrement, nous obtenons une forme explicite pour la solution qui est de plus une fonction physiquement réaliste, à savoir un front tel que défini plus haut. Nous le notons

$$\boxed{U(z) = \frac{1}{1+\exp(z)},}$$

en changeant de U par rapport à celui utilisé dans le calcul. Ce changement de définition est utile pour faire apparaître naturellement la largeur du front.
– Ce front est strictement décroissant, de limites 1 en $-\infty$, 0 en $+\infty$. Sa position centrale z_0 est 0 et il est symétrique par rapport à celle-ci. Nous définissons sa largeur en prenant $\eta = \frac{1}{2} - \frac{1}{1+e}$, ce qui fait que nous avons $y = 1$. Pour u ces définitions se transposent ainsi : x_0 la position centrale est ct et w la largeur est égale à $\sqrt{2}$. Ainsi, ce front possède la propriété fondamentale d'être entièrement défini dès lors qu'on connaît sa position centrale et sa largeur.
– Ce front vérifie la propriété

$$U' = U(1 - U),$$

propriété utile pour le calcul. De plus, sa dérivée est à décroissance rapide au voisinage de l'infini.
– Nous connaissons la vitesse de l'onde progressive et celle-ci est reliée au paramètre de l'équation :

$$\boxed{c = \frac{1-2a}{\sqrt{2}}.}$$

Celle-ci est positive si $a < \frac{1}{2}$, nulle si $a = \frac{1}{2}$ et négative si $a > \frac{1}{2}$. Cela est cohérent avec l'interprétation physique ou biologique du terme de réaction bistable.

En contrepartie, nous devons nous souvenir que ces résultats sont obtenus au prix des deux hypothèses (I.5) et (I.10).

Maintenant que la vitesse c de notre onde est reliée au paramètre a de l'équation bistable, on peut expliciter les conditions obtenues en I.4.3. Pour le point $(a, 0)$, la condition $c^2 < 4a(1-a)$ revient à $12a^2 - 12a + 1 < 0$, et donc tous calculs faits à $\frac{3-\sqrt{6}}{6} < a < \frac{3+\sqrt{6}}{6}$. On peut donc en tirer un bilan : si

$$0 < a \leq \frac{3-\sqrt{6}}{6} \approx 0,09 \quad \text{ou} \quad 0,91 \approx \frac{3+\sqrt{6}}{6} \leq a < 1,$$

alors $(a, 0)$ est un nœud entouré par les deux points selles $(0, 0)$ et $(1, 0)$. Si

$$0,09 \approx \frac{3-\sqrt{6}}{6} < a < \frac{3+\sqrt{6}}{6} \approx 0,91,$$

alors $(a, 0)$ est une spirale entourée par les deux points selles $(0, 0)$ et $(1, 0)$.

I.4.5 Équation non adimensionnée

Nous examinons ici le cas où la réactivité s constante est conservée dans l'équation :

$$\partial_t u = \Delta u + s\ u(1-u)(u-a). \tag{I.11}$$

Nous faisons le changement de variable

$$\begin{cases} t' = \alpha t, \\ x' = \beta x, \end{cases}$$

ce qui donne

$$\alpha \partial_{t'} u = \beta^2 \Delta_{x'} u + s\ u(1-u)(u-a).$$

Faisant l'hypothèse que s n'est pas nul, il vient

$$\frac{\alpha}{s}\partial_{t'} u = \frac{\beta^2}{s}\Delta_{x'} u + u(1-u)(u-a)$$

et donc, prenant $\alpha = s$ et $\beta = \sqrt{s}$, on se ramène à l'équation (I.8). Les résultats précédents s'appliquent donc, et notamment on a :

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \tilde{u}(x',t') \\ &= \frac{1}{1+\exp(\frac{x'-c't'}{\sqrt{2}})} \\ &= \frac{1}{1+\exp(\frac{x\sqrt{s}-c'ts}{\sqrt{2}})} \\ &= \frac{1}{1+\exp(\sqrt{\frac{s}{2}}(x-ct))} \end{aligned}$$

avec

$$c = \sqrt{s}\ c' = \sqrt{\frac{s}{2}}(1-2a),$$

et

$$w = \frac{w'}{\sqrt{s}} = \sqrt{\frac{2}{s}},$$

où les primes dénotent les «anciennes» quantités.

Nous pouvons également résoudre (I.11) sans changement de variable. En effet, le calcul effectué en sous-section I.4.4 se modifie comme suit (dès lors qu'on choisit $C_0 > 0$ ce qui est un choix non restrictif) :

$$\begin{aligned} C_0 &= \sqrt{\frac{s}{2}} \\ c &= \sqrt{\frac{s}{2}}(1-2a) \end{aligned} \tag{I.12}$$

Cela donne finalement

$$u(x,t) = \frac{1}{1+\exp\left(\sqrt{\frac{s}{2}}(x-ct)\right)}$$

Cette fois, la largeur du front est

$$w = \sqrt{\frac{2}{s}} \tag{I.13}$$

et la position centrale reste ct. On peut résumer cela de la manière suivante :

$$\begin{cases} U(z) = \dfrac{1}{1+\exp(z)} & z_0 = 0 \quad y = 1 \\ u(x,t) = \dfrac{1}{1+\exp\left(\sqrt{\frac{s}{2}}(x-ct)\right)} & x_0 = ct \quad w = \sqrt{\dfrac{2}{s}} \quad c = \sqrt{\dfrac{s}{2}}(1-2a) \end{cases}$$

Il y a lieu d'examiner les cas-limites :

- $s \ll 1$ correspond à un front large et lent,
- $s \gg 1$ à un front raide et rapide.

Il sera intéressant d'étudier les cas où s varie, ce qui est fait au chapitre III.



I.5 Équation de Fisher–KPP

Nous étudions dans cette section l'équation à diffusivité et réactivité unitaires :

$$\partial_t u = \Delta u + u(1-u). \tag{I.14}$$

I.5.1 États stationnaires et stabilité

En régime stationnaire, la fonction u vérifie

$$\Delta u + u(1-u) = 0.$$

Cela est en particulier le cas lorsque $u \equiv 0$ ou $u \equiv 1$. Nous appelons ces états les états stationnaires de l'équation et voulons maintenant regarder leur stabilité. Écrivons pour cela $u = u^* + \delta u$, où u^* est l'un des deux états stationnaires, et δu une petite variation autour de cet état. En remplaçant dans l'équation, il vient

$$\partial_t \delta u = \Delta \delta u + R_m(u^* + \delta u).$$

On en écrit un développement limité $R_m(u^* + \delta u) = R_m(u^*) + R'_m(u^*)\delta u + O(\delta u^2)$ et on obtient donc

$$\partial_t \delta u = \Delta \delta u + R'_m(u^*)\delta u + O(\delta u^2)$$

En première approximation, on a

$$\partial_t \delta u = \Delta \delta u + R'_m(u^*)\delta u,$$

et donc l'état est stable si et seulement si $R'_m(u^*) < 0$. Or on a

$$R'_m(u) = 1 - 2u,$$

et donc $R'_m(0) > 0$ et $R'_m(1) < 0$. Ainsi 0 est instable et 1 est stable, ce qui justifie d'appeler ce terme de réaction monostable.

I.5.2 Solutions progressives

Nous procédons de la même manière : si une onde progressive existe, elle peut s'écrire

$$u(x,t) = U(z),\ z = x - ct$$

où c est la vitesse de propagation. Cela est notre hypothèse fondamentale (I.5). En substituant u par U dans l'équation, nous obtenons que la fonction U vérifie l'équation différentielle ordinaire

$$U'' + cU' + U(1-U) = 0$$

Utilisant une technique classique, nous travaillons dans l'espace des phases (U, V) où V est simplement une notation pour U'. Alors on obtient le système différentiel suivant

$$\begin{cases} U' = V \\ V' = -cV - U(1-U) \end{cases} \tag{I.15}$$

Les trajectoires dans l'espace des phases sont alors les solutions de

$$\frac{dV}{dU} = \frac{-cV - U(1-U)}{V},$$

soit :

$$\frac{dV}{dU} = \frac{U(U-1)}{V} - c.$$

I.5.3 Analyse de stabilité

Le système différentiel (I.15) est de la forme

$$\begin{cases} U' = f_F(U,V) \\ V' = g_F(U,V) \end{cases}$$

La matrice jacobienne en un point (u_0, v_0) vaut

$$J_{(u_0,v_0)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_F}{\partial U} & \frac{\partial f_F}{\partial V} \\ \frac{\partial g_F}{\partial U} & \frac{\partial g_F}{\partial V} \end{pmatrix} (u_0, v_0)$$

soit

$$J_{(0,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -c \end{pmatrix}$$

pour le point $(0,0)$ et

$$J_{(1,0)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -c \end{pmatrix}$$

pour le point $(1,0)$. Elles possèdent respectivement les valeurs propres λ et vecteurs propres e suivants :

$$(0,0): \quad \lambda = \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2-4}\right) \quad \text{et} \quad e = \left(1, \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2-4}\right)\right)$$

$$(1,0): \quad \lambda = \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4}\right) \quad \text{et} \quad e = \left(1, \frac{1}{2}\left(-c \pm \sqrt{c^2+4}\right)\right)$$

Le point $(0,0)$ est donc un nœud stable si $c^2 \geq 4$ et une spirale stable si $c^2 < 4$. C'est donc toujours un nœud en raison des résultats à venir ! Le point $(1,0)$ est au contraire un point selle. Cela est à comparer aux résultats obtenus en I.5.1.

I.5.4 Existence d'un front progressif

Il y a plusieurs façons de démontrer l'existence d'un front progressif pour l'équation de Fisher–KPP. L'une utilise par exemple le plan de phase [AW78]. D'autres ont recours à des méthodes dérivées du principe du maximum, comme les méthodes monotones. Cette sous-section est ainsi basée sur des notes de Guillemette Chapuisat pour un cours donné à l'ENS de Cachan [Cha10]. Aussi utiles furent les notes d'Henri Berestycki [Ber09].

On donne sans démonstration la proposition suivante :

Proposition 2 (Existence de solution entre sur- et sous-solutions) : Soit $R : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ une fonction de classe $\mathcal{C}^1$ telle que $R' \in L^\infty$. Soient b, l_1, l_2, d_1 et $d_2 \in \mathbb{R}$. On considère l'équation différentielle

$$\begin{cases} u'' + bu' + R(u) = 0 \quad \text{sur }]l_1, l_2[, \\ u(l_1) = d_1, \quad u(l_2) = d_2. \end{cases} \tag{NL}$$

S'il existe une sous-solution $\underline{u} \in \mathcal{C}^2$ de (NL), c'est à dire que $\underline{u}$ vérifie

$$\begin{cases} \underline{u}'' + b\underline{u}' + R(\underline{u}) \geq 0 \quad \text{sur }]l_1, l_2[\\ \underline{u}(l_1) \leq d_1, \quad \underline{u}(l_2) \leq d_2, \end{cases}$$

et une sur-solution $\overline{u} \in \mathcal{C}^2$ de (NL), c'est à dire que $\overline{u}$ vérifie

$$\begin{cases} \overline{u}'' + b\overline{u}' + R(\overline{u}) \leq 0 \quad \text{sur }]l_1, l_2[\\ \overline{u}(l_1) \geq d_1, \quad \overline{u}(l_2) \geq d_2, \end{cases}$$

telles que $\underline{u} \leq \overline{u}$ sur $[l_1, l_2]$, alors (NL) admet au moins une solution u qui vérifie $\underline{u} \leq u \leq \overline{u}$.

Dans cette partie, on s'intéresse à l'existence de front progressif. Il s'agit de trouver un couple (U, c), avec $U : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ et $c \in \mathbb{R}$, solution de

$$\begin{cases} U'' + c\ U' + R(U) = 0 \\ U \xrightarrow{-\infty} 1, \quad U \xrightarrow{+\infty} 0. \end{cases} \tag{FP_c}$$

ce que l'on nomme parfois problème spectral.

La démonstration de ce résultat est constructive, et commence par résoudre le problème spectral sur un domaine borné.

Proposition 3 : Soient $a > 1$ et $c \in \mathbb{R}$ fixés. Le problème

$$\begin{cases} u'' + cu' + R(u) = 0 \quad \text{sur }]-a, a[\\ u(-a) = 1, \quad u(a) = 0 \\ 0 \leq u \leq 1 \end{cases} \tag{FP_a^c}$$

admet une unique solution de classe $\mathcal{C}^2$, notée u_a^c dans la suite. De plus,

1. $\frac{du_a^c}{dx} < 0$,
2. $c \mapsto u_a^c$ est continue et strictement décroissante de $\mathbb{R}$ dans $L^\infty([-a, a])$.

Lemme 4 : Soient u et v deux solutions de (FP_a^c). Soit $h \in [0, 2a]$. Pour $x \in I_h = [-a, a-h]$, on pose $v_h(x) = v(x+h)$.
Alors $v_h \leq u$ sur I_h.

Démonstration du lemme. Comme $u(-a) = 1$ et $v_{2a}(-a) = v(a) = 0$, on a bien $v_h \leq u$ sur $I_h = \{-a\}$. On peut donc définir

$$h_* = \inf\{h \geq 0 | \forall \bar{h} \in [h, 2a]\ v_{\bar{h}} \leq u\}.$$

Pour démontrer le lemme, il faut prouver que $h_* = 0$. Supposons par l'absurde que $h_* > 0$. Alors par définition de la borne inférieure et continuité de v, $v_{h_*} \leq v$. De plus, montrons qu'il existe $x_* \in]-a, a-h_*[$ tel que $v_{h_*}(x_*) = u(x_*)$.

On raisonne par l'absurde. Comme $v_{h_*}(-a) < 1 = u(-a)$ et $v_{h_*}(a - h_*) = 0 < u(a - h_*)$, on aurait $v_{h_*} < u$ sur I_{h_*}. Par compacité de I_{h_*}, il existerait $\delta > 0$ tel que $v_{h_*} + \delta \leq u$. Or v_{h_*} est uniformément continue grâce au théorème de Heine donc il existe $\varepsilon > 0$ tel que pour tout $|h| < \varepsilon$, $|v_h - v| < \delta$. Alors on aurait $v_{h_*-h} \leq u$ pour tout $|h| < \varepsilon$ ce qui contredit la minimalité de h_*.

On pose donc $w = u - v_{h_*}$. On a $w \geq 0$, $w(x_*) = 0$ et $w'' + cw' + g(x)w = 0$ où $g(x) = \frac{R(u(x)) - R(v_{h_*}(x))}{u(x) - v_{h_*}(x)} \in L^\infty$ car R est $\mathcal{C}^1$. Par application du principe du maximum fort, on a donc $w \equiv 0$. Cependant $w(-a) > 0$, ce qui ne se peut. Donc $h_* = 0$ et le lemme est démontré. □

Démonstration de la proposition 3. L'existence d'une solution est donnée par la proposition 2 car 0 est une sous-solution, 1 est une sur-solution et $0 \leq 1$.

De plus, si u est une solution de (FP_a^c) alors $0 < u < 1$ sur $]-a, a[$. En effet, u vérifie $u'' + cu' + \frac{R(u)}{u} u = 0$ et comme $u \in [0, 1]$, par hypothèse sur R,

la fonction $x \mapsto \frac{R(u(x))}{u(x)}$ est bornée. Le principe du maximum fort s'applique : s'il existe $x_0 \in]-a, a[$ tel que $u(x_0) = 0$ alors $u \equiv 0$ mais $u(a) = 1$ donc $u > 0$ sur $]-a, a[$. En faisant de même avec $1-u$, on a $u < 1$ sur $]-a, a[$.

L'unicité et la décroissance proviennent du lemme 4. En appliquant le lemme avec $h = 0$, on obtient bien l'unicité de la solution de (FP_a^c), puis en appliquant le lemme avec $u = v = u_a^c$ on obtient la décroissance de u_a^c donc $\frac{du_a^c}{dx} \leq 0$. Or $v = \frac{du_a^c}{dx}$ est solution de $v'' + cv' + R'(u_a^c)v = 0$ et on peut appliquer le principe du maximum fort pour en déduire $\frac{du_a^c}{dx} < 0$.

La continuité de $c \mapsto u_a^c$ peut se démontrer avec des résultats similaires au théorème de régularité et sera admise ici. Il reste à montrer la stricte décroissance de cette application.

Soit $c_1 < c_2$. On note ici $u_1 = u_a^{c_1}$ et $u_2 = u_a^{c_2}$. La fonction u_1 vérifie $u_1'' + c_2 u_1' + R(u_1) = (c_2 - c_1)u_1' \leq 0$ donc u_1 est sur-solution de $(FP_a^{c_2})$, 0 est une sous-solution et $0 \leq u_1$. Par proposition 2 d'existence de solution, il existe donc une solution u qui vérifie $0 \leq u \leq u_1$ et par unicité de la solution $u = u_2$. Donc $u_2 \leq u_1$. En appliquant ensuite le principe du maximum fort à $u_1 - u_2$, on obtient bien $u_2 < u_1$. □

Il reste maintenant à faire $a \to +\infty$ et à vérifier que u_a^c converge bien vers une solution de (FP_c). Toutefois, si c est choisi de façon quelconque, il y a de nombreuses chances que $u_a^c \to 0$ ou $u_a^c \to 1$, qui ne sont pas des fronts progressifs. Pour empêcher cela, il faut fixer la vitesse c de façon précise.

Proposition 5 : Soit $\delta \in]0, 1[$. Soit $\eta > 0$ tel que pour $s \in [0, \eta]$ $R(s) > (1-\delta)s$. Soit $\theta \in]0, \frac{\eta}{2}[$ fixé.

Pour tout $a \geq -\ln\theta$, il existe une unique vitesse $c_a \in]0, 2]$ telle que $u_a^{c_a}(0) = \theta$.

Démonstration. Par continuité et stricte décroissance de $c \mapsto u_a^c(0)$, il suffit de montrer que $u_a^0(0) > \theta$ et $u_a^c(0) < \theta$ si $c > 2$.

• Pour $c = 0$, on pose $h(x) = \eta\frac{a-x}{2a}$. Alors $h'' + R(h) = R(h) \geq (1-\delta)h \geq 0$ car $h(x) \in [0, \eta]$. De plus, $h(-a) = \eta \leq 1$ et $h(a) = 0$ donc $h \leq 1$ est une sous-solution de (FP_a^0) et par unicité de la solution, on a $h \leq u_a^0 \leq 1$. Donc en particulier, $u_a^0(0) \geq h(0) = \frac{\eta}{2} > \theta$ par hypothèse sur θ.

• Soit $c > 2$. Soit z la solution de

$$\begin{cases} z'' + cz' + z = 0 \quad \text{sur }]-a, a[, \\ z(-a) = 1, \quad z(a) = 0. \end{cases}$$

On peut calculer

$$z(x) = \frac{e^{r_+(x-a)} - e^{r_-(x-a)}}{e^{-r_+2a} - e^{-r_-2a}} \quad \text{où} \quad r_\pm = \frac{-c \pm \sqrt{c^2-4}}{2}.$$

Alors $z'' + cz' + R(z) = R(z) - z \leq 0$ dès lors que R est de type Fisher–KPP. Ainsi z est sur-solution, $z \geq 0$ et donc par unicité de la solution $u_a^c \leq z$. En particulier, $u_a^c(0) \leq z(0) = \frac{1}{e^{-r_+a} + e^{-r_-a}} \leq e^{-\frac{c}{2}a} < \theta$ par hypothèse sur θ. □

Quitte à extraire une sous-suite, on peut donc maintenant faire $a \to +\infty$ tout en contrôlant $u_a^{c_a}$.

Proposition 6 : Il existe une suite $a_n \to +\infty$ tel que c_{a_n} converge vers une constante $c_* \in [0,2]$ et $u_a^{c_{a_n}}$ converge dans $\mathcal{C}^2$ sur tout compact vers une fonction U solution de (FP_{c^*}). De plus $U' < 0$.

Démonstration. Comme c_a est borné, par compacité, on a l'existence de a_n et de c_* tel que $c_{a_n} \to c_*$. Puisque les c_{a_n} sont bornés, le théorème de régularité donne une borne sur $u_{a_n}^{c_{a_n}}$ dans $\mathcal{C}^{2,\alpha}$ pour un $\alpha \in]0,1[$ et par Ascoli, on a la convergence dans $\mathcal{C}^2$ de $u_{a_n}^{c_{a_n}}$ vers U. Il reste à vérifier que U est bien solution de (FP_{c^*}). Par passage à la limite des inégalités, on a $U'' + c_* U' + R(U) = 0$, $0 \leq U \leq 1$, $U(0) = \theta$ et $U' \leq 0$. Par principe du maximum fort appliqué à U puis à $1-U$, on obtient $0 < U < 1$ et par monotonie de U, $l_\pm = \lim_{\pm\infty} U(x)$ existent. De plus $l_- \geq \theta \geq l_+$.

Il reste à vérifier que $l_- = 0$ et $l_+ = 1$. Comme $U'' = -c_* U' - R(U)$ et $U' \leq 0$, on peut utiliser le théorème des accroissements finis pour prouver que nécessairement, $U' \to 0$ en $\pm\infty$ et $R(l_\pm) = 0$. Les seules solutions sont donc $l_- = 1$ et $l_+ = 0$. La fonction U est donc bien un front progressif.

Enfin, en appliquant le principe du maximum fort à $-U'$, on a bien $U' < 0$. □

Puisque cette solution U est strictement décroissante, elle reste strictement comprise entre 0 et 1. Elle constitue donc une solution intéressante d'un point de vue biologique.

Dans la sous-section suivante, on cherche tous les couples (U,c) solutions de (FP_c) vérifiant cette propriété.

I.5.5 Existence d'une infinité de fronts progressifs ; vitesse critique

Notre propos est de chercher des solutions réalistes d'un point de vue biologique ou physique, de telle sorte que l'on cherche à avoir $0 \leq U \leq 1$.

Proposition 7 : Pour $c < 2$, il n'existe pas de solution u de (FP_c) vérifiant $0 \leq u \leq 1$.

Démonstration. Soit $c < 2$. On suppose par l'absurde que u est une solution de (FP_c) avec $0 \leq u \leq 1$. Par principe du maximum fort, $0 < u < 1$.

Soit $\delta \in]0,1[$ tel que $c^2 - 4(1-\delta) < 0$. Comme $u \xrightarrow{+\infty} 0$, il existe $A \in \mathbb{R}$ tel que u vérifie

$$u'' + cu' + (1-\delta)u = (1-\delta)u - R(u) < 0 \quad \text{sur } [A, +\infty[.$$

Soit $\zeta = r + i\omega = \frac{c}{2} + i\frac{\sqrt{4(1-\delta)-c^2}}{2}$ une racine de $X^2 - cX + 1 - \delta$. Alors $\varphi(x) = e^{rx}\sin(\omega(x-A))$ vérifie

$$\begin{cases} \varphi'' - c\varphi' + (1-\delta)\varphi = 0 \quad \text{sur }]A, A+\frac{\pi}{\omega}[, \\ \varphi(A) = \varphi(A+\frac{\pi}{\omega}) = 0, \\ \varphi'(A) > 0, \quad \varphi'(A+\frac{\pi}{\omega}) < 0. \end{cases}$$

En intégrant deux fois par parties, on a donc

$$\underbrace{\int_A^{A+\frac{\pi}{\omega}} (u'' + cu' + (1-\delta)u)\varphi}_{<0} = \int_A^{A+\frac{\pi}{\omega}} u(\underbrace{\varphi'' - c\varphi' + (1-\delta)\varphi}_{=0}) + u(A)\varphi'(A) - u(A+\frac{\pi}{\omega})\varphi'(A+\frac{\pi}{\omega}) > 0$$

Ainsi on aboutit à une contradiction, et la proposition est démontrée. □

Corollaire 8 : On a donc $c_* = 2$.

Proposition 9 : Pour $c \geq c_*$, il existe un front progressif U solution de (FP_c).

Démonstration. Soit $c > c_*$. On notera u_* le front progressif associé à c_*. Pour $r \in \mathbb{R}$ et $a \geq 1$, on considère le problème suivant :

$$\begin{cases} u'' + cu' + R(u) = 0 \quad \text{sur }]-a, a[\\ u(-a) = u_*(-a+r), \quad u(a) = u_*(a+r). \end{cases}$$

Alors la translatée $u_*(.+r)$ est une sur-solution et 0 est une sous-solution avec $0 \leq u_*$. On a donc l'existence d'une solution u_a^r à ce problème. De même qu'à la proposition 3, on peut prouver que la solution est unique parmi les fonctions vérifiant $0 \leq u \leq u_*$, que $\frac{du_a^r}{dx} < 0$ et que $r \mapsto u_a^r$ est continue de $\mathbb{R}$ dans L^∞. Or pour $r \to -\infty$, $u_*(-a+r)$ et $u_*(a+r)$ tendent vers 1 donc u_a^r converge vers 1 et on peut montrer la convergence uniforme avec un théorème de Dini. De même, pour $r \to +\infty$, u_a^r converge vers 0 uniformément. On peut donc choisir r_a tel que $u_a^{r_a}(0) = \theta$. On procède ensuite de même qu'à la proposition 6 en extrayant une sous-suite (a_n) tel que $u_{a_n}^{r_{a_n}}$ converge vers une fonction U dans $\mathcal{C}^2$ et U est bien un front progressif de vitesse c. □

I.5.6 Fronts particuliers

Nous avons montré que les fronts progressifs ont une vitesse au moins égale à 2. Réciproquement, pour tout $c \geq 2$ donné, il existe un front se propageant à la vitesse c et solution de l'équation. La vitesse n'est donc pas fixée, ce qui constitue une différence notable par rapport au cas bistable. Ici, il y a un *continuum* de

vitesses admissibles $[2, +\infty[$, alors qu'il y a une *unique* vitesse de propagation dans le cas bistable.

L'évolution vers un front de vitesse $c \geq 2$ donnée est conditionnée par l'état à $t = 0$. Nous concentrons notre étude sur deux fronts particuliers. Pour chaque $c \geq 2$, il y a donc un unique front (à translation près) se propageant à vitesse c. Nous donnons ci-après des détails concernant deux de ces fronts, pour les vitesses 2 et $\frac{5}{\sqrt{6}}$. La justification en est bien différente.

- Pour la vitesse minimale, il est légitime de l'étudier, car le front se propageant à vitesse 2 est la limite naturelle d'un grand nombre de conditions initiales naturelles. Ainsi, toute condition initiale de dérivée à support compact, de type front, valant 1 au voisinage de $-\infty$ et 0 au voisinage de $+\infty$ évolue vers le front de vitesse minimale.
- Pour la vitesse $\frac{5}{\sqrt{6}}$, nous allons voir que les calculs sont explicites (comme dans le cas bistable). De plus, il y a justement une forte analogie de la solution avec celle du cas bistable. Enfin, $\frac{5}{\sqrt{6}} \approx 2,04$ qui est très proche de 2.

Front de vitesse minimale

Bizarrement, alors que le terme de réaction est plus simple que dans le cas bistable, nous ne sommes pas en mesure de mener un calcul comme nous l'avons fait en I.4.4 pour l'équation de FitzHugh-Nagumo. Nous n'avons donc pas de forme explicite pour le front de vitesse 2.

Front dit d'Ablowitz

Ce front a été obtenu par Ablowitz et Zeppetella [AZ79] de la façon suivante. Cherchons d'abord quel type de pôle une solution peut avoir. Si $U(z) \sim kz^{-\alpha}$, alors les termes en U'' et en U^2 doivent s'équilibrer. D'où

$$U'' \sim k\alpha(\alpha+1)z^{-\alpha-2} = k^2 z^{-2\alpha} \sim U^2.$$

Cela donne $\alpha = 2$ et $k = 6$ pour une solution non-triviale. On cherche donc U sous la forme

$$U(z) = \frac{6}{z^2} + \frac{a_{-1}}{a} + \sum_{i \in \mathbb{N}} a_i \, z^i$$

En substituant cette hypothèse dans l'équation, on trouve de proche en proche $a_{-1}, a_0, a_1, a_2, a_3$ comme fonctions de c. Un problème apparaît cependant lorsqu'on cherche a_4. L'équation est

$$0 \times a_4 + \frac{100}{40}\left(\frac{c}{5}\right)^2 - \frac{720}{8}\left(\frac{c}{5}\right)^6 = 0,$$

d'où $c = \frac{5}{\sqrt{6}}$. Pour cette vitesse, les valeurs propres de l'équation linéarisée au voisinage de $(0,0)$ sont $\lambda_1 = \frac{-2}{\sqrt{6}}$ et $\lambda_2 = \frac{-3}{\sqrt{6}}$, d'où l'expression de U :

$$U(z) = \sum_{n=2}^{+\infty} a_n \exp\left(\frac{nz}{\sqrt{6}}\right)$$

On trouve ensuite les a_n par récurrence, ce qui donne

$$U(z) = \frac{1}{\left(1 + C_1 \exp\left(\frac{z}{\sqrt{6}}\right)\right)^2}.$$

Cette solution explicite est la seule connue pour l'équation de Fisher–KPP.

Nous donnons ci-dessous un autre moyen de trouver cette solution explicite de l'équation de Fisher–KPP, à la condition de pouvoir justifier l'hypothèse

$$V = C_0 U(\sqrt{U} - 1), \tag{I.16}$$

on obtient

$$\frac{dV}{dU} = C_0\left(\frac{3}{2}\sqrt{U} - 1\right).$$

Précédemment le calcul a donné

$$\frac{dV}{dU} = \frac{U(U-1)}{V} - c,$$

et donc ici il vient

$$\frac{dV}{dU} = \frac{U-1}{C_0(\sqrt{U}-1)} - c.$$

Nous voulons donc égaliser ces deux expressions :

$$C_0\left(\frac{3}{2}\sqrt{U} - 1\right) = \frac{U-1}{C_0(\sqrt{U}-1)} - c,$$

soit encore

$$\frac{3C_0}{2}\sqrt{U} - C_0 = \frac{1}{C_0}(\sqrt{U}+1) - c.$$

Ce sont des expressions affines de $\sqrt{U}$ et donc nous égalisons les coefficients, ce qui donne

$$\begin{cases} \frac{3C_0}{2} = \frac{1}{C_0} \\ -C_0 = \frac{1}{C_0} - c \end{cases}$$

La première relation donne $C_0 = \pm\sqrt{\frac{2}{3}}$ et la seconde donne ensuite $c = \pm\frac{5}{\sqrt{6}}$. Nous choisissons les signes $+$ et continuons le calcul. Puisque $U' = V$, on obtient

$$U' = -\sqrt{\frac{2}{3}}U(1 - \sqrt{U})$$

que l'on peut intégrer en

$$U(z) = \frac{1}{\left(1 + C_1 \exp\left(\frac{z}{\sqrt{6}}\right)\right)^2}$$

et cela s'exprime pour la fonction u initiale

$$u(x,t) = \frac{1}{\left(1 + C_1 \exp\left(\frac{x-ct}{\sqrt{6}}\right)\right)^2}.$$

Pour la commodité des calculs ultérieurs et par analogie avec le cas bistable, nous aimerions définir la position (centrale) comme étant égale à ct pour u, soit 0 pour U. Pour cela, il est nécessaire d'utiliser la constante C_1. Si l'on ne s'en soucie pas - en la fixant à 1 par exemple - le carré situé au dénominateur fait que U vaut $\frac{1}{4}$ en 0 et nous ne pourrions pas définir 0 comme le centre du front. Ainsi, nous prenons $C_1 = \sqrt{2} - 1$, de telle sorte que

$$U(z) = \frac{1}{\left(1 + (\sqrt{2} - 1)\ \exp(z)\right)^2}$$

Le lecteur prendra garde au fait que nous avons changé de U par rapport à celui utilisé dans le calcul, changement qui va nous permettre de définir une largeur tout à fait naturelle. L'analogie avec le cas bistable est grande, et nous résumons les propriétés de ce front dans la liste suivante.

- Ce front est aussi strictement décroissant, de limites 1 en $-\infty$, 0 en $+\infty$; sa position centrale z_0 est 0 et il est symétrique par rapport à celle-ci. Nous définissons sa largeur en prenant $\eta = \frac{1}{2} - \frac{1}{(1+(\sqrt{2}-1)e)^2}$, ce qui fait que nous avons ici aussi $y = 1$ (on voit qu'il importe peu que la valeur de η soit compliquée, car c'est y qui a du sens).
- Pour u ces définitions se transposent ainsi : x_0 la position centrale est ct et w la largeur est égale à $\sqrt{6}$.
- Le front U a une dérivée à décroissance rapide au voisinage de l'infini.
- Ici encore, toute l'information sur le front est contenue dans la connaissance de sa position centrale et de sa largeur.

I.5.7 Équation non adimensionnée

Nous examinons ici le cas où la réactivité s constante est conservée dans l'équation :

$$\partial_t u = \Delta u + s\ u(1-u) \tag{I.17}$$

Cela va nous permettre d'obtenir de la même manière les dépendances en s des paramètres position et vitesse, en faisant le changement de variable

$$\begin{cases} t' = \alpha t, \\ x' = \beta x, \end{cases}$$

ce qui donne

$$\alpha\partial_{t'}u = \beta^2\Delta_{x'}u + s\ u(1-u).$$

Faisant l'hypothèse que s n'est pas nul, il vient

$$\frac{\alpha}{s}\partial_{t'}u = \frac{\beta^2}{s}\Delta_{x'}u + u(1-u)$$

et donc, prenant $\alpha = s$ et $\beta = \sqrt{s}$, on se ramène à l'équation (I.14). Les résultats précédents s'appliquent donc, et notamment on a :

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \tilde{u}(x',t') \\ &= \tilde{U}(x' - c't') \\ &= \tilde{U}\left(x\sqrt{s} - c'ts\right) \\ &= \tilde{U}\left(\sqrt{s}(x-ct)\right) \\ &= U(x-ct), \end{aligned}$$

avec

$$c = c'\ \sqrt{s},$$

où c' désigne l'«ancienne» vitesse, et c la «nouvelle». Pour la largeur, on a la formule

$$w = \frac{w'}{\sqrt{s}}.$$

Dans l'exemple du front d'Ablowitz, on trouve :

$$u(x,t) = \frac{1}{\left(1 + (\sqrt{2}-1)\ \exp\left(\sqrt{\frac{s}{6}}(x-ct)\right)\right)^2}$$

avec

$$c = 5\sqrt{\frac{s}{6}}. \tag{I.18}$$

La largeur du front est :

$$w = \sqrt{\frac{6}{s}}. \tag{I.19}$$

On peut résumer cela de la manière suivante :

$$\begin{cases} U(z) = \dfrac{1}{\left(1 + (\sqrt{2}-1)\ \exp(z)\right)^2} & z_0 = 0 \quad y = 1 \\ u(x,t) = \dfrac{1}{\left(1 + (\sqrt{2}-1)\ \exp\left(\sqrt{\frac{s}{6}}(x-ct)\right)\right)^2} & x_0 = ct \quad w = \sqrt{\dfrac{6}{s}} \quad c = 5\sqrt{\dfrac{s}{6}} \end{cases}$$

Les cas-limites sont similaires :

- $s \ll 1$ correspond à un front large et lent,
- $s \gg 1$ à un front raide et rapide.

Il sera intéressant d'étudier les cas où s varie, ce qui est fait au chapitre IV.

Chapitre II

Équations de réaction-diffusion dans des milieux hétérogènes

Abstract

We show in this chapter our model, and our numerical methods. Then we present the main result of this thesis, a convergence result of any solution to the generalized travelling wave. The analysis is based on balance laws, and gives the evolution of collective coordinates.

Résumé [1]

Dans ce chapitre, nous commençons par donner un aperçu des motivations qui nous incitent à étudier les milieux hétérogènes. Nous posons une problématique et justifions le besoin d'une modélisation idoine. Nous donnons un tel modèle, avant de commencer son étude, numérique et analytique. Dans un modèle standardisé, des lois d'équilibre simples fournissent l'évolution des coordonnées collectives.

Sommaire

II.1 Choix du modèle 27
II.2 Établissement du modèle 27
II.2.1 Défaut 29
II.2.2 Conditions initiales 31
II.2.3 Échelles en jeu 32

1. Certains résultats de ce chapitre et du suivant ont été publiés dans [CS11] : *Reaction-diffusion front crossing a local defect*, J.G. Caputo et B. Sarels, Phys. Rev. E 84, 041108

II.2.4 Programme : formules à généraliser, cas à considérer 32
II.3 Méthodes numériques 33
II.3.1 Résoudre une équation de réaction-diffusion en une dimension 33
II.3.2 Approcher le front 34
II.4 Standardisation du modèle : analyse en coordonnées collectives 36
II.4.1 Une première approche : estimation de la vitesse . 36
II.4.2 Raffinement : position et largeur du front 38
II.4.3 Première loi d'équilibre 40
II.4.4 Deuxième loi d'équilibre 41
II.4.5 Autres lois d'équilibre 42
II.4.6 Explicitation des équations 43
II.4.7 Généralisation à d'autres défauts 44

II.1 Choix du modèle

Pour répondre aux questions soulevées dans l'introduction, la première étape du travail est la modélisation du problème. Pour tenir compte de l'hétérogénéité de l'environnement, plusieurs possibilités de modélisation existent. Nous en présentons deux : les modèles compartimentaux et les modèles explicitement spatio-dépendants.

Dans un modèle compartimental, le domaine considéré est découpé en régions $\Omega_i,\ i = 1, \dots, N$ telles que $\cup_i \Omega_i$ forme une partition du domaine. Dans chaque région on se donne s_i et d_i des constantes, et on a

$$\partial_t u_i = d_i\ \Delta u_i + s_i\ R_i(u_i), \tag{II.1}$$

ainsi que des conditions aux bords. Ces dernières peuvent être variées, toutefois les modèles intéressants posent des conditions de continuité pour u ou sa dérivée spatiale. En une dimension, on a typiquement $\Omega_1 =]-\infty, x_1[, \Omega_i =]x_{i-1}, x_i[, \Omega_N =]x_{N-1}, +\infty[$ (avec (x_i) une suite de réels strictement croissante) et les conditions aux bords s'écrivent :

$$\begin{cases} u_i(x_i^-, t) = u_{i+1}(x_i^+, t) & \forall t \in \mathbb{R}_+ \quad \forall i \in I \\ \partial_x u_i(x_i^-, t) = \partial_x u_{i+1}(x_i^+, t) & \forall t \in \mathbb{R}_+ \quad \forall i \in J \end{cases}$$

avec (I, J) une partition de $\{1, \dots, N-1\}$. Ces équations se résolvent naturellement région par région, dans le sens de propagation.

Dans un modèle spatio-dépendant, on autorise les paramètres à être des fonctions :

$$\partial_t u = d(x)\ \Delta u + s(x)\ R(u, x). \tag{II.2}$$

Ainsi, ce type de modèle est-il plus fin que le modèle précédent en ce qui concerne les variations des paramètres. Il évite également de se poser les questions des conditions aux bords intérieurs. Le modèle spatio-dépendant est donc préféré dans la majorité des cas pratiques. L'utilisation d'un modèle compartimental est toujours justifiée par d'autres considérations [NSS97].



II.2 Établissement du modèle

Regardons d'abord le cas où le terme de réaction R dépend de l'espace. Dans l'exemple de Fisher–KPP, si l'on veut conserver l'allure de R, on peut imaginer une correction du type

$$R(u) = u(1 + \varepsilon(x) - u),$$

pour représenter un changement de la capacité d'accueil définie en I.1. Dans l'exemple de FitzHugh-Nagumo, si de la même manière on garde l'aspect de R, on essaie naturellement une non-linéarité du type

$$R(u) = u(1-u)(u-a(x)),$$

où l'on joue cette fois sur le zéro intermédiaire entre 0 et 1 [Ras+08].

Lorsque l'on fait porter l'hétérogénéité uniquement sur les paramètres de l'équation (II.2) (donc sans faire porter l'hétérogénéité sur les paramètres du modèle avant adimensionnement et changement d'échelle), on obtient l'équation

$$\partial_t u = d(x)\ \Delta u + s(x)\ R(u). \tag{II.3}$$

Cette équation assez symétrique est très naturelle. Remarquons ici que le changement d'échelle qu'on serait tenté d'introduire pour se débarrasser de l'un ou l'autre des coefficients échoue car alors un terme en $\partial_x u$ surgit :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}\left(\frac{dx'}{dx}\right)^2 + \frac{\partial u}{\partial x'}\left(\frac{d^2x'}{dx^2}\right)^2$$

L'équation de réaction-diffusion devient donc une équation de transport-réaction-diffusion. Il n'est pas de notre propos d'étudier semblable équation, cependant nous pensons que les résultats seraient similaires.

Le bilan de cette discussion est que nous nous restreindrons à faire varier d ou s, mais pas les deux. Nous faisons le choix de faire varier s, d'où l'équation :

$$\partial_t u = d\ \Delta u + s(x)\ R(u), \tag{II.4}$$

et enfin la constante d peut être enlevée (quitte à faire le changement d'échelle $(t' = t, x' = \frac{x}{\sqrt{d}})$) :

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u), \tag{II.5}$$

Nous réécrivons maintenant le problème en tenant compte des conditions initiales et des conditions aux limites du domaine. En une dimension d'espace, notre domaine sera de la forme $]-A, A[$, avec A éventuellement infini. Le cas où l'on considère $\mathbb{R}$ tout entier est le plus simple, écrivons-le donc en premier :

$$(P) : \begin{cases} \partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u) \\ u(x,0) = u_0(x) \quad \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \tag{II.6}$$

Dans le cas où A est fini, une question pertinente se pose qui est de savoir quelles conditions employer aux limites du domaine. Pour l'instant, nous ne répondons pas à cette question, et donc nous écrivons deux problèmes différents. Le premier utilise des conditions de Dirichlet, et s'écrit sous la forme :

$$(P)(C_D) : \begin{cases} \partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u) \\ u(x,0) = u_0(x) \quad \forall x \in [-A, A] \\ u(-A,t) = 1 \quad \forall t \in \mathbb{R}_+ \\ u(A,t) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}_+, \end{cases} \tag{II.7}$$

Le second utilise des conditions de Neumann, et s'écrit sous la forme :

$$(P)(C_N) : \begin{cases} \partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u) \\ u(x,0) = u_0(x) \quad \forall x \in [-A, A] \\ \partial_x u(-A,t) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}_+ \\ \partial_x u(A,t) = 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}_+. \end{cases} \tag{II.8}$$

Nous voyons donc qu'un choix sous-jacent a été fait dans le problème $(P)(C_D)$, à savoir celui de considérer uniquement des fronts décroissants, allant de 1 en $-\infty$ à 0 en $+\infty$. Pour la cohérence de ce problème, nous nous restreignons à des conditions initiales $u_0(x)$ valant 1 au voisinage de $-\infty$ et 0 au voisinage de $+\infty$, et continues. Ce choix n'est pas restrictif, car dans notre étude il y a une bijection évidente entre les fronts croissants (avec vitesse négative) et les fronts décroissants (avec vitesse positive), sous des hypothèses raisonnables sur la fonction s, hypothèses que nous expliciterons en II.2.1. En particulier, nous ne pourrons pas, avec les conditions aux limites données dans $(P)(C_D)$ étudier des conditions initiales de type «bosses». Ces conditions initiales sont à étudier dans le problème $(P)(C_N)$.

Affinement de la problématique :

5. S'agissant d'une étude de l'influence de l'environnement, faut-il restreindre la classe de fonctions s, u_0 ?
6. Quelles hypothèses sur s, u_0 sont naturelles ?

II.2.1 Défaut

La modélisation en $s(x)$ (ou en $d(x)$) est assez répandue [Xin00]. Le facteur $s(x)$ représente alors une inhomogénéité d'espace : certaines zones sont plus favorables à la réaction, d'autres moins. Nous l'appellerons dans la suite indifféremment obstacle, défaut ou inhomogénéité. Citons par souci d'exhaustivité les cas fréquemment rencontrés :

- les défauts aléatoires
- les défauts périodiques [BHR05a]

Nous proposons l'analyse d'un nouveau type de défauts peu considérés jusqu'à maintenant : les défauts localisés (c'est-à-dire constants en dehors d'un compact). En un certain sens, ce type de défaut est à l'opposé d'un défaut aléatoire ou périodique. Nous avons donc l'hypothèse fondamentale suivante, qui nous servira au cours de notre étude à maintes reprises :

$$\exists R > 0 \text{ tel que } |x| > R \Rightarrow s'(x) = 0. \tag{II.9}$$

Parfois cette hypothèse sera vraie sous une forme affaiblie, à savoir que s' sera à décroissance rapide au voisinage de l'infini :

$$\forall m \in \mathbb{N} \lim_{|x| \to \infty} x^m\ s'(x) = 0.$$

Si l'on résume les propriétés raisonnables requises par les fonctions $s(x)$, nous avons :

- la positivité. En effet, nous nous intéressons à des modèles réalistes d'un point de vue physique ou biologique. Toutefois, lorsqu'une généralisation est possible à des défauts quelconques (éventuellement négatifs), nous le préciserons.
- la continuité, au moins par morceaux, et éventuellement la dérivabilité, au moins par morceaux. Ainsi, s n'est vraiment pas aléatoire.
- le caractère localisé. Ainsi, s n'est pas périodique (sauf à être constante partout, ce qui est sans intérêt).

Profitant de l'aisance du calcul numérique, j'ai testé beaucoup de fonctions s lors de ce travail. Parmi celles-ci, retenons :

1. Des fonctions constantes par morceaux, à commencer par les plus simples

$$s(x) = \begin{cases} s_l & \text{si} \quad x < 0 \\ s_r & \text{si} \quad x > 0. \end{cases} \tag{II.10}$$

   Cela permet de différencier entre un environnement propice et un environnement hostile. On autorise l'une des constantes s_l ou s_r à prendre la valeur zéro pour représenter une zone «interdite», c'est-à-dire une zone où il n'y a pas de réaction, par exemple à cause de l'absence de carburant dans le cadre de la combustion. Un certain nombre de recherches sont menées avec de telles fonctions s, et le terme associé dans la littérature en langue anglaise est patch [ACK08]. Également notable est le cas des fonctions

$$s(x) = \begin{cases} s_0 & \text{si} \quad x < 0 \\ s_0 + s_1 & \text{si} \quad 0 \leq x \leq x_1 \\ s_0 & \text{si} \quad x > x_1. \end{cases} \tag{II.11}$$

2. Des fonctions affines ou affines par morceaux. Particulièrement, des fonctions du type

$$s(x) = \begin{cases} s_l & \text{si} \quad x < x_l \\ \dfrac{s_r - s_l}{x_r - x_l}(x - x_l) + s_l & \text{si} \quad x_l \leq x \leq r_r \\ s_r & \text{si} \quad x > x_r. \end{cases} \tag{II.12}$$

   De telles fonctions rendent compte de l'existence d'un gradient de sélection dans une direction. De telles hypothèses sont testées dans la littérature, comme pour le cas de la distribution de l'allèle $CCR5 - \Delta 32$ [NGS05].

3. Des fonctions modélisant des défauts symétriques. Autrement dit, des fonctions paires, constantes au voisinage de l'infini, croissantes puis décroissantes (par exemple). Typiquement des fonctions s qui s'écrivent

$$s(x) = s_0 + s_1 \exp\left(\frac{-x^2}{2d}\right) \tag{II.13}$$

Nous nous référerons dans la suite à ce type de fonction en parlant prosaïquement de défaut gaussien de largeur caractéristique d.

4. En complément du cas précédent, nous considérons aussi des défauts antisymétriques. Une façon simple de relier deux constantes différentes est donnée par le cas (II.12). Il peut être plus facile pour les calculs ultérieurs d'utiliser une fonction de classe C^∞, monotone, approchant un échelon. Il est possible de faire cela avec la fonction d'erreur de Gauss, ou avec des fractions rationelles d'exponentielles. Typiquement, nous considérons des fonctions s qui s'écrivent :

$$s(x) = s_l + \frac{s_r - s_l}{2}\left(1 + \tanh\frac{x}{d}\right) \tag{II.14}$$

Nous parlerons de défaut tangente hyperbolique, ou même de défaut antisymétrique, de largeur caractéristique d.

Une conséquence importante de notre hypothèse fondamentale est qu'il est possible de dégager une définition de *front incident*. Précisément, on a la

Proposition 10 : Soit un défaut localisé s vérifiant l'hypothèse fondamentale (II.9). Alors il existe $x_1 \in \mathbb{R}$ tel que, quelle que soit la condition initiale u_0 de type «front» à support dans $]-\infty, x_1]$,

1. il existe U de dérivée à décroissance rapide au voisinage de l'infini
2. il existe des temps $t_1 > 0$, et $t_2 > t_1$ tels que

$$\forall t \in [t_1, t_2], u(x,t) \approx U(x - ct)$$

Cette proposition permet de définir les notions naturelles suivantes :

Définition 5 : On appelle t_1 le temps d'établissement et t_2 le temps d'atteinte du défaut. On appelle U le profil du front incident, et si on est à un temps $t \in [t_1, t_2]$, on parle de u comme «du» front incident.

Cette dernière notion nous sera particulièrement utile.

II.2.2 Conditions initiales

Nous considérons des conditions initiales physiquement ou biologiquement réalistes. De la même manière qu'à la section précédente, nous énumérons les propriétés requises :

- la positivité.
- la continuité, au moins par morceaux.
- éventuellement la dérivabilité, au moins par morceaux.

Les conditions initiales étudiées ne seront pas nécessairement à support compact.

Enfin, nous classons nos conditions initiales en deux grandes catégories : les fonctions de type «bosse», et celles de type «front» (tel que défini en I.2). Les premières sont nulles en dehors d'un domaine fini, quand les secondes sont monotones sur $\mathbb{R}$, reliant 1 à 0. Les conditions initiales de type «bosses» évoluent très naturellement en paires de fronts (aussi appelés 2-fronts, ou domaines dans la littérature), et chaque front évolue de manière indépendante.

II.2.3 Échelles en jeu

Les dimensions qui ont de l'importance sont :

1. en espace :
   (a) la largeur w du front incident, de l'ordre de $\sqrt{\frac{1}{s_0}}$ ou $\sqrt{\frac{1}{s_l}}$, égale à $\sqrt{\frac{6}{s_0}}$ ou $\sqrt{\frac{6}{s_l}}$ pour le front d'Ablowitz dans le cas monostable, égale à $\sqrt{\frac{2}{s_0}}$ ou $\sqrt{\frac{2}{s_l}}$ dans le cas bistable, (qui sont les valeurs pour les équations homogènes, voir (I.19), (I.13))
   (b) la largeur caractéristique d de la variation du défaut telle que définie en II.2.1.

   Pour un front donné, le défaut est *large* ou *étroit*, selon la valeur du rapport de ces deux échelles : si $\frac{w}{d} \ll 1$ le défaut est large (on dira aussi que s est à variation lente), si $\frac{w}{d} \gg 1$, le défaut est étroit (on dira aussi que s est à variation rapide).
2. en réactivité :
   (a) s_0 ou s_l,
   (b) s_1 ou $|s_l - s_r|$.

   Selon le rapport de ces deux quantités, le défaut est *grand* (s est à variation forte) ou *petit* (s est à variation faible). Cela se fait naturellement en comparant la variation de s à l'une de ses valeurs en l'infini.
   (a) Pour les cas symétriques, à savoir (II.11), (II.13), on regarde $\frac{s_1}{s_0}$ que l'on compare à 1.
   (b) Pour les cas antisymétriques, à savoir (II.10), (II.12), (II.14), on regarde $\frac{|s_l - s_r|}{s_l}$ que l'on compare à 1.

II.2.4 Programme : formules à généraliser, cas à considérer

Dans le cas monostable, on étudiera plus précisément deux cas de figure. Premièrement, celui d'un front se propageant à la vitesse minimale :

$$c = 2\sqrt{s}\ ,\ w = \frac{1}{\sqrt{s}},$$

et ensuite, le cas du front d'Ablowitz :

$$c = 5\sqrt{\frac{s}{6}}\ ,\ w = \sqrt{\frac{6}{s}}.$$

Dans le cas bistable, il n'y a qu'un cas à étudier. Le calcul effectué en I.4.5 nous a donné :

$$c = \sqrt{\frac{s}{2}}(1 - 2a)\ ,\ w = \sqrt{\frac{2}{s}}.$$

On souhaite maintenant savoir si ces formules restent valables quand s varie. Si elles ne sont plus tout à fait exactes, restent-elles des bonnes approximations ?

Nous sommes naturellement amenés à distinguer (voir II.2.3) :

1. entre les variations lentes et les variations rapides de la fonction s
2. entre les variations faibles et les variations fortes.



II.3 Méthodes numériques

II.3.1 Résoudre une équation de réaction-diffusion en une dimension

Nous allons dans cette thèse soumettre l'équation (II.5) à une étude numérique, via précisément les problèmes (II.7) et (II.8). Nous donnons dans cette section les bases de la résolution numérique des équations considérées.

Quelque soit le problème (P) que nous souhaiterons résoudre, nous allons employer une méthode similaire pour transformer (P) en un problème numérique (P_N) approchant (P). Cette méthode s'appelle la méthode des lignes, et elle consiste à discrétiser en espace en utilisant des différences finies, et à laisser inchangée la partie temporelle. Vu que l'équation est donnée comme une loi d'équilibre, $\partial_t u = \partial_x(\partial_x u) + s(x)\ R(u)$, cette discrétisation est naturelle. De cette manière, nous transformons l'équation aux dérivées partielles en un système d'équations différentielles ordinaires. On aurait pu utiliser une différence finie en temps et la méthode aurait été implicite pour des raisons de stablité. On a préféré cette méthode de lignes plus facile à implémenter et où la précision de l'approximation en temps et la précision en espace peuvent être contrôlées facilement et indépendamment.

Les problèmes numériques munis de conditions de Dirichlet, ou de conditions de Neumann, sont respectivement :

$$(P_N)(C_D)\begin{cases} \dot{u}_1 = \dfrac{u_2 - 2u_1 + 1}{h^2} + s_1 R(u_1) \\ \dot{u}_k = \dfrac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{h^2} + s_k R(u_k) \quad \forall k \in \{2, \cdots, n-1\} \\ \dot{u}_n = \dfrac{-2u_n + u_{n-1}}{h^2} + s_n R(u_n) \end{cases} \tag{II.15}$$

$$(P_N)(C_N)\begin{cases} \dot{u}_1 = \dfrac{u_2 - u_1}{h^2} + s_1 R(u_1) \\ \dot{u}_k = \dfrac{u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}}{h^2} + s_k R(u_k) \quad \forall k \in \{2, \cdots, n-1\} \\ \dot{u}_n = \dfrac{-u_n + u_{n-1}}{h^2} + s_n R(u_n) \end{cases} \tag{II.16}$$

Les notations employées sont les suivantes :

$$u(x_k, .) = u_k$$

$$s(x_k) = s_k$$

où il faut comprendre que les u_k sont des fonctions du temps, et les s_k des constantes. Notons à cet instant de l'exposé qu'une autre dépendance de la fonction s pourrait avoir des conséquences sur le choix de la méthode numérique à utiliser. Nous avons justifié précédemment notre choix de considérer des fonctions s uniquement dépendantes de la variable x, ce qui valide l'étude à venir, mais nous tenons à mettre en garde le lecteur soucieux de généraliser cette méthode.

Comme solveur pour le système d'équations différentielles ordinaires $(P_N)(C_D)$ ou pour le système $(P_N)(C_N)$, nous utilisons une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4-5 à pas variable (permettant le contrôle de l'erreur). Cette méthode a été implémentée en $\mathrm{FORTRAN}\ 90/95$ par Hairer, Norsett et Wanner [HNW93].

II.3.2 Approcher le front

Quand le terme de réaction dépend de l'espace, les fronts sont modifiés. La vitesse et la largeur d'un front donné ne sont plus fixées, mais elles varient avec le temps. Puisqu'on observe un front qui se propage, il est équivalent de dire qu'elles varient avec l'espace. Nous chercherons donc à définir une vitesse instantanée de propagation et une largeur instantanée, ou ce qui est équivalent une vitesse et une largeur locales.

Quand le terme de réaction ne dépend pas de la variable spatiale x, la forme du front U est fixée. Dans le cas bistable, elle est même connue - c'est le front d'Huxley - et égale à :

$$U_1(z) = \frac{1}{1 + \exp(z)},$$

avec $z = \sqrt{\frac{s}{2}}(x - ct)$ et $c = \sqrt{\frac{s}{2}}(1 - 2a)$. Dans le cas monostable, la situation n'est pas aussi simple car la forme du front dépend de la condition initiale, comme nous l'avons vu en I.5. Elle n'est pas forcément connue sous une forme explicite. Elle est seulement connue pour le front d'Ablowitz :

$$U_2(z) = \frac{1}{(1 + (\sqrt{2} - 1)\ \exp(z))^2},$$

avec $z = \sqrt{\frac{s}{6}}(x - ct)$ et $c = 5\sqrt{\frac{s}{6}}$. En tout cas la forme du front est fixée avant d'aborder le défaut, puisque selon notre hypothèse fondamentale s' est à support compact, ou au moins à décroissance rapide au voisinage de l'infini. On voit ici qu'il est crucial que nous ayons défini une notion de front incident. La théorie développée ici s'applique donc pour n'importe quel front dans le cas monostable, quelle que soit sa vitesse. Nous verrons à la section IV.2 comment contourner la difficulté soulevée par la possible absence de forme explicite pour U.

Nous oublions la dépendance en t pour la clarté de cet exposé, et nous notons pour cette seule sous-section II.3.2 $u(x,t) = u(x)$. Anticipant sur les développements de II.4, nous affirmons qu'il est légitime, quand le terme de réaction dépend de la variable spatiale x, de chercher à approcher le front $u(x)$ par un front $U\left(\frac{x-x_0}{w}\right)$ à profil U fixé, égal au profil du cas homogène (éventuellement relatif à la condition initiale considérée). Il est approprié de faire cela pour chaque front donné, c'est-à-dire pour chaque instant t. La dépendance en temps est alors reportée sur x_0 et w qui deviennent des fonctions $x_0(t)$ et $w(t)$. Ces fonctions sont appelées *coordonnées collectives*. La démarche est donc la suivante : à chaque instant t, chercher à approcher la fonction $x \mapsto u(x)$ par la meilleure fonction $x \mapsto U\left(\frac{x-x_0}{w}\right)$ pour (x_0, w) parcourant un ensemble de paramètres. Pour approcher u par U, nous allons simplement utiliser la *méthode des moindres carrés*.

Nous définissons une *fonction erreur* par :

$$E(x_0, w) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(u(x_k) - U\left(\frac{x_k - x_0}{w}\right)\right)^2 \tag{II.17}$$

et nous cherchons le couple (x_0, w) qui minimise E (nous faisons cela à chaque instant t). Pour cela, nous cherchons à résoudre

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E}{\partial x_0} = 0 \\ \dfrac{\partial E}{\partial w} = 0 \end{cases}$$

c'est-à-dire :

$$\begin{cases} -\dfrac{2}{n}\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\left(u(x_k) - U\left(\frac{x_k - x_0}{w}\right)\right) U'\left(\frac{x_k - x_0}{w}\right)\frac{1}{w} = 0 \\ -\dfrac{2}{n}\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\left(u(x_k) - U\left(\frac{x_k - x_0}{w}\right)\right) U'\left(\frac{x_k - x_0}{w}\right)\frac{x_k - x_0}{w^2} = 0 \end{cases}$$

Nous utilisons une *méthode de gradient conjugué*, combinaison des méthodes de Fletcher et Reeves d'une part, Polak et Ribiere d'autre part. Cette méthode a été implémentée en FORTRAN 90/95 par Press, Teukolsky, Vetterling et Flannery [Pre+96]. Elle utilise les calculs de dérivée pour chacun des U, calculs

exacts dans ce cas :

$$U_1'(z) = -\frac{\exp(z)}{(1+\exp(z))^2}$$

et

$$U_2'(z) = -\frac{2\exp(z)(1+(\sqrt{2}-1)\ \exp(z))}{(1+(\sqrt{2}-1)\ \exp(z))^4}.$$

Pour que cette procédure soit efficace, il faut avoir de bons candidats pour commencer. Pour x_0, il suffit de prendre un point x_0^1 tel que la valeur $u(x_0^1)$ soit proche de $\frac{1}{2}$. Pour w, il suffit de constater qu'il existe des relations simples entre certains points particuliers du front. Ainsi, dans le cas bistable, on a $U(-1) = \frac{1}{1+e^{-1}} = \frac{e}{1+e}$ et $U(1) = \frac{1}{1+e}$, on peut donc prendre w^1 tel que la valeur de $u(x_0^1+w^1)$ soit proche de $\frac{1}{1+e}$. Dans le cas monostable, pour le front d'Ablowitz, on a $U(-1) = \frac{1}{(1+(\sqrt{2}-1)e^{-1})^2}$ et $U(1) = \frac{1}{(1+(\sqrt{2}-1)e)^2}$, on peut donc prendre w^1 tel que la valeur de $u(x_0^1+w^1)$ soit proche de $\frac{1}{(1+(\sqrt{2}-1)e)^2}$.



II.4 Standardisation du modèle : analyse en coordonnées collectives

En anticipant sur cette section, nous avons affirmé précédemment qu'il était légitime de chercher à approcher le front $u(x,t)$ par une fonction $U\left(\frac{x-x_0(t)}{w(t)}\right)$ dont le profil U est fixé et les coordonnées collectives x_0 et w variables. Nous avons passé sous silence les étapes conceptuelles qui amènent à cette conclusion, que nous présentons maintenant en guise d'introduction à nos résultats. Cette présentation nous amènera à définir des *paramètres instantanés* des fronts, ou des paramètres locaux, ce qui revient au même puisqu'il y a dualité entre le temps et l'espace pour un front progressif.

II.4.1 Une première approche : estimation de la vitesse

Il existe une méthode habile pour obtenir (je dirais même «récupérer») le paramètre c à partir de l'équation (II.5) :

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u).$$

En effet, supposons que la solution est fonction de la *variable réduite* $z = x - ct$ où la vitesse c est une fonction *lentement* variable du temps :

$$u(x,t) = U(x - c(t)t). \tag{II.18}$$

La vitesse classiquement constante du front progressif devient donc ici une vitesse *instantanée*. Dans cette première approche triviale, nous supposons que $\dot{c}(t)$ reste faible par rapport à tous les autres termes du calcul, si bien que les termes en facteur de $\dot{c}(t)$ sont négligés en première approximation.

Soyons un peu astucieux, et faisons la substitution de u par U seulement aux endroits adéquats (c'est-à-dire aux endroits où le calcul est faisable) ; il vient :

$$-c(t)U'(x-c(t)t) = U''(x-c(t)t) + s(x)\ R(u(x,t)).$$

Il suffit alors d'intégrer cette dernière équation par rapport à la variable d'espace, et il vient :

$$-c(t)\int_{-\infty}^{+\infty} U'(x-c(t)t)\,dx = \int_{-\infty}^{+\infty} U''(x-c(t)t)\,dx + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\,R(u(x,t))\,dx,$$

$$-c(t)\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\,dz = \int_{-\infty}^{+\infty} U''(z)\,dz + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\,R(u(x,t))\,dx,$$

par un simple changement de variable. Utilisant le fait que le front est plat loin du défaut, l'intégrale de U'' vaut 0 et on obtient en fait :

$$-c(t)\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\,dz = \int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\,R(u(x,t))\,dx$$

soit

$$c(t) = -\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\,R(u(x,t))\,dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\,dz}$$

Si l'on se place dans le cadre d'un front allant de 1 en $-\infty$ à 0 en $+\infty$, l'intégrale de U' vaut -1 et on a le résultat final :

$$c(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\,R(u(x,t))\,dx$$

Ce résultat montre que la vitesse varie lorsque le front atteint une zone où s varie. Par contre, les valeurs de s là où u est proche de 0 ou de 1 n'ont que peu (ou pas) d'influence. Si l'on ne néglige plus les termes en facteur de $\dot{c}(t)$, on obtient une équation vérifiée par $c(t)$ qui donne des renseignements plus précis [NX04] mais cela n'est pas encore tout à fait exact, car la largeur du front dépend également de s, comme on peut le voir en (I.13) ou (I.19).

Il faut donc procéder à une troisième définition de variable z : $z = \frac{x-x_0(t)}{w(t)}$. Sur le modèle des statisticiens, nous appelons cette variable la *variable standardisée*. On résume la démarche en rangeant par ordre d'approximation croissant les variables introduites :

$$\begin{cases} z = x - ct \\ z = x - c(t)t = x - x_0(t) \\ z = \dfrac{x - x_0(t)}{w(t)} \end{cases}$$

On parlera d'approximations d'ordre zéro, un et deux. Chacune de ces trois variables fournit un repère mobile. On peut interpréter cette conceptualisation de la manière suivante : dans le premier cas, le repère (z, t) se déplace à vitesse constante par rapport au repère (x, t) ; dans le deuxième cas, il se déplace à vitesse variable ; alors que dans le dernier cas, le repère se déplace à vitesse variable en se contractant et en se dilatant.

II.4.2 Raffinement : position et largeur du front

En accord avec la discussion précédente, nous faisons donc un *nouvel ansatz* : si une onde progressive existe, elle peut s'écrire

$$u(x, t) = U(z),\ z = \frac{x - x_0}{w} \tag{II.19}$$

où x_0 et w sont des fonctions du temps, représentant respectivement la position et la largeur du front. Avec deux paramètres (fonctions) au lieu d'un (fonction ou constante), cette hypothèse est la plus générale. Nous supposons que le front conserve sa forme initiale, mais que son centre x_0 et sa largeur w sont modifiées. A ce stade, nous ne spécifions pas la forme de $U(z)$. Cette méthode est souvent appellée *approche variationnelle* dans le contexte des équations aux dérivées partielles hamiltoniennes qui dérivent d'une densité lagrangienne [Sco03]. Ici, cependant, il n'y a pas de principe variationnel. Nous avons donc besoin de trouver deux équations régissant l'évolution de x_0 et w.

Dans d'autres contextes (mécanique des fluides), on utilise les propriétés physiques des systèmes (conservation de la masse, de la vitesse, de la quantité de mouvement ou encore conservation de l'énergie) pour en dériver des lois (appelées lois de conservation). Ici, de telles lois n'existent pas en général, car on ne connaît pas de quantité se conservant. On dispose par contre de *lois d'équilibre*. Il s'agit donc de proposer deux telles lois et d'en dériver des équations d'évolution pour x_0 et w.

La première est simplement l'équation aux dérivées partielles de départ (II.5) :

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ R(u)!$$

La deuxième provient de cette même équation multipliée par u, ce qui consiste en une *méthode d'énergie* :

$$u\ \partial_t u = u\ \Delta u + s(x)\ u\ R(u). \tag{II.20}$$

Les fonctions U, x_0 et w sont toutes trois des fonctions d'une variable réelle, toutefois dans un souci de clarté, nous notons avec un point les dérivées par rapport à t, et avec un prime les dérivées par rapport à z. Nous allons montrer dans les sections à venir que, pour un terme de réaction bistable, on a le résultat suivant :

Proposition 11 : Soit un défaut localisé s vérifiant l'hypothèse fondamentale (II.9). Alors il existe $x_1 \in \mathbb{R}$ tel que, quelle que soit la condition initiale u_0 de type «front» à support dans $]-\infty, x_1]$, il existe un profil U et des coordonnées collectives x_0 et w tels que

1. U est de dérivée à décroissance rapide au voisinage de l'infini
2. x_0 et w sont régies par le système d'équations

$$\left\{\begin{array}{r} \dot{x_0}\displaystyle\int_{\mathbb{R}} U'(z)\,dz + \dot{w}\int_{\mathbb{R}} z\,U'(z)\,dz + w\int_{\mathbb{R}} s(w\,z+x_0)\,R(U(z))\,dz = 0, \\ \dot{x_0}\displaystyle\int_{\mathbb{R}} U(z)\,U'(z)\,dz + \dot{w}\int_{\mathbb{R}} z\,U(z)\,U'(z)\,dz + w\int_{\mathbb{R}} s(w\,z+x_0)\,U(z)\,R(U(z))\,dz \\ = \dfrac{1}{w}\displaystyle\int_{\mathbb{R}} U'^2(z)\,dz, \end{array}\right. \tag{II.21}$$

3. la solution u de (II.6) vérifie

$$\forall t \in \mathbb{R},\ u(x,t) \approx U\left(\frac{x - x_0(t)}{w(t)}\right).$$

Nous montrerons également que ce résultat est vrai dans le cas d'un terme de réaction monostable, avec une restriction supplémentaire sur le défaut.

Définition 6 : Une telle solution de l'équation aux dérivées partielles est appelée *front progressif généralisé*.

Ce résultat appelle un certain nombre de remarques :

1. Il montre que l'évolution de x_0 et w est régie par un système de deux équations différentielles ordinaires du premier ordre.
2. Puisque U est de dérivée à décroissance rapide au voisinage de l'infini, ces équations sont bien définies car les intégrales qui y interviennent sont bien définies !
3. De plus, ces équations sont assez simples ; les intégrales considérées étant des *nombres*.
4. Surtout, ces équations sont très générales, car la forme de la non-linéarité R n'est pas spécifiée. On demande seulement à ce que R s'annule en 0 et en 1, ce qui n'est pas restrictif ! Nous pensons que ces équations peuvent être transposées à d'autres types de non-linéarités que ceux étudiés dans cette thèse (monostable et bistable).
5. En résumé, disons que la seule vraie hypothèse faite jusqu'ici est que le défaut s soit localisé.
6. Nous verrons dans les chapitres III et IV que ces équations fournissent de très bonnes approximations des solutions de l'équation aux dérivées partielles initiale.

II.4.3 Première loi d'équilibre

Utilisant (II.19), nous avons la formule de changement de variable suivante :

$$U(z) = u\left(w(0)z + x_0(0), 0\right) = u\left(w(t)z + x_0(t), t\right) \ \forall t > 0,$$

que nous noterons de manière abrégée :

$$U(z) = u\left(w\ z + x_0, t\right).$$

Calculons donc les dérivées partielles de u en fonction des dérivées de U :

$$\begin{aligned}
\partial_t u &= -\frac{1}{w}\left(\dot{x_0} + \frac{\dot{w}(x - x_0)}{w}\right) U'\left(\frac{x - x_0}{w}\right) \\
\partial_x u &= \frac{1}{w} U'\left(\frac{x - x_0}{w}\right) \\
\Delta u &= \frac{1}{w^2} U''\left(\frac{x - x_0}{w}\right).
\end{aligned}$$

La démarche pour obtenir les lois d'équilibre est générale, elle consiste à *intégrer* les équations considérées par rapport à la variable d'espace. Ici, pour (II.5), cela donne :

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \partial_t u \ dx} = [\partial_x u]_{x=-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x) R(u) \ dx.$$

Le terme $[\partial_x u]_{x=-\infty}^{+\infty}$ est nul, car le front est plat loin du défaut. Nous injectons les termes calculés plus haut :

$$\overbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{\dot{x_0}}{w} U'\left(\frac{x - x_0}{w}\right) \ dx - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\dot{w}(x - x_0)}{w^2} U'\left(\frac{x - x_0}{w}\right) \ dx} = \int_{-\infty}^{+\infty} s(x) R\left(U\left(\frac{x - x_0}{w}\right)\right) \ dx$$

Nous continuons le calcul en faisant le changement de variable $x = w\ z + x_0$, et cela donne :

$$-\dot{x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} U'(z) \ dz - \dot{w} \int_{-\infty}^{+\infty} z U'(z) \ dz = w \int_{-\infty}^{+\infty} s(w\ z + x_0) R(U(z)) \ dz$$

Soit :

$$\boxed{\dot{x_0} J_1 + \dot{w} J_2 + w J_3 = 0}$$

où

$$J_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} U'(z) \ dz \tag{II.22}$$

$$J_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} z\ U'(z) \ dz \tag{II.23}$$

$$J_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} s(w\ z + x_0)\ R(U(z)) \ dz \tag{II.24}$$

Si l'on suppose comme cela a été fait plus haut que le front va de 1 à 0, on a toujours

$$J_1 = [U(z)]_{-\infty}^{+\infty} = -1.$$

Ce calcul établit la première partie du résultat II.21.

II.4.4 Deuxième loi d'équilibre

Avant d'intégrer l'équation (II.5), nous la multiplions d'abord par u :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u\partial_t u \; dx = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} u\Delta u \; dx} + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x) u R(u) \; dx$$

Puis nous intégrons par parties :

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} u\partial_t u \; dx} = \overbrace{[u\partial_x u]_{x=-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} (\partial_x u)^2 \; dx} + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x) u R(u) \; dx$$

Le terme $[u\partial_x u]_{x=-\infty}^{+\infty}$ est nul pour la même raison que précédemment. Nous injectons les termes calculés plus haut et continuons le calcul en faisant le changement de variable $x = w\ z + x_0$:

$$\overbrace{-\dot{x_0} \int_{-\infty}^{+\infty} U(z)U'(z) \; dz - \dot{w} \int_{-\infty}^{+\infty} zU(z)U'(z) \; dz}$$
$$= -\frac{1}{w} \int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z) \; dz + w \int_{-\infty}^{+\infty} s(w\ z + x_0) U(z) R(U(z)) \; dz$$

Soit :

$$\boxed{\dot{x_0} J_4 + \dot{w} J_5 + w J_6 = \tfrac{1}{w} J_7}$$

où

$$J_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ U'(z) \; dz \tag{II.25}$$

$$J_5 = \int_{-\infty}^{+\infty} z\ U(z)\ U'(z) \; dz \tag{II.26}$$

$$J_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} s(w\ z + x_0)\ U(z)\ R(U(z)) \; dz \tag{II.27}$$

$$J_7 = \int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z) \; dz \tag{II.28}$$

Ici aussi, si l'on suppose comme cela a été fait plus haut que le front va de 1 à 0, on a une simplification :

$$J_4 = [U^2(z)]_{-\infty}^{+\infty} = -\frac{1}{2}.$$

Ce calcul établit la deuxième partie du résultat II.21.

II.4.5 Autres lois d'équilibre

Il semble dommage de s'arrêter en si bon chemin, et de se limiter à deux lois d'équilibre. En effet, on peut obtenir d'autres lois d'équilibre en complément des deux lois d'équilibre dérivées ci-dessus. En principe, nous pouvons aussi multiplier l'équation aux dérivées partielles de départ par $\partial_x u$, mais cela donnerait éventuellement une mauvaise évolution des coordonnées collectives, notamment si s est discontinue. Nous le vérifierons plus tard, mais nous pouvons dès maintenant mener les calculs :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \partial_x u \; \partial_t u \; dx = \left[\frac{(\partial_x u)^2}{2}\right]_{x=-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} s(x)\partial_x u R(u) \; dx$$

Une fois encore le terme $\left[\frac{(\partial_x u)^2}{2}\right]_{x=-\infty}^{+\infty}$ est nul car le front est plat loin du défaut. Nous injectons les termes calculés plus haut et continuons le calcul en faisant le changement de variable $x = w\, z + x_0$:

$$\frac{-\dot{x_0}}{w}\int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z)\, dz - \frac{\dot{w}}{w}\int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z) z\, dz = \int_{-\infty}^{+\infty} s(w\, z + x_0) U'(z) R(U(z))\, dz$$

Soit :

$$\boxed{\dot{x_0} J_7 + \dot{w} J_8 + w J_9 = 0} \tag{II.29}$$

où

$$J_8 = \int_{-\infty}^{+\infty} z\; U'^2(z)\; dz \tag{II.30}$$

$$J_9 = \int_{-\infty}^{+\infty} s(w(t)z + x_0(t))\; U'(z)\; R(U(z))\; dz \tag{II.31}$$

Nous pouvons faire un certain nombre de remarques :

1. Beaucoup d'autres lois peuvent être obtenues. Un premier groupe provient de la multiplication de l'équation aux dérivées partielles initiale par des dérivées successives de u : $\partial_{xx} u$... Un deuxième groupe provient de la multiplication de l'équation par des puissances successives de x : x, x^2...
2. Explicitons l'exemple d'une telle loi d'équilibre. En multipliant l'équation (II.5) par x, on obtient :

$$\begin{aligned} -\dot{x_0}\, w \int_{\mathbb{R}} z\, U'(z)\, dz - \dot{x_0}\, x_0 \int_{\mathbb{R}} U'(z)\, dz - \dot{w}\, w \int_{\mathbb{R}} z^2\, U'(z)\, dz - \dot{w} x_0 \int_{\mathbb{R}} z\, U'(z)\, dz \\ = \int_{\mathbb{R}} z\; U''(z)\; dz + \frac{x_0}{w}\int_{\mathbb{R}} U''(z)\; dz \\ + w^2 \int_{\mathbb{R}} z\; s(w\; z + x_0)\; R(U(z))\; dz + w\; x_0 \int_{\mathbb{R}} s(w\; z + x_0)\; R(U(z))\; dz \end{aligned}$$

Soit, tous calculs faits :

$$\begin{aligned}&\dot{x_0}\ x_0 + \frac{\pi^2}{3}\dot{w}\ w \\ &= 1+w^2 \int_{\mathbb{R}} z\ s(w\ z+x_0)\ R_b(U_1(z))\ dz + w\ x_0 \int_{\mathbb{R}} s(w\ z+x_0)\ R_b(U_1(z))\ dz\end{aligned}$$

dans le cas bistable, et

$$\begin{aligned}&-\dot{x_0}\ w + \dot{x_0}\ x_0 + \frac{\pi^2}{3}\dot{w}\ w - \dot{w}x_0 \\ &= 1+w^2 \int_{\mathbb{R}} z\ s(w\ z+x_0)\ R_m(U_2(z))\ dz + w\ x_0 \int_{\mathbb{R}} s(w\ z+x_0)\ R_m(U_2(z))\ dz\end{aligned}$$

dans le cas monostable. Cette équation n'est pas du tout pratique ! Elle n'est pas résolue en x_0 ou en w. Pour cette raison, nous n'utiliserons pas de telles lois d'équilibre.

3. Les calculs ci-dessus ont été menés en toute généralité. L'intérêt de tels calculs est que la majorité des intégrales qui apparaissent ne font intervenir que U et ses dérivées, ce sont donc des nombres réels. C'est le cas pour les intégrales J_1, J_2, J_4, J_5, J_7 et J_8. Si U suit un profil connu, ces calculs peuvent être effectués une fois pour toutes, comme nous le ferons en III.1 et IV.4. Nous verrons même que les résultats sont exacts, car les fonctions en jeu admettent des primitives calculables.
4. Les autres intégrales dépendent de x_0 et w. Elles fournissent les *termes sources* pour les équations différentielles. C'est le cas de J_3, J_6 et J_9.

II.4.6 Explicitation des équations pour certains défauts

Avant de clore ce chapitre, nous allons montrer quelques *réductions* de ces équations obtenues pour certains types de défauts annoncés en II.2.1. Un défaut constant(!) est de la forme $s(x) \equiv s_0$. Alors on peut dire que

$$\begin{aligned}J_3 &= s_0 J_{10} \\ J_6 &= s_0 J_{11} \\ J_9 &= s_0 J_{12}\end{aligned}$$

avec

$$\begin{cases} J_{10} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} R(U(z))\ dz \\ J_{11} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ R(U(z))\ dz \\ J_{12} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\ R(U(z))\ dz. \end{cases} \tag{II.32}$$

Les équations (II.21), (II.29) se simplifient en :

$$\begin{cases} -\dot{x_0} J_1 - \dot{w} J_2 = s_0 w J_{10} \\ -\dot{x_0} J_4 - \dot{w} J_5 = -\dfrac{1}{w} J_7 + s_0 w J_{11} \\ -\dot{x_0} J_7 - \dot{w} J_8 = s_0 w J_{12}. \end{cases} \tag{II.33}$$

Nous souhaitons vérifier (et nous le ferons par la suite) que dans les cas monostable et bistable, nous retrouvons bien les valeurs obtenues au chapitre I, ce qui sera une preuve de la *consistance* de notre démarche.

Ici aussi, les intégrales J_{10}, J_{11} et J_{12} sont calculables dès lors que R et U sont connus. Nous voyons donc que nous menons un travail du plus général vers le plus particulier.

1. Nous avons un système d'équations indépendantes de U et R en (II.21).
2. En supposant U fixé, égal par exemple au front d'Huxley U_1 ou au front d'Ablowitz U_2, nous avons un second système d'équations.
3. En ajoutant la connaissance du terme de réaction, égal à R_b dans le cas bistable ou à R_m dans le cas monostable, nous obtenons une nouvelle simplification.

Précisons que, pour les cas que nous étudions, c'est la connaissance de R qui fixe le choix de U, si bien qu'on passe directement au point 3.

II.4.7 Généralisation à d'autres défauts s

La forme des équations obtenues en (II.21) est encourageante, en cela que le défaut s apparaît uniquement via une intégrale. On sait que l'intégrale est un processus *régularisant*, qui permet donc d'envisager des défauts s ne vérifiant pas strictement les conditions énoncées en II.2.1. Ainsi, nous complétons la liste des défauts considérés en introduisant leurs limites naturelles :

5. Tout d'abord la limite naturelle du défaut symétrique (II.13). Nous approchons notre défaut gaussien

$$s(x) = s_0 + s_1 \exp\left(\frac{-x^2}{2d}\right)$$

par une distribution δ de Dirac appropriée :

$$s(x) = s_0 + s_1' \, \delta_0(x)$$

avec $s_1' = s_1\sqrt{2\pi d}$ de telle manière que nous ayons alors égalité des intégrales des deux défauts. Oublions le «prime» pour écrire de manière générique

$$s(x) = s_0 + s_1 \delta_0(x) \tag{II.34}$$

en nous souvenant que ce s_1 doit être relié à l'amplitude et à la largeur du défaut gaussien (cela sera nécessaire quand on voudra plus tard comparer les deux modèles).

6. Puis la limite naturelle du défaut antisymétrique (II.14). Nous approchons notre défaut tangente hyperbolique

$$s(x) = s_l + \frac{s_r - s_l}{2}\left(1 + \tanh\frac{x}{d}\right)$$

par une fonction de Heaviside :

$$s(x) = s_l + (s_r - s_l)H(x) \tag{II.35}$$

Ces deux défauts (de largeur caractéristique nulle) porteront mieux le nom d'*obstacles*, et répondent à la discussion du début de ce chapitre. On peut alors continuer à expliciter les équations (II.21), (II.29).

Cas d'un défaut «Dirac»

Supposons que $s(x) = s_0 + s_1\delta_0(x)$. Alors les équations (II.21), (II.29) se simplifient en :

$$\begin{cases} -\dot{x_0}J_1 - \dot{w}J_2 = s_0 w J_{10} + s_1 R\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right) \\ -\dot{x_0}J_4 - \dot{w}J_5 = -\frac{1}{w}J_7 + s_0 w J_{11} + s_1 U\left(\frac{-x_0}{w}\right) R\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right) \\ -\dot{x_0}J_7 - \dot{w}J_8 = s_0 w J_{12} + s_1 U'\left(\frac{-x_0}{w}\right) R\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right). \end{cases} \tag{II.36}$$

Cas d'un défaut «Heaviside»

Supposons que $s(x) = s_l + (s_r - s_l)H(x)$. Alors les équations (II.21), (II.29) se simplifient en :

$$\begin{cases} -\dot{x_0}J_1 - \dot{w}J_2 = s_l w J_{10} + (s_r - s_l)w\displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} R(U(z))\,dz \\ -\dot{x_0}J_4 - \dot{w}J_5 = -\frac{1}{w}J_7 + s_l w J_{11} + (s_r - s_l)w\displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} U(z)R(U(z))\,dz \\ -\dot{x_0}J_7 - \dot{w}J_8 = s_l w J_{12} + (s_r - s_l)w\displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} U'(z)R(U(z))\,dz. \end{cases} \tag{II.37}$$

Ces deux derniers systèmes partagent la propriété remarquable que l'évolution des coordonnées collectives est séparée en contributions *intrinsèque* et *extrinsèque*. La première contribution vient de la dynamique en l'absence de défaut (termes en facteur de s_0 ou s_l) ; la seconde est uniquement due au défaut localisé (termes en facteur de s_1 ou $s_r - s_l$). Nous reviendrons plus en détail sur les conséquences et les avantages de cette remarque au chapitre III.

Chapitre III

Cas bistable

Abstract

We study in this chapter the bistable case. We give the system of ordinary differential equations, that we compare to the complete model. The comparison is very good, and shows well the benefits of the reduced model. Pinning of the front is studied, and several criteria are given.

Résumé [1]

Dans ce chapitre, nous étudions le cas d'une non-linéarité de type bistable. Nous donnons les systèmes d'équations différentielles ordinaires, proposés ensuite à la comparaison avec le modèle complet. Nous montrons le bon accord des deux méthodes. Le modèle standardisé a de plus l'avantage de prédire des effets spécifiques, tel que l'arrêt du front pour certains types de défauts.

Sommaire

III.1 Analyse en coordonnées collectives 49
III.1.1 Défaut constant 50
III.1.2 Vitesse de retour à l'équilibre 51
III.1.3 Défaut large 51
III.1.4 Défaut étroit 52
III.2 Simulations numériques 55
III.2.1 Défaut symétrique 56
III.2.2 Défaut antisymétrique 58
III.3 Comparaison entre modèles 59

1. Certains résultats de ce chapitre et du précédent ont été publiés dans [CS11] : *Reaction-diffusion front crossing a local defect*, J.G. Caputo et B. Sarels, Phys. Rev. E 84, 041108

III.3.1 Défaut large 60
III.3.2 Défaut étroit, ou comment arrêter un front progressif 61
III.4 Intérêt du modèle standardisé 63
III.4.1 Arrêt du front par un défaut symétrique 63
III.4.2 Arrêt du front par un défaut antisymétrique 67
III.4.3 Arrêt du front par une zone sans réaction 69
III.4.4 Problème inverse 72

Dans ce chapitre, nous étudions les conséquences des résultats établis au chapitre II lorsque le terme de réaction est de la forme

$$R(u) = u(1-u)(u-a)$$

pour $0 < a < \frac{1}{2}$.

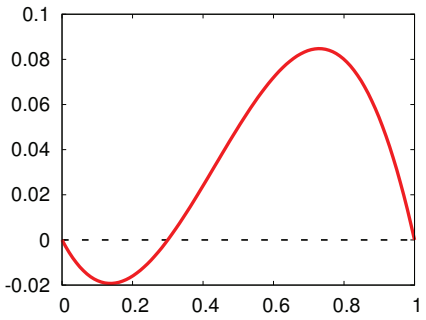


FIGURE III.1 – Terme de réaction bistable. Ici on a choisi $a = 0,3$.

Nous considérons donc l'équation suivante :

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ u(1-u)(u-a). \tag{III.1}$$

III.1 Analyse en coordonnées collectives

Lorsque le terme de réaction vaut $u(1-u)(u-a)$, il est légitime de chercher U sous la forme $U(z) = \frac{1}{1+\exp(z)}$, puisqu'il s'agit précisément de la valeur de U en milieu homogène. Alors on peut faire les calculs pour les intégrales :

$$\begin{cases} J_1 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\ dz & = -1 \\ J_2 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U'(z)\ dz & = 0 \\ J_4 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ U'(z)\ dz & = -\dfrac{1}{2} \\ J_5 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U(z)\ U'(z)\ dz & = \dfrac{1}{2} \\ J_7 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z)\ dz & = \dfrac{1}{6} \\ J_8 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U'^2(z)\ dz & = 0 \end{cases}$$

On a de plus :

$$\begin{cases} J_{10} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} R_b(U(z))\ dz & = \dfrac{1-2a}{2} \\ J_{11} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ R_b(U(z))\ dz & = \dfrac{2-3a}{6} \\ J_{12} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\ R_b(U(z))\ dz & = \dfrac{2a-1}{12} \end{cases}$$

Les équations sont donc, en toute généralité concernant le défaut :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = wJ_3 \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} + w(J_3 - 2J_6) \\ \dot{x_0} = -6wJ_9 \end{cases}$$

Si nous retenons uniquement les deux premières équations, et si nous rappelons les définitions de J_3 et J_6, nous obtenons :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = w \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} s(wz + x_0) R_b(U(z))\ dz \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} + w \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} s(wz + x_0)(1 - 2U(z)) R_b(U(z))\ dz \end{cases} \tag{III.2}$$

Au cours de notre travail numérique, nous avons utilisé ce système. Plus loin, nous montrerons la comparaison des résultats obtenus par son entremise et des résultats obtenus par la résolution de l'équation aux dérivées partielles de départ suivie de la procédure d'approche par moindres carrés.

III.1.1 Défaut constant

Avant de regarder les résultats obtenus par notre méthode dans des cas hétérogènes, il est bon de vérifier que notre démarche est consistante, autrement dit que l'on retrouve des résultats connus dans le cas homogène. Nous considérons donc des «défauts» constants, de la forme $s(x) \equiv s_0$. Alors on peut dire que

$$J_3 = s_0 J_{10} = \frac{s_0(1-2a)}{2}$$
$$J_6 = s_0 J_{11} = \frac{s_0(2-3a)}{6}$$
$$J_9 = s_0 J_{12} = \frac{s_0(2a-1)}{12}$$

Le système devient :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{s_0 w(1-2a)}{2} \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} - \dfrac{s_0 w}{6} \\ \dot{x_0} = \dfrac{s_0 w(1-2a)}{2} \end{cases} \tag{III.3}$$

La troisième équation est redondante ! Lorsque l'on cherche $\dot{w} = 0$ (ici cela est nécessaire, à la différence de IV.4.1), on trouve $w = \sqrt{\frac{2}{s_0}}$ à l'aide de la deuxième équation, puis $\dot{x_0} = \sqrt{\frac{s_0}{2}}(1-2a)$. On retrouve les valeurs (I.13) et (I.12) du chapitre I.

III.1.2 Vitesse de retour à l'équilibre

Partant du système précédent (III.3), on procède à une analyse d'une perturbation autour de l'équilibre $\left(\dot{x_0}^* = \sqrt{\frac{s_0}{2}}(1-2a), w^* = \sqrt{\frac{2}{s_0}}\right)$. Il vient en différentiant :

$$\begin{cases} \delta\dot{x_0} = \dfrac{s_0(1-2a)}{2}\delta w \\ \delta\dot{w} = -\dfrac{\delta w}{3w^{*2}} - \dfrac{s_0\ \delta w}{6} = -\dfrac{s_0}{3}\delta w \end{cases}$$

Donc :

$$\begin{pmatrix} \delta\dot{x_0} \\ \delta\dot{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{s_0(1-2a)}{2} \\ 0 & -\frac{s_0}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta w \end{pmatrix}$$

On résout en $\delta w = e^{-\frac{s_0}{3}t}$, puis $\delta x_0 = (3a - \frac{3}{2})e^{-\frac{s_0}{3}t}$. Le temps caractéristique de retour à l'équilibre, vaut ici $\frac{3}{s_0}$.

III.1.3 Défaut large

Comme vu en II.2.3, les défauts sont naturellement classés en défauts *larges* (ou lents) et *étroits* (ou rapides). Dans le cas d'un défaut large, la plus grossière approximation que l'on puisse réaliser à partir de (III.2) consiste à supposer que $s(x_0 + wz) \approx s(x_0)$. On a alors

$$\begin{cases} \dot{x_0} = ws(x_0)J_{10} \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} + ws(x_0)(J_{10} - 2J_{11}), \end{cases}$$

ce qui donne :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{(1-2a)w}{2}s(x_0) \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} - \dfrac{w}{6}s(x_0). \end{cases} \tag{III.4}$$

Ces équations justifient que l'on puisse parler d'une *vitesse locale* et d'une *largeur locale* du front. En effet, la dépendance de ces coordonnées collectives en s n'apparaît que via $s(x_0)$, c'est-à-dire via la valeur de s en le centre du front x_0, et en *aucun autre point*. Lorsque s est constante, nous retrouvons les résultats (I.12), (I.13). Remarquons de plus qu'ici, il n'y a pas d'objection à ce que le défaut soit étendu *vers la droite*. La seule condition requise est que le front incident soit en régime établi avant d'atteindre le défaut (plus précisément avant d'atteindre la zone où $s' \neq 0$). Nous proposons d'appeler ce cas le cas *adiabatique*.

Notons que cette approximation peut être affinée en utilisant un développement de Taylor : $s(x_0 + wz) \approx s(x_0) + wzs'(x_0)$. Alors les équations deviennent :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = ws(x_0)J_{10} + w^2 s'(x_0)J_{13} \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} + ws(x_0)(J_{10} - 2J11) + w^2 s'(x_0)(J_{13} - 2J_{14}). \end{cases}$$

où on a défini deux nouvelles intégrales :

$$J_{13} = \int_{-\infty}^{+\infty} z\ R_b(U(z))\ dz \tag{III.5}$$

$$J_{14} = \int_{-\infty}^{+\infty} z\ U(z)\ R_b(U(z))\ dz \tag{III.6}$$

Tous calculs faits, il vient :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{(1-2a)w}{2} s(x_0) - \dfrac{w^2}{2} s'(x_0), \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} - \dfrac{w}{6} s(x_0) + \dfrac{(1-2a)w^2}{2} s'(x_0). \end{cases}$$

Nous avons utilisé ce système numériquement. Il améliore la précision de l'estimation de x_0 lorsqu'on compare aux résultats de l'équation aux dérivées partielles, mais n'améliore pas l'estimation de w. Pour cette raison, nous avons gardé le système (III.4) pour sa simplicité d'utilisation.

III.1.4 Défaut étroit

Cas d'un défaut «Dirac»

Le premier défaut étudié en détail est modélisé par une distribution de Dirac : $s(x) = s_0 + s_1\delta(x)$. Dans ce cas, (III.2) donne :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = s_0 w \left(\dfrac{1-2a}{2}\right) + s_1 R_b \left(U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} - s_0 \dfrac{w}{6} + s_1 \left(1 - 2U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) R_b \left(U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) \end{cases} \tag{III.7}$$

Les *termes sources* sont donnés par :

$$\begin{cases} R_1(z) = R_b(U(z)) & = \dfrac{e^z(1-a-ae^z)}{(1+e^z)^3} \\ R_2(z) = (1-2U(z))\ R_b(U(z)) & = \dfrac{e^z(e^z-1)(1-a-ae^z)}{(1+e^z)^4}. \end{cases}$$

Ils sont représentés en figure III.2.

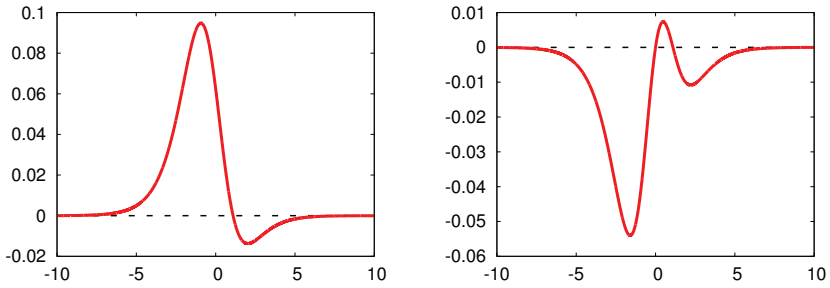


FIGURE III.2 – Tracés des termes sources pour un «Dirac» : $R_b(U(z))$ (à gauche) et $(1-2U(z))\ R_b(U(z))$ (à droite) en fonction de la variable z. Ici on a choisi $a = \frac{1}{4}$.

On peut faire un certain nombre de remarques à propos de ces termes sources. D'abord, notons que les deux termes $R_b(U(z))$ et $(1-2U(z))\ R_b(U(z))$ ne sont pas symétriques. Puisque $R_b(U(z))$ est largement positif, un défaut cause une accélération du front pour $s_1 > 0$. Toutefois, l'existence d'une zone négative rend possible l'*arrêt* du front, à la fois pour $s_1 > 0$ et pour $s_1 < 0$. On donnera plus de détails à ce sujets en sous-section III.4.1. Enfin, on remarque que $(1-2U(z))\ R_b(U(z))$ est largement négatif, de telle sorte que la largeur du front incident diminue lorsque que ce dernier rencontre un défaut avec $s_1 > 0$.

Cas d'un défaut «Heaviside»

L'autre défaut étroit que nous étudions est modélisé par $s(x) = s_l + (s_r - s_l)\ H(x)$ où $H(x)$ est la fonction de Heaviside. À partir de (III.2), le système d'équations se réduit à :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = s_l w \left(\dfrac{1-2a}{2}\right) + (s_r - s_l) w \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} R_b(U(z))\ dz \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} - s_l \dfrac{w}{6} + (s_r - s_l) w \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} (1-2U(z)) R_b(U(z))\ dz \end{cases} \tag{III.8}$$

Les termes sources sont ici aussi calculables de manière explicite :

$$\begin{cases} S_1(y) = \displaystyle\int_y^\infty R_b(U(z))\ dz & = \dfrac{1-2a(1+e^y)}{2(1+e^y)^2}, \\ S_2(y) = \displaystyle\int_y^\infty (1-2U(z))\ R_b(U(z))\ dz & = \dfrac{-1+3e^y(1-2a(1+e^y))}{6(1+e^y)^3}. \end{cases}$$

On les trace en figure III.3. Remarquons que R_1, R_2, S_1 et S_2 peuvent changer de signe, mais pas pour toutes les valeurs de a. Par exemple, si a est proche de $\frac{1}{2}$, la zone positive de S_2 disparaît. S_1, lui, change toujours de signe ; mais plus a est petit, moins la zone où il est négatif est prononcée (cela a un lien avec la facilité d'arrêter le front, voir III.4.2).

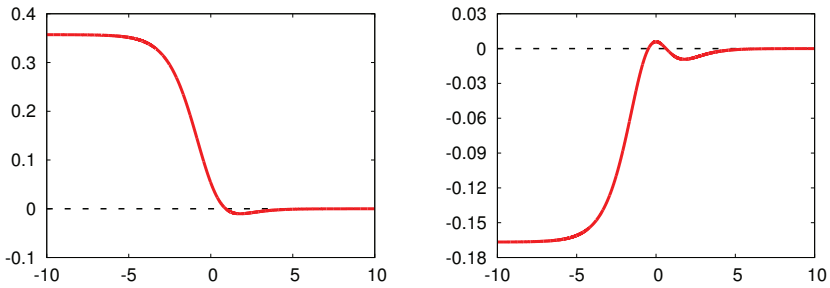


FIGURE III.3 – Tracés des termes sources pour un «Heaviside» : $\int_y^\infty R_b(U(z))\ dz$ (à gauche) et $\int_y^\infty (1-2U(z))\ R_b(U(z))\ dz$ (à droite) en fonction de la variable y. Ici on a choisi $a = \frac{1}{7}$.

Les remarques générales faites plus haut sur l'accélération du front et la réduction de sa largeur restent valables. Résumons dans le détail ce qui se passe lorsqu'un front rencontre un tel obstacle.

1. Dans un premier temps, il ralentit et sa largeur diminue : il se *ramasse* pour essayer de sauter l'obstacle (phase de *préparation*).
2. Dans un deuxième temps, s'il n'a pas trop ralenti et s'il a suffisamment avancé, il *saute* l'obstacle en accélérant beaucoup et en s'élargissant un peu.
3. Puis dans un troisième temps, il se raidit à nouveau un tout petit peu en continuant d'accélérer (2 et 3 constituent la phase de *saut*).
4. Dans un quatrième temps, il atteint la nouvelle zone à s constant, et il prend la forme correspondante (phase de *rétablissement*).



III.2 Simulations numériques

Nous allons présenter dans cette section les résultats des simulations numériques pour les problèmes (II.15) et (II.16) lorsque le terme de réaction est de type bistable. Commençons par donner de manière synthétique les observations faites :

1. Les fronts sont stables pour une large gamme de variations du défaut localisé $s(x)$.
2. Précisément, les fronts continuent d'exister avec une vitesse et une largeur qui se modifient au fur et à mesure que le front rencontre le défaut. Cela recouvre tout à fait l'analyse effectuée au chapitre précédent, et la justifie a posteriori. La notion de paramètre *instantané* d'un front est manifeste lorsque l'on observe une simulation numérique.
3. Il est important de mettre en valeur dès à présent que l'*erreur normalisée* E de la méthode des moindres carrés (voir (II.17)) est faible ($< 10^{-4}$) dans toutes les simulations que nous présentons. Pour cette raison, l'approche par un front à la forme fixée U est très bonne.
4. De plus, pour éviter un biais dû aux zones où u est proche de 0 ou de 1 (et où l'erreur est donc de facto faible), nous avons choisi de calculer cette erreur en redéfinissant une zone spatiale adéquate. Cette zone spatiale est définie comme la zone où le front «varie», c'est-à-dire comme la zone où u est compris entre ε et $1-\varepsilon$, avec typiquement $\varepsilon = 10^{-3}$ ou $\varepsilon = 10^{-2}$. Ainsi, l'erreur n'est pas artificiellement faible grâce à des points en dehors de cette zone, points pour lesquels l'approximation est facile mais sans intérêt.
5. Nous donnons dans le tableau suivant le maximum (lorsque t varie, mais une fois passé le temps d'établissement) des erreurs commises en approchant la solution exacte par le front donné par la méthode de gradient conjugué.

Simulation Type Erreur	001036 Symétrique large $0,312.10^{-4}$	
Simulation Type Erreur	001056 Symétrique étroit petit $0,348.10^{-4}$	001055 Symétrique étroit grand $0,804.10^{-4}$
Simulation Type Erreur	002151 Antisymétrique large $0,112.10^{-4}$	002101 Antisymétrique étroit $1,700.10^{-4}$

TABLE III.1 – Erreurs commises lors de l'approche du front réel par un front à la forme fixée (front d'Huxley)

Précisons enfin que, dans le but de gagner en clarté d'exposé, nous avons choisi de fixer le temps de ce chapitre la valeur de a à $0,3$. De toute façon, les résultats que nous présentons ne dépendent pas de cette valeur pourvu que a reste compris entre 0 et $\frac{1}{2}$ strictement.

III.2.1 Défaut symétrique

Nous considérons d'abord un défaut du type

$$s(x) = s_0 + s_1 \exp\left(\frac{-x^2}{2d}\right)$$

Large

Quand le défaut varie sur une échelle de longueur grande par rapport à la largeur du front, ce dernier se déplace et adapte sa largeur et sa vitesse en accord avec l'environnement *local*. L'exemple d'un tel cas est montré en figure III.4. Le panneau de gauche montre le front incident avec le défaut symétrique, en fonction de la position x. Le panneau de droite montre la vitesse $\dot{x}_0$ et la largeur w du front en fonction de la position centrale x_0. Le défaut $s(x_0)$ est aussi reporté sur ce graphique. La vitesse est calculée en utilisant une *différence à gauche* à partir de la série temporelle $(x_0(t_j))$:

$$\dot{x_0}(t_j) = \frac{x_0(t_j) - x_0(t_{j-1})}{t_j - t_{j-1}}$$

On voit que le front accélère et se raidit à mesure qu'il rencontre le défaut.

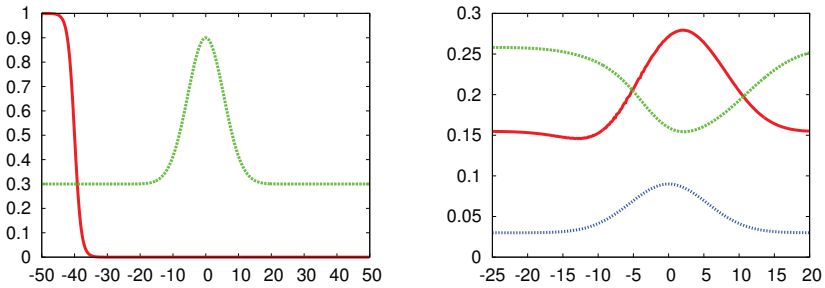


FIGURE III.4 – Mouvement adiabatique d'un front. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x,0)$ en trait continu (rouge) avec le défaut $s(x)$ en trait pointillé (vert). Le panneau de droite montre en rouge la vitesse $\dot{x}_0$ et en vert la largeur mise à l'échelle $w/10$ du front en fonction de la position centrale x_0. Le défaut mis à l'échelle $s(x)/10$ est rappelé en bleu. Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 0,6$ et $d = 30$.

Étroit

Considérons maintenant l'autre cas limite, c'est-à-dire lorsque le défaut est plus étroit que le front incident, comme montré dans le panneau gauche de la figure III.5. Ici aussi le front est capable de dépasser l'obstacle, bien qu'il doive *ralentir* avant. Il accélère à nouveau après, comme on le voit dans le panneau droit de la figure III.5. On peut remarquer aussi la fine modulation de la largeur.

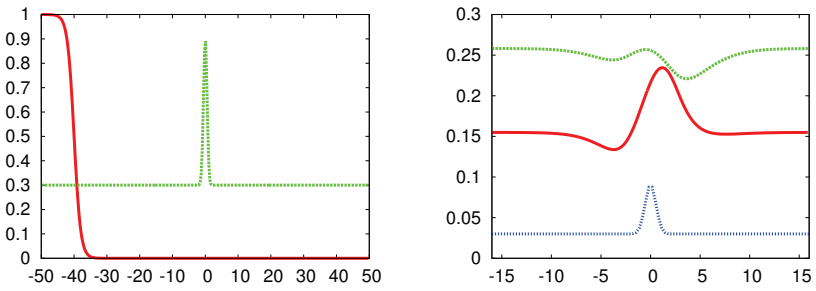


FIGURE III.5 – Mouvement d'un front alors qu'il rencontre un défaut étroit. Le panneau de gauche montre le front incident avec le défaut $s(x)$. Le panneau de droite montre en rouge la vitesse $\dot{x_0}$ et en vert la largeur mise à l'échelle $w/10$ du front en fonction de la position centrale x_0. Le défaut mis à l'échelle $s(x)/10$ est rappelé en bleu. Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 0,6$ et $d = 0,3$.

Étroit grand

Si l'amplitude du défaut est plus grande, le front peut être *stoppé*, comme on le voit en figure III.6, où le défaut a une amplitude $s_1 = 7$. Le graphique montre la largeur et la vitesse du front. Cette dernière diminue jusqu'à atteindre zéro, et la largeur n'évolue plus. Pour montrer que cet effet est intrinsèque, nous avons fait varier de manière systématique la *résolution spatiale* du calcul de $N = 1000$ à $N = 20000$. Pour toutes ces simulations, le front s'est arrêté au même endroit, et les paramètres à l'arrêt sont donnés par :

$$x_0 \approx -2.73,\ w \approx 1.80 \tag{III.9}$$

Ce phénomène est aussi appelé *pinning* du front dans la littérature anglaise [Sco03]. Nous l'analyserons plus en détail en sous-section III.4.1.

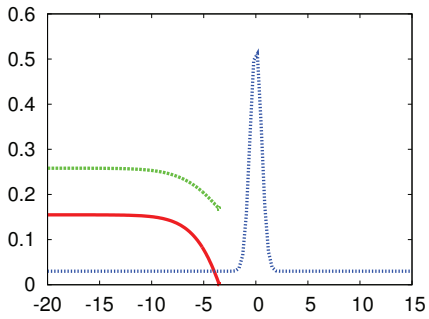


FIGURE III.6 – Arrêt du front lorsqu'il rencontre un grand défaut. La vitesse du front $\dot{x}_0$ en rouge, la largeur du front (mise à l'échelle) $w/10$ en vert et le défaut (mis à l'échelle) $s(x)/10$ sont tracés en fonction de la position centrale du front x_0. Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 7$ et $d = 0,3$.

III.2.2 Défaut antisymétrique

Nous considérons maintenant un autre type de défaut, qui connecte deux valeurs différentes : s_l à gauche et s_r à droite.

$$s(x) = s_l + \frac{s_r - s_l}{2}\left(1 + \tanh\frac{x}{d}\right)$$

Nous annonçons dès maintenant que nous observons des résultats similaires à ceux du défaut symétrique.

Large

Pour un défaut large, le front se déplace de manière adiabatique, comme on le voit dans la figure III.7. Il accélère et sa largeur décroît alors que s augmente de la gauche vers la droite.

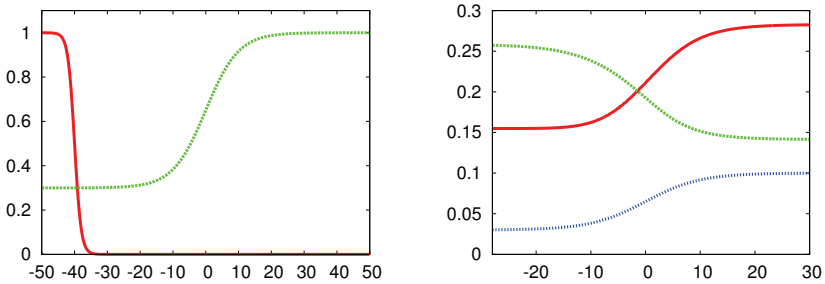


FIGURE III.7 – Interaction d'un front avec un défaut antisymétrique large. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x,0)$ avec le défaut $s(x)$. Le panneau de droite montre la vitesse $\dot{x}_0$ et la largeur (mise à l'échelle) $w/10$ du front en fonction de sa position centrale x_0. Les paramètres sont $s_l = 0,3$, $s_r = 1$ (saut de $0,7$) et $d = 10$.

Étroit

Lorsque le défaut est étroit, la vitesse et la largeur ne sont plus monotones. Les résultats sont montrés en figure III.8. Ici aussi, les résultats ont été vérifiés en variant systématiquement la résolution spatiale.

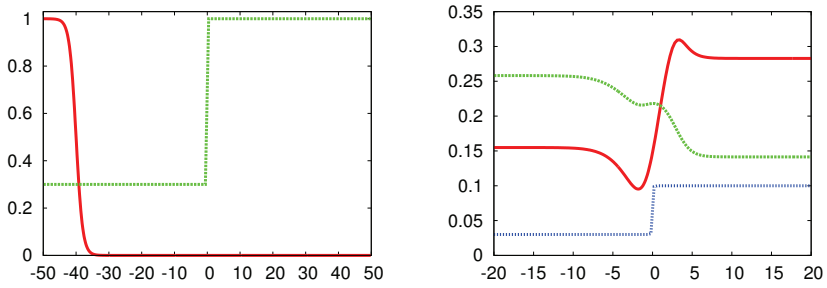
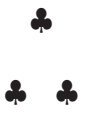


FIGURE III.8 – Interaction d'un front avec un défaut antisymétrique étroit. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x,0)$ avec le défaut $s(x)$. Le panneau de droite montre la vitesse $\dot{x_0}$ et la largeur (mise à l'échelle) $w/10$ du front en fonction de sa position centrale x_0. Les paramètres sont $s_l = 0,3$, $s_r = 1$ (saut de $0,7$) et $d = 0,1$.

Étroit grand

Comme précédemment, le plongeon de la vitesse indique qu'en augmentant l'amplitude du défaut, nous pouvons obtenir l'arrêt du front, et c'est effectivement ce qui se produit. Nous montrerons en sous-section III.4.1 que l'on peut obtenir un critère simple d'arrêt du front pour un défaut symétrique, et en sous-section III.4.2 un critère semblable pour un défaut antisymétrique.



III.3 Comparaison entre le modèle standardisé et l'équation aux dérivées partielles initiale

Pour discuter de la validité du modèle standardisé, il nous faut comparer ses solutions à celles de l'équation aux dérivées partielles. Comme nous l'avons dit au chapitre II, nous classifions les défauts $s(x)$, et nous leur attribuons le qualificatif de large ou étroit selon que $w/d \ll 1$ ou que $w/d \gg 1$, où w est la largeur initiale du front incident et d est la largeur du défaut telle que définie en (II.13) et (II.14).

III.3.1 Défaut large

Lorsque le défaut est large, les équations (III.4) nous donnent des évolutions de la position du front x_0 et de sa largeur w proches des évolutions obtenues par l'approche par moindres carrés de la solution de l'équation aux dérivées partielles initiale. Nous montrons dans la figure III.9 les résultats obtenus pour le défaut gaussien vu à la figure III.4 et pour le défaut tangente hyperbolique vu à la figure III.7.

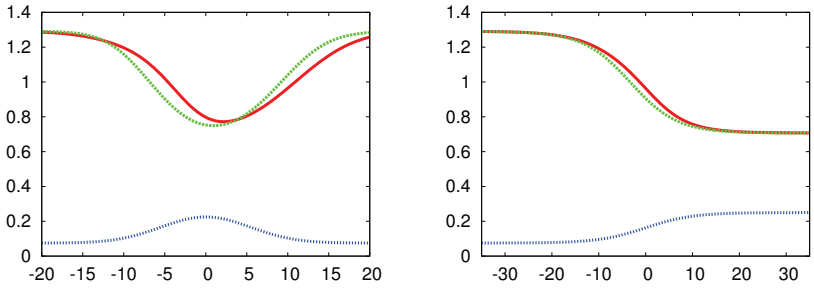


FIGURE III.9 – Tracés (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) en trait continu (rouge) et pour les équations d'évolution des coordonnées collectives (III.4) en trait discontinu (vert). Le panneau de gauche (respectivement de droite) correspond à un défaut symétrique (respectivement antisymétrique). Les défauts sont rappelés au bas de chaque panneau.

Les estimations en coordonnées collectives peuvent être améliorées en *calculant numériquement* les intégrales des équations (III.2). Dans la figure III.10, nous comparons les résultats pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) et pour les solutions de (III.2), dans le cas d'un défaut tangente hyperbolique. L'accord entre les deux modèles est excellent.

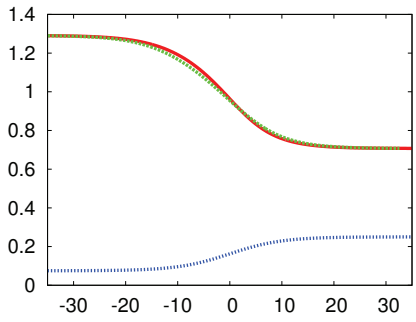


FIGURE III.10 – Tracé (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) en trait continu (rouge) et pour les équations d'évolution des coordonnées collectives (III.2) en trait discontinu (vert), dans le cas d'un défaut antisymétrique présenté en pointillé (bleu).

III.3.2 Défaut étroit, ou comment arrêter un front progressif

Nous considérons maintenant que la largeur du défaut d est plus petite que la largeur initiale du front w. Dans ce cas, les équations d'évolution des coordonnées collectives peuvent être réécrites comme nous l'avons vu précédemment. Pour des défauts étroits, les équations régissant les coordonnées collectives (III.7) ou (III.8) sont moins précises que pour un défaut large. Cependant, elles prédisent le comportement qualitatif du front : ralentissement, rétrécissement, etc. En particulier, elles prédisent l'arrêt du front.

Symétrique

Pour des défauts symétriques étroits, nous utilisons les équations données en (III.7). La figure III.11 montre les courbes d'évolution de la vitesse et de la largeur du front pour un défaut gaussien (tracé en bas de la figure). La valeur de s à l'infini est $s_0 = 0,3$. Le panneau de gauche correspond à une amplitude faible $s_1 = 0,6$, le panneau de droite à une amplitude bien plus grande $s_1 = 5$ qui cause l'arrêt du front. Pour cette figure particulière, nous montrons la vitesse $\dot{x_0}$ calculée en utilisant une différence à gauche à partir de la série temporelle $x_0(t)$, à la fois pour l'équation aux dérivées partielles et pour le modèle standardisé. Elles sont multipliées par 10 sur la figure pour plus de clarté, tandis que le défaut a été divisé par 10.

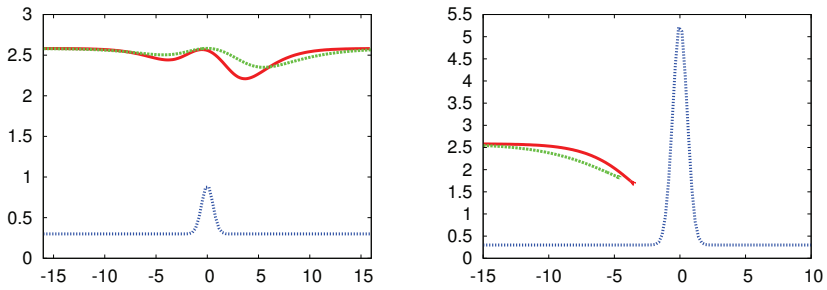


FIGURE III.11 – Tracé (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) en trait continu (rouge) et pour les équations d'évolution des coordonnées collectives (III.7) en trait discontinu (vert), dans le cas d'un défaut symétrique étroit présenté en pointillé (bleu). Le panneau de gauche correspond à $s_1 = 0,6$ et $d = 0,3$. Le panneau de droite correspond à $s_1 = 5$.

Le modèle initial (l'équation aux dérivées partielles suivi de l'approche par moindres carrés) et le modèle standardisé (les deux équations différentielles régissant les coordonnées collectives) montrent un bon accord pour la largeur w comme fonction de x_0. La vitesse $\dot{x_0}$ n'est pas aussi bien approchée mais elle va à zéro lorsqu'elle s'approche de la position d'arrêt.

Antisymétrique

Pour des défauts antisymétriques étroits, nous utilisons les équations données en (III.8). L'accord entre les courbes (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles initiales (III.1) et pour les équations des coordonnées collectives (III.8) est bon comme montré en figure III.12.

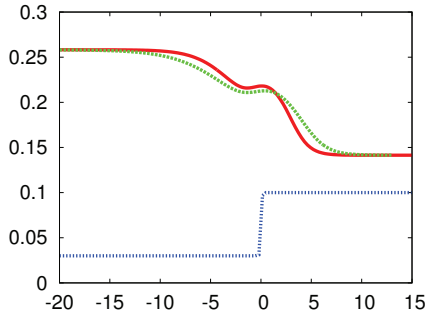


FIGURE III.12 – Tracé (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) en trait continu (rouge) et pour les équations d'évolution des coordonnées collectives (III.8) en trait discontinu (vert), dans le cas d'un défaut antisymétrique étroit présenté en pointillé (bleu). Les paramètres sont $s_l = 0,3$, $s_r = 1$ (saut de $0,7$) et $d = 0,1$.

Comme nous l'avons vu dans la section III.2, le front peut être stoppé si s_1 est suffisamment grand. Cela est prévu aussi par le modèle en coordonnées collectives. Un tel cas est montré en guise d'exemple en figure III.13, pour un défaut étroit et grand où $s_r = 8$, $d = 0,1$ tracé en bas de la figure (divisé par 10). Comme précédemment, la vitesse $\dot{x_0}$ est estimée en utilisant une différence à gauche et est tracée sur le graphique pour montrer l'arrêt.

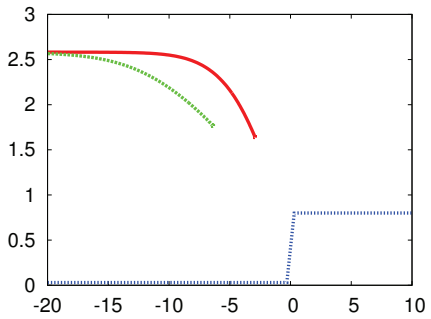


FIGURE III.13 – Tracé (x_0, w) pour l'équation aux dérivées partielles (III.1) en trait continu (rouge) et pour les équations d'évolution des coordonnées collectives (III.8) en trait discontinu (vert), dans le cas d'un défaut antisymétrique étroit présenté en pointillé (bleu). Il montre le défaut (mis à l'échelle) $s(x)/10$.



III.4 Intérêt du modèle standardisé : arrêt du front, topographie de $s(x)$...

Dans cette section, nous montrons comment tirer parti du modèle standardisé (III.2). Ses avantages sont les suivants :

- tout d'abord, un gain de temps de calcul très conséquent car on ramène un système de n équations différentielles (II.7) ou (II.8) à un système de 2 équations,
- une très bonne précision d'approximation,
- les paramètres apparaissent explicitement dans les systèmes d'équations,
- les évolutions de x_0 et w sont aisément compréhensibles car divisées en contributions intrinsèques et extrinsèques.

Nous donnons comme applications :

- trois critères d'arrêt du front par différents types de défauts,
- une résolution de problème inverse.

Le fait qu'un terme de réaction bistable puisse donner lieu à l'arrêt du front est quelque chose de nouveau, qui n'est pas documenté dans la littérature. Cela est connu dans le cas discret uniquement, comme nous en ferons la remarque ci-dessous. Non content de présenter ce résultat nouveau, nous allons montrer comment le modèle standardisé permet d'aborder cette question en fournissant de surcroît un critère quantitatif, critère certes approché mais tout à fait satisfaisant d'un point de vue numérique.

Le critère que nous allons donner relie de manière explicite paramètres du défaut $s(x)$ et comportement du front. Ainsi, nous pensons que ce résultat pourrait être vérifié expérimentalement.

III.4.1 Arrêt du front par un défaut symétrique

Nous considérons le cas d'un défaut symétrique étroit, modélisé par un Dirac :

$$s(x) = s_0 + s_1\delta(x)$$

Nous traitons d'abord le cas $s_1 > 0$. Nous posons la question de savoir quelle hauteur minimum est nécessaire pour obtenir l'arrêt du front. Nous nommons cette hauteur minimale s_{1c}, de sorte que l'on a la dichotomie suivante :

- si $s_1 < s_{1c}$, alors le front n'est pas arrêté par l'obstacle. Nous dirons que le front passe l'obstacle, ou qu'il continue à se propager.
- si $s_1 \geq s_{1c}$, alors le front est arrêté, épinglé par l'obstacle. Le front ne se déplace plus, ni dans un sens ni dans l'autre, autrement dit sa vitesse

de propagation devient nulle. Ainsi, ce front particulier est une solution stationnaire de l'équation aux dérivées partielles.

Nous résolvons ce problème de la manière suivante :

1. **Écriture du système d'équations vérifié pour la hauteur critique**
   Partant du système (III.7), et écrivant que le front s'arrête :

$$\dot{x_0} = 0,\ \dot{w} = 0$$

   on obtient :

$$\begin{cases} s_0 w\left(\frac{1-2a}{2}\right) & +s_{1c} R_b\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right) & = 0 \\ \frac{1}{3w} - s_0\frac{w}{6} & +s_{1c}\left(1-2U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right) R_b\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right) & = 0 \end{cases} \tag{III.10}$$

   Ainsi, le front s'arrête quand les deux termes du membre de gauche de la première équation s'équilibrent. Nous traitons le cas d'un front se déplaçant de la gauche vers la droite, nous avons donc $a < \frac{1}{2}$. Puisque nos modèles proviennent de la biologie ou de la physique, nous avons considéré uniquement des fonctions $s(x)$ positives, ainsi $s_0 \geqslant 0$. Le terme de gauche est donc toujours positif. Dans le terme de droite, nous avons supposé $s_1 > 0$. Pour arriver à l'équilibre dans l'équation, il est nécessaire que $R_b\left(U\left(\frac{-x_0}{w}\right)\right)$ contribue négativement. Cela est possible vu la forme de $R_1(z) = R_b(U(z))$, tracé en III.2. En effet, la fonction R_1 admet un minimum strictement négatif. Le front s'arrête donc si, et seulement si :

$$s_0 w\left(\frac{1-2a}{2}\right) < -s_1 \min(R_1)$$

   Pour le cas critique, nous aurons exactement égalité

$$s_0 w\left(\frac{1-2a}{2}\right) = -s_{1c} \min(R_1) \tag{III.11}$$

   Cela montre l'existence d'un seuil au-delà duquel il y a arrêt du front, et en-deçà duquel le front continue à se propager.

2. **Obtention du rapport $\frac{x_0}{w}$ lors de l'arrêt du front**
   Le minimum de R_1 comme fonction de z et son argument z_{min} peuvent être calculés exactement :

$$z_{min} = \ln\left(\frac{1+b_1}{a}\right)$$

$$\min(R_1) = R_1(z_{min}) = -\frac{a^2(1+b_1)(a+b_1)}{(1+a+b_1)^3}$$

où on donne un nom à une quantité qui apparaît souvent : $b_1 = \sqrt{1 - a + a^2}$ (on l'appelle b car c'est la lettre qui vient après a dans l'alphabet, et on l'indice car on aura une autre quantité similaire en III.4.3). On obtient donc l'expression, en fonction de a, du rapport des deux coordonnées collectives à l'arrêt du front pour la valeur critique :

$$\frac{x_0}{w} = -\ln\left(\frac{1+b_1}{a}\right)$$

On peut ensuite obtenir s_{1c} en fonction uniquement de w (et des paramètres a et s_0) :

$$s_{1c} = \frac{s_0\ w\ (1-2a)(1+a+b_1)^3}{2\ a^2(1+b_1)(a+b_1)}$$

3. **Résolution des équations**

En remplaçant s_{1c} par $\frac{-s_0\ w\ (1-2a)}{2R_1(z_{min})}$ dans la seconde équation de (III.10) et également $\frac{x_0}{w}$ par $-\ln\left(\frac{1+b_1}{a}\right)$, on peut résoudre et obtenir la largeur w du front lors de son arrêt. Comme on connaît le rapport des coordonnées collectives, on en déduit x_0. Au final, pour la hauteur critique s_{1c}, la position centrale et la largeur à l'arrêt sont données par :

$$\begin{cases} x_0 = -\sqrt{\dfrac{2}{s_0}}\dfrac{\ln\left(\frac{1+b_1}{a}\right)}{\sqrt{1+3(1-2a)\left(\frac{1-a+b_1}{1+a+b_1}\right)}}, \\ w = \sqrt{\dfrac{2}{s_0}}\dfrac{1}{\sqrt{1+3(1-2a)\left(\frac{1-a+b_1}{1+a+b_1}\right)}} \end{cases} \tag{III.12}$$

La valeur de s_{1c} est obtenue à partir de (III.11) avec la valeur de w donnée ci-dessus. Le critère d'arrêt s'écrit donc :

$$s_1 \geqslant s_{1c} = \sqrt{\frac{s_0}{2}}\frac{(1-2a)(1+a+b_1)^3}{a^2(1+b_1)(a+b_1)\sqrt{1+3(1-2a)\left(\frac{1-a+b_1}{1+a+b_1}\right)}}. \tag{III.13}$$

Il est bon de voir que cette fonction a priori compliquée de la variable a est sympathiquement décroissante sur $[0, \frac{1}{2}]$, avec limite infinie en 0 (bien sûr, elle s'annule en $\frac{1}{2}$).

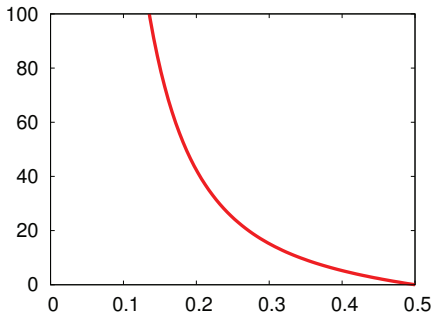


FIGURE III.14 – Tracé de $\frac{(1-2a)(1+a+b_1)^3}{a^2(1+b_1)(a+b_1)\sqrt{1+3(1-2a)\left(\frac{1-a+b_1}{1+a+b_1}\right)}}$

Cela traduit que l'arrêt du front est très difficile à réaliser pour a petit, et ce d'autant plus que l'on s'approche de zéro. A contrario, l'arrêt du front est possible pour a proche de $\frac{1}{2}$ car cette fonction prend des valeurs raisonnables à partir de $0,3$. Ainsi, pour $s_0 = 0,3$, notre critère (III.13) donne $s_{1c} \approx 5,88$ (rappelons que l'on a $a = 0,3$). Les paramètres à l'arrêt donnés par (III.12) sont $x_0 \approx -3,47$, $w \approx 1,89$. Les valeurs données par ce critère sont en bon accord avec les constats faits à partir des solutions de l'équation aux dérivées partielles. Rappelons qu'on peut voir un exemple d'arrêt du front à la figure III.6. Numériquement nous avions trouvé, pour une valeur gauche donnée $s_0 = 0,3$ et une largeur de défaut donnée $d = 0,1$, $s_1 \approx 7,80$, ce qui correspond à $s_{1c} \approx 6,18$. Pour cette valeur critique, le front s'arrête en $x_0 \approx -2,73$ et a une largeur a l'arrêt de $w \approx 1,80$. Les erreurs relatives sont de 5% pour le seuil s_{1c} et la largeur w, et de 21% pour la position x_0. Cette performance médiocre pour l'estimation de la position à l'arrêt est moins importante qu'il n'y paraît au premier abord, car d'une part l'estimation du seuil est performante et d'autre part nous avons déjà vu en section III.3 qu'il existe un décalage de position lors des comparaisons entre le modèle initial et le modèle standardisé. Ce décalage a l'avantage d'être systématique en orientation et en valeur, et ainsi il est possible de corriger ses effets. La question de l'origine de ce décalage reste cependant posée.

Il y a des généralisations :

1. Comme nous l'avons évoqué plus haut, un tel critère peut également être obtenu dans le cas d'un défaut «Heaviside». Nous l'étudions dans la sous-section III.4.2.

2. Un arrêt du front est aussi possible avec $s_1 < 0$ (tant que $s_1 > -s_0$ pour que $s(x)$ reste positif).

3. De manière *duale*, il est un autre type de défaut symétrique qui peut donner

lieu à l'arrêt du front, vu en (II.11) :

$$s(x) = \begin{cases} s_0 & \text{si} \quad x < 0 \\ s_0 + s_1 & \text{si} \quad 0 \leq x \leq x_1 \\ s_0 & \text{si} \quad x > x_1. \end{cases}$$

dans le cas particulier où $s_1 = -s_0$. Alors on a une *zone sans réaction*, dont la largeur x_1 décide du passage ou de l'arrêt du front. Nous l'étudions dans la sous-section III.4.3.

Remarquons que l'arrêt du front est usuellement observé dans la version discrète de ces équations de réaction-diffusion [CB01]. La raison pour laquelle nous le rencontrons ici dans notre modèle continu est la brisure de l'*invariance par translation* dû au défaut $s(x)$.

En anticipant sur le chapitre IV, nous mettons ici en exergue que l'arrêt du front n'est pas possible dans le cas monostable. En effet, il a été crucial dans la démonstration que le terme source $R_b(U(z))$ *présente une partie négative dans* $\mathbb{R}_+$, ce qui ne sera pas le cas pour le terme source issu du terme de réaction $R_m(u) = u(1-u)$. Une autre façon de s'en rendre compte est de voir sur la figure III.14 la limite infinie en zéro évoquée plus haut.

Pour terminer cette section, nous mentionnons les existences d'arrêt de fronts connues dans la littérature. Ainsi, dans des contextes aussi différents que la propagation de fissures dans des interfaces planes [DBV09], ou le déplacement d'un ménisque dans un capillaire [Dio+08], on observe l'arrêt de fronts. Cela pourrait indiquer que le simple modèle de réaction-diffusion bistable avec un terme de défaut $s(x)$ est en mesure de décrire phénoménologiquement ces situations.

III.4.2 Arrêt du front par un défaut antisymétrique

Nous considérons le cas d'un défaut antisymétrique étroit, modélisé par un Heaviside :

$$s(x) = s_l + (s_r - s_l)\delta(x) = s_l + s_1\ H(x)$$

Nous traitons le cas $s_1 > 0$. Nous résolvons ce problème d'une manière assez similaire à celle de la sous-section précédente :

1. **Écriture du système d'équations vérifié pour la hauteur critique**
   Partant du système (III.8), et écrivant que le front s'arrête :

   $$\dot{x_0} = 0,\ \dot{w} = 0$$

   on obtient :

   $$\begin{cases} s_l w\left(\dfrac{1-2a}{2}\right) & +s_1 w \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} R_b(U(z))\ dz & = 0 \\ \dfrac{1}{3w} - s_l\dfrac{w}{6} & +s_1 w \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} (1-2U(z))R_b(U(z))\ dz & = 0 \end{cases}$$

système que nous écrivons pour plus de clarté :

$$s_l w\left(\frac{1-2a}{2}\right) \qquad +s_1 w S_1\left(\frac{-x_0}{w}\right) \qquad = 0 \qquad \text{(III.14a)}$$

$$\frac{1}{3w} - s_l\frac{w}{6} \qquad +s_1 w S_2\left(\frac{-x_0}{w}\right) \qquad = 0 \qquad \text{(III.14b)}$$

On peut commencer par simplifier par w la première équation, puis remarquer que le terme de gauche du membre de gauche de (III.14a) est toujours positif. Dans le terme de droite, nous avons supposé $s_1 > 0$. Pour arriver à l'équilibre dans l'équation, il est nécessaire que $S_1\left(\frac{-x_0}{w}\right)$ contribue négativement. Cela est possible car la fonction S_1 admet un minimum strictement négatif (voir III.3).

Le front s'arrête donc si, et seulement si :

$$s_l\left(\frac{1-2a}{2}\right) < -s_1 \min(S_1)$$

Pour le cas critique, nous aurons exactement égalité

$$s_l\left(\frac{1-2a}{2}\right) = -s_{1c} \min(S_1) \qquad \text{(III.15)}$$

Cela montre l'existence d'un seuil au-delà duquel il y a arrêt du front, et en-deçà duquel le front continue à se propager. La situation est donc exactement similaire à celle de la sous-section précédente, à une différence près : le w a disparu, ce qui va rendre plus facile la résolution.

2. **Résolution**

Le minimum de S_1 et son argument z_{min} peuvent être calculés exactement : puisque $S_1'(y) = -R_1(y)$, et puisque $R_1(y) = 0 \Leftrightarrow 1 - a - ae^y = 0$, on a

$$z_{min} = \ln\left(\frac{1-a}{a}\right)$$

puis

$$\min(S_1) = S_1(z_{min}) = \frac{1-2a(1+\frac{1-a}{a})}{2(1+\frac{1-a}{a})} = -\frac{a^2}{2}$$

Cela donne accès directement à la hauteur critique grâce à (III.15) :

$$s_{1c} = \frac{s_l(1-2a)}{a^2}$$

On trouve ensuite la largeur w à l'arrêt grâce à (III.14b), en remplaçant $\frac{-x_0}{w}$ par $\ln\left(\frac{1-a}{a}\right)$ et s_1 par la quantité obtenue. Après un peu de calcul, il vient :

$$w = \sqrt{\frac{2}{s_l}}\frac{1}{\sqrt{1+(1-2a)(3-2a)}}$$

et enfin :

$$x_0 = -\sqrt{\frac{2}{s_l}}\frac{\ln\left(\frac{1-a}{a}\right)}{\sqrt{1+(1-2a)(3-2a)}}$$

Application numérique, avec $a = 0,3$ et $s_l = 1$:

$$\begin{cases} s_{1c} = \dfrac{40}{9} \approx 4,44 \\ w = \sqrt{\dfrac{50}{49}} \approx 1,01 \\ x_0 = -\sqrt{\dfrac{50}{49}}\ln\left(\dfrac{7}{3}\right) \approx -0,86 \end{cases}$$

III.4.3 Arrêt du front par une zone sans réaction

Nous considérons maintenant le cas d'une zone sans réaction, modélisée par un créneau :

$$s(x) = \begin{cases} s_0 & \text{si} \quad x < 0 \\ 0 & \text{si} \quad 0 \leq x \leq x_1 \\ s_0 & \text{si} \quad x > x_1. \end{cases}$$

Nous posons la question de savoir quelle largeur minimale permet de stopper le front. Nous nommons cette largeur minimale x_{1c}, de sorte que l'on a la dichotomie suivante :

- si $x_1 < x_{1c}$, alors le front n'est pas arrêté par l'obstacle. Nous dirons que le front passe l'obstacle, ou qu'il continue à se propager.
- si $x_1 \geq x_{1c}$, alors le front est arrêté, épinglé dans la zone sans réaction. Le front ne se déplace plus, ni dans un sens ni dans l'autre, autrement dit sa vitesse de propagation décroît jusqu'à devenir nulle. Au cours de ce ralentissement, le front se déforme. A la limite, en temps grand, le front adopte un profil affine (solution de l'équation de la chaleur avec conditions de Dirichlet aux bords).

Nous résolvons ce problème d'une manière assez similaire à celle de la sous-section III.4.1 :

1. **Écriture du système d'équations vérifié pour la largeur critique**

   Partant du système (III.2) modifié pour un tel défaut, et écrivant que le front s'arrête :

   $$\dot{x_0} = 0,\ \dot{w} = 0$$

   on obtient :

   $$\begin{cases} w\ s_0\left(\displaystyle\int_{-\infty}^{\frac{-x_0}{w}} R_b(U(z))\ dz + \int_{\frac{x_{1c}-x_0}{w}}^{+\infty} R_b(U(z))\ dz\right) & = 0 \\ \dfrac{1}{3w} + w\ s_0\left(\displaystyle\int_{-\infty}^{\frac{-x_0}{w}} (1-2U(z))R_b(U(z))\ dz + \int_{\frac{x_{1c}-x_0}{w}}^{+\infty} (1-2U(z))R_b(U(z))\ dz\right) & = 0 \end{cases}$$

système que nous écrivons pour plus de clarté :

$$\begin{cases} w\ s_0 \left(T_1\left(\frac{-x_0}{w}\right) + S_1\left(\frac{x_{1c}-x_0}{w}\right)\right) & = 0 \\ \frac{1}{3w} + w\ s_0 \left(T_2\left(\frac{-x_0}{w}\right) + S_2\left(\frac{x_{1c}-x_0}{w}\right)\right) & = 0 \end{cases}$$

On peut diviser la première équation par $w\ s_0$, et le front s'arrête lorsque les deux termes du membre de gauche s'équilibrent. Si l'on trace T_1, on se rend compte qu'il est toujours positif $\forall a \in [0, \frac{1}{2}]$:

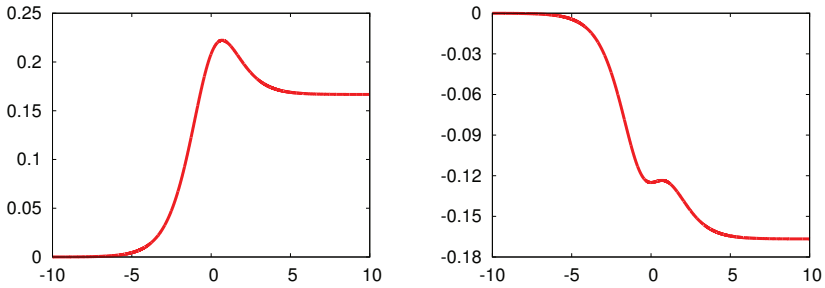


FIGURE III.15 – Tracés des termes sources T_1 et T_2 pour une zone sans réaction : $T_1(y) = \int_{-\infty}^{y} R_b(U(z))\ dz$ et $T_2(y) = \int_{-\infty}^{y} (1-2U(z))R_b(U(z))\ dz$ en fonction de la variable y. Ici on a choisi $a = \frac{1}{3}$.

Cela est clair aussi dans l'écriture suivante :

$$\begin{cases} T_1(y) = \dfrac{e^y(1+(1-2a)(1+e^y))}{2(1+e^y)^2} & \geq 0 \\ T_2(y) = -\dfrac{e^y(e^{2y}+3(1+(1-2a)(1+e^y))}{6(1+e^y)^3} & \leq 0 \end{cases}$$

Puisque $0 < a < \frac{1}{2}$, on a $T_1 \geq 0$ et $T_2 \leq 0$ (rappelons que les quatre premiers termes sources R_1, R_2, S_1 et S_2 peuvent changer de signe). Pour arriver à l'équilibre dans l'équation, il est nécessaire que $S_1\left(\frac{x_{1c}-x_0}{w}\right)$ contribue négativement. Cela est possible vu la forme de S_1 tracé en III.3. En effet, cette fonction admet un minimum strictement négatif. Au x_1 critique, on aura

$$T_1\left(\frac{-x_0}{w}\right) = -\min S_1$$

2. **Obtention des quantités $\frac{-x_0}{w}$ et $\frac{x_{1c}-x_0}{w}$ lors de l'arrêt du front**
   Nous avons déjà étudié les variations de S_1 à la sous-section précédente. Rappelons que l'on a :

$$z_{min} = \ln\left(\frac{1-a}{a}\right)$$

et

$$\min(S_1) = S_1(z_{min}) = \frac{1 - 2a(1 + \frac{1-a}{a})}{2(1 + \frac{1-a}{a})} = -\frac{a^2}{2}$$

On a donc

$$\frac{x_{1c} - x_0}{w} = z_{min} = \ln\left(\frac{1-a}{a}\right)$$

et on obtient ensuite l'expression, en fonction de a et $b_2 = \sqrt{1-2a}$, du rapport des deux coordonnées collectives à l'arrêt du front pour la valeur critique :

$$\frac{x_0}{w} = -\ln\left(-\frac{a + a^2 - 1 + b_2}{2a + a^2 - 1}\right),$$

grâce à la dernière équation, car $-\min(S_1)$ a un unique antécédent par T_1.

3. **Résolution des équations**

   En remplaçant les quantités $\frac{-x_0}{w}$ et $\frac{x_{1c}-x_0}{w}$ par leurs valeurs dans la seconde équation du système considéré, on peut résoudre et obtenir la largeur w du front lors de son arrêt :

$$w = \frac{1}{\sqrt{2s_0}}\sqrt{\frac{(b_2 - a)^3}{-1 + 3a - 8a^3 + 9a^4 + 7a^4 b_2 - 2ab_2 + b_2 - 3a^5 - 2a^3 b_2}},$$

   puis la largeur critique x_{1c}. Le critère d'arrêt s'écrit donc :

$$x_1 \geqslant x_{1c} = w\left(\ln\left(\frac{1-a}{a}\right) - \ln\left(-\frac{a + a^2 - 1 + b_2}{2a + a^2 - 1}\right)\right) \qquad \text{(III.16)}$$

Ici aussi, on vérifie que cette fonction de la variable a est décroissante sur $[0, \frac{1}{2}]$, avec limite infinie en 0, et bien sûr elle s'annule en $\frac{1}{2}$.

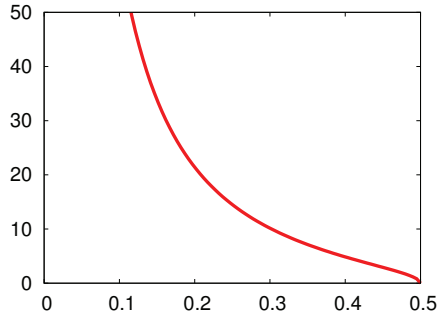


FIGURE III.16 – Tracé de $\sqrt{\frac{(b_2-a)^3}{-1+3a-8a^3+9a^4+7a^4b_2-2ab_2+b_2-3a^5-2a^3b_2}}\left(\ln\left(\frac{1-a}{a}\right) - \ln\left(-\frac{a+a^2-1+b_2}{2a+a^2-1}\right)\right)$

Cela est une preuve supplémentaire de la consistance du modèle standardisé.

Les valeurs données par ce critère sont en bon accord avec les observations des simulations numériques. Pour $s_0 = 1$, notre critère (III.16) donne $x_{1c} \approx 7,18$ (rappelons que l'on a $a = 0,3$). Numériquement, nous trouvons un arrêt à partir de $x_{1c} \approx 6,90$, ce qui donne une erreur inférieure à 4%.

III.4.4 Problème inverse

Une autre application directe du modèle en coordonnées collectives est de résoudre un *problème inverse*. En effet, on peut obtenir la *topographie* du défaut $s(x)$ à partir des observations de la position centrale du front x_0 et de sa largeur w. Nous illustrons cela avec l'exemple d'un défaut symétrique large de la forme (II.13), de paramètres $s_0 = 0,6,\ s_1 = 0,3,\ d = 10$. Précisons la démarche :

1. L'observation basique des valeurs en l'infini permet de trancher entre les cas symétrique et antisymétrique.
2. Disposant de $u(x,t)$ solution de (III.1), on utilise une approche par moindres carrés pour obtenir deux séries temporelles $x_0(t)$ et $w(t)$.
3. Avec les équations des coordonnées collectives (dans le cas adiabatique) (III.4), on obtient :
$$s(x_0) = \frac{2}{1-2a}\frac{\dot{x_0}}{w}. \tag{III.17}$$
4. Utilisant une approximation de différence centrée pour la dérivée temporelle, on obtient une estimation de $s(x_0)$.

Cette estimation est comparée au $s(x)$ réel en figure III.17.

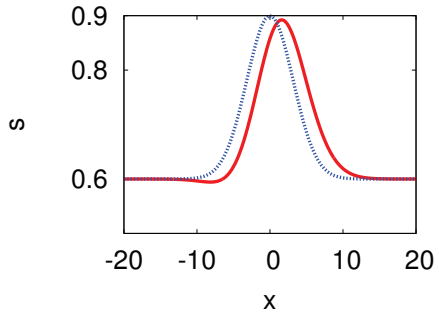


FIGURE III.17 – Estimation de la topographie du défaut $s(x)$ obtenue à partir de la solution de l'équation aux dérivées partielles. Cette estimation venue de (III.17) est présentée en trait pointillé (bleu), tandis que le $s(x)$ réel est en trait plein (rouge).

On peut voir que l'accord est très bon. Cette approche peut être étendue à d'autres types de défauts pour des applications physiques ou biologiques.

Ces deux exemples (critères pour l'arrêt du front, et estimation de défaut) illustrent la puissance du modèle standardisé, dans lequel le *rôle des paramètres*

x_0 et w est très facile à comprendre. En utilisant les équations de ce modèle, on peut :

- contrôler le front avec de bons réglages du défaut (lien avec la *théorie du contrôle*),
- résoudre des problèmes inverses à l'aide d'estimations ou de mesures de ces paramètres (par exemple dans le cadre d'une expérience).

Chapitre IV

Cas monostable

Abstract

We study in this chapter the monostable case. We emphasize the Ablowitz front and give as well a method to deal with any front. We give the system of ordinary differential equations, that we compare to the complete model. The specifically heterogeneous effect studied is secondary outbreak.

Résumé

Dans ce chapitre, nous étudions le cas d'une non-linéarité de type monostable. Le propos sera axé précisément sur le front dit d'Ablowitz, en donnant également les moyens de généraliser à tout type de front. Nous donnons les systèmes d'équations différentielles ordinaires, proposés ensuite à la comparaison avec le modèle complet. L'effet spécifique dû à un défaut localisé est ici l'éclosion secondaire.

Sommaire

IV.1 Dépendance en la condition initiale 77
IV.2 Comment faire l'étude approchée 78
IV.3 Simulations numériques 79
IV.3.1 Défaut large 80
IV.3.2 Défaut étroit 81
IV.3.3 Éclosions secondaires 82
IV.4 Étude exacte 84
IV.4.1 Défaut constant 85
IV.4.2 Vitesse de retour à l'équilibre 86
IV.4.3 Défaut large 87
IV.4.4 Défaut étroit 87
IV.4.5 Équation de Fisher–KPP avec le front de Huxley . 89

IV.5 Comparaison **90**
IV.6 Intérêt du modèle standardisé **91**

Dans ce chapitre, nous étudions les conséquences des résultats établis au chapitre II lorsque le terme de réaction est de la forme

$$R(u) = u(1-u),$$

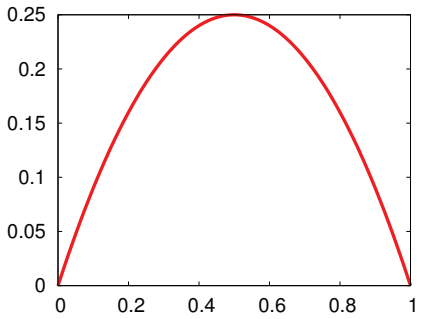


FIGURE IV.1 – Terme de réaction monostable.

ce qui donne l'équation suivante :

$$\partial_t u = \Delta u + s(x)\ u(1-u). \tag{IV.1}$$

Pour éviter les redondances avec le chapitre précédent, nous nous attacherons à séparer les ressemblances et les différences, en mettant en avant ces dernières. L'étude séparée du cas monostable est justifiée par le fait que l'état 0 est instable, et le lecteur averti ne manquera pas de garder cette remarque à l'esprit au cours de ce chapitre.

IV.1 Dépendance en la condition initiale

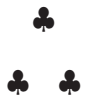
Comme nous l'avons vu en I.5.6, et à la différence du cas bistable, l'équation de Fisher–KPP est sensible à la condition initiale. Une condition initiale de type «front» évolue naturellement en front progressif ; et la vitesse de ce dernier dépend du profil de la condition initiale. Pour une large gamme de conditions initiales, il y a évolution vers le front de vitesse minimale, à savoir 2 pour l'équation (I.14). Quand a contrario on force l'équation avec une condition initiale de type

$$u_0(x) = \frac{1}{\left(1 + C_1\ \exp\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{6}}\right)\right)^2},$$

le front garde cette forme et avance à vitesse $\frac{5}{\sqrt{6}}$.

Nous avons concentré notre étude sur ces deux fronts, pour des raisons différentes. Le front de vitesse minimale est important en soi, car beaucoup de conditions initiales *naturelles* y mènent. Le front dit d'Ablowitz a lui l'avantage

d'être donné sous forme explicite, si bien que tous les calculs sont menés de manière exacte. Cela permet de donner des systèmes d'équations très semblables à ceux du chapitre III, et d'avoir à leur sujet une étude analytique permettant de discuter des effets des hétérogénéités. De plus, $\frac{5}{\sqrt{6}} \approx 2,04$ et est donc très proche de 2.



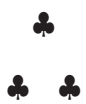
IV.2 Comment faire l'étude approchée

Nous avons annoncé en sous-section II.3.2 que l'on pouvait approcher un front se propageant en milieu hétérogène par un front connu uniquement sous forme numérique (et non explicite). Voici comment faire dans le détail :

1. **Définir position et largeur**
   En premier lieu, il est nécessaire de définir une position (centrale) et une largeur pour notre front. Naturellement, puisque nous considérons des fronts allant de 1 à 0, nous définissons la position comme l'abscisse du point d'ordonnée $\frac{1}{2}$. Ici, il n'y a pas le choix si l'on veut être cohérent ! Par contre, nous avons un choix à faire pour la largeur, et la définissons donc comme la différence d'abscisse entre les points d'ordonnées respectives $\frac{1}{2}$ et $\frac{1}{4}$ (ou $\frac{3}{4}$ et $\frac{1}{2}$).
2. **Attendre le temps d'établissement**
   A partir de $t = 0$, on va constater une évolution de x_0 et w tels que définis au paragraphe précédent. On peut calculer $c = \dot{x_0}$ à partir d'une différence finie (par exemple une différence à gauche si l'on veut être cohérent avec le chapitre III). Il suffit alors d'attendre le temps d'établissement, et on constate qu'il est atteint lorsque l'on a :

   $$\dot{c} = 0,\ \dot{w} = 0.$$

   Dès cet instant, on sait que le front est le front incident, tel que défini en 5.
3. **Sauvegarder le front**
   On peut donc sauvegarder ce front U qui servira à deux choses :
   – pour les temps ultérieurs, approcher les fronts par ce front U.
   – pour le modèle standardisé, calculer de manière approchée les intégrales faisant intervenir U et ses dérivées.



IV.3 Simulations numériques

Nous allons présenter dans cette section les résultats des simulations numériques pour les problèmes (II.15) et (II.16) lorsque le terme de réaction est de type monostable. Commençons par donner de manière synthétique les observations faites qui recouvrent celles du chapitre III :

1. Les fronts sont stables pour une large gamme de variations du défaut localisé $s(x)$.
2. Ici aussi, les fronts continuent d'exister avec une vitesse et une largeur qui se modifient au fur et à mesure que le front rencontre le défaut. Cela recouvre tout à fait l'analyse effectuée au chapitre II, et la justifie a posteriori.
3. Ici aussi, l'erreur normalisée E de la méthode des moindres carrés (voir (II.17)) est très faible ($< 10^{-5}$) dans toutes les simulations que nous présentons. Pour cette raison, l'approche par un front à la forme fixée U est très bonne.
4. Nous donnons dans le tableau suivant le maximum (lorsque t varie, mais une fois passé le temps d'établissement) des erreurs commises en approchant la solution exacte par le front donné par la méthode de gradient conjugué.

Simulation	1F0630	121120
Type	Symétrique large	Antisymétrique large
Erreur	$7,630.10^{-7}$	$6,044.10^{-7}$
Simulation	110103	121101
Type	Symétrique étroit petit	Antisymétrique étroit petit
Erreur	$7,140.10^{-5}$	$2,514.10^{-5}$

TABLE IV.1 – Erreurs commises lors de l'approche du front réel par un front à la forme fixée (front d'Ablowitz)

Nous résumons maintenant les points qui diffèrent par rapport au chapitre précédent. Nous en faisons ici une liste où nous expliquons qualitativement ce qui se passe, avant de montrer les simulations correspondantes, puis d'expliquer comment cela se retrouve dans l'analyse du modèle standardisé en IV.4.

1. Il n'y a d'arrêt du front pour aucun type de défaut considéré (symétrique étroit, antisymétrique étroit, zone sans réaction large). Notre modèle ne permet pas d'arrêter des fronts pour un terme de réaction monostable.
2. A contrario, il apparaît un nouveau phénomène que nous avons appelé *éclosion secondaire*. Nous allons expliquer ce phénomène, et pointer à nouveau la pertinence de la classification des défauts en larges et étroits.
3. En conséquence, le modèle standardisé est mis en échec.

4. Globalement, les fronts considérés ont tout de même moins de stablité que dans le cas bistable (on rappelle que 0 est instable ici).

IV.3.1 Défaut large

Nous montrons dans cette section les résultats des simulations lorsque le front incident rencontre un défaut large tel que défini en II.2.3.

Symétrique

Tout d'abord, nous voyons en figure IV.2 le mouvement d'un front rencontrant un défaut symétrique large

$$s(x) = s_0 + s_1 \exp\left(\frac{-x^2}{2d}\right),$$

c'est-à-dire que nous avons $\frac{w}{d} \ll 1$, autrement dit $\sqrt{\frac{6}{s_0}} \ll d$. Nous voyons la façon qu'a un front incident de passer un tel défaut large. Tout d'abord, il accélère tout en s'élargissant (en fait, l'avant du front accélère, mais pas encore l'arrière). Dans un deuxième temps, il se contracte en ayant encore une toute petit phase d'accélération, puis une longue phase de décélération (l'arrière du front s'est mis à accélérer à son tour). Enfin, il retrouve ses valeurs d'avant le passage du défaut.

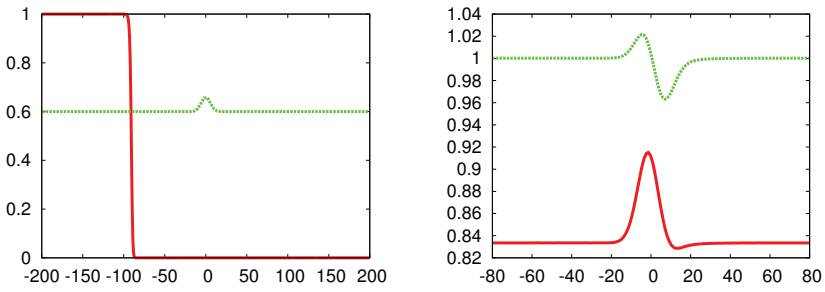


FIGURE IV.2 – Mouvement adiabatique d'un front. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x, 0)$ en trait continu (rouge) avec le défaut (mis à l'échelle) $s(x)/10$ en trait pointillé (vert). Le panneau de droite montre la vitesse (mise à l'échelle) $\dot{x_0}/6$ et la largeur w du front en fonction de la position centrale x_0. Les paramètres sont $s_0 = 6$, $s_1 = 0,6$ et $d = 30$.

Antisymétrique

Pour un défaut antisymétrique

$$s(x) = s_l + \frac{s_r - s_l}{2}\left(1 + \tanh\frac{x}{d}\right),$$

nous avons un comportement similaire tant que la condition $\frac{w}{d} \ll 1$ est vérifiée. On peut le voir sur la figure IV.3.

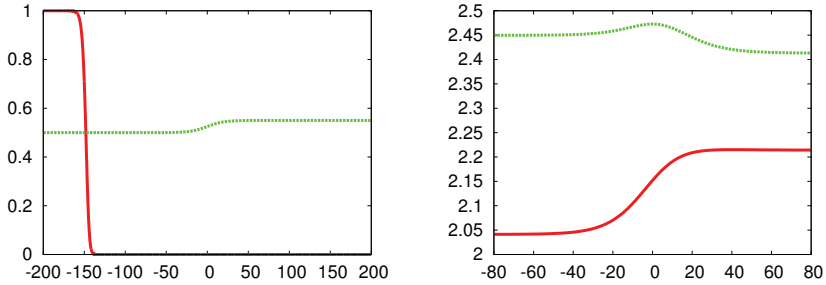


FIGURE IV.3 – Mouvement adiabatique d'un front. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x, 0)$ en trait continu (rouge) avec le défaut (mis à l'échelle) $s(x)/2$ en trait pointillé (vert). Le panneau de droite montre la vitesse $\dot{x_0}$ et la largeur w du front en fonction de la position centrale x_0. Les paramètres sont $s_l = 1$, $s_r = 1,1$ et $d = 20$.

Le front atteint ses valeurs de droite de façon presque monotone. Comme dans l'exemple précédent, le mouvement est ici adiabatique.

IV.3.2 Défaut étroit

Considérons maintenant l'autre cas-limite, à savoir celui où $\frac{w}{d} \gg 1$, autrement dit $\sqrt{\frac{6}{s_0}} \gg d$, mais restons dans le cas de défauts petits dans un premier temps.

Symétrique

On commence par un défaut symétrique présenté en figure IV.4, qui vérifie $\frac{s_1}{s_0} \ll 1$.

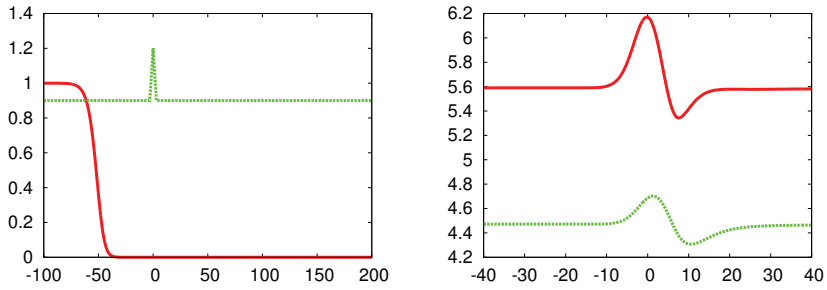


FIGURE IV.4 – Mouvement d'un front qui rencontre un défaut symétrique étroit mais petit. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x,0)$ en trait continu (rouge) avec le défaut (mis à l'échelle) $3s(x)$ en trait pointillé (vert). Le panneau de droite montre la vitesse (mise à l'échelle) $5\dot{x}_0$ et la largeur w du front en fonction de la position centrale x_0. Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 0,1$ et $d = 0,3$.

Antisymétrique

On présente ensuite un défaut antisymétrique.

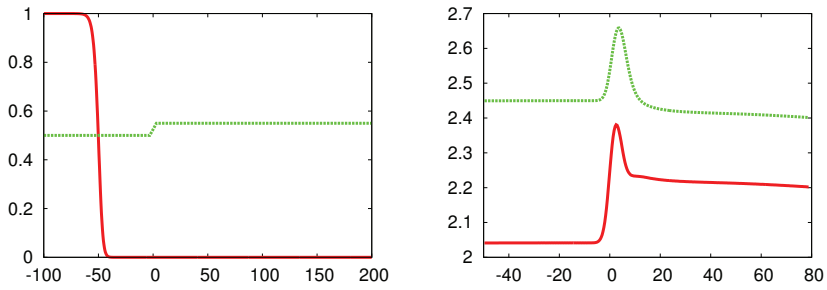


FIGURE IV.5 – Mouvement d'un front qui rencontre un défaut antisymétrique étroit mais petit. Le panneau de gauche montre le front incident $u(x,0)$ en trait continu (rouge) avec le défaut (mis à l'échelle) $s(x)/2$ en trait pointillé (vert). Le panneau de droite montre la vitesse $\dot{x}_0$ et la largeur w du front en fonction de la position centrale x_0. Les paramètres sont $s_l = 1$, $s_r = 1,1$ et $d = 0,1$.

On voit qu'ici le front met plus de temps à revenir aux valeurs correspondant à $s = 1,1$ après le défaut. La dynamique de cette équation est plus lente que celle correspondant au cas bistable, comme nous le montrerons en sous-section IV.4.2.

IV.3.3 Éclosions secondaires

En nous limitant à des défauts petits à la section précédente, nous avons sciemment repoussé l'étude des défauts grands. En effet, nous allons voir main-

tenant que de tels défauts donnent lieu à un nouveau phénomène non encore rencontré jusqu'ici. En guise d'illustration, nous proposons la figure IV.6.

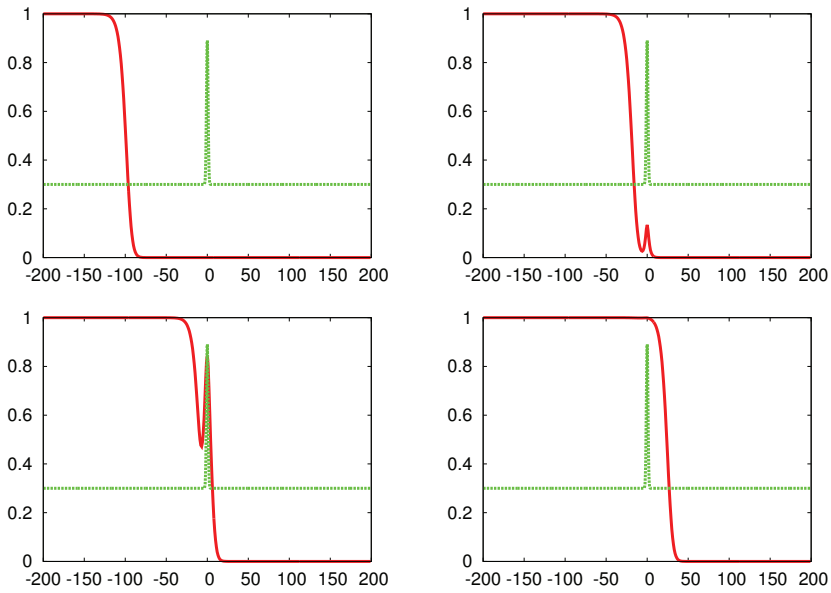


FIGURE IV.6 – Mouvement d'un front qui rencontre un défaut symétrique étroit et grand. Les quatre figures montrent l'évolution à des temps croissants : t_0 en haut à gauche, t_1 en haut à droite, t_2 en bas à gauche et t_3 en bas à droite. À chaque fois, le front est en trait continu (rouge) avec le défaut $s(x)$ en trait pointillé (vert). Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 0,6$ et $d = 1$.

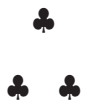
Ce qui se passe ici est que le front incident rencontre une zone où la réactivité s est plus élevée. Ainsi, il y a excitation de l'état 0 à l'avant du front, et puisque cet état est *instable*, cette excitation donne naissance à une évolution spontanée, *en avant du front*. Cette évolution spontanée a la forme d'une «bosse» et s'ajoute au front. On propose de l'appeler *éclosion secondaire*, par opposition au front incident vu comme l'éclosion primaire.

Ainsi, la solution globale n'est plus un front (elle n'est plus monotone), mais un front et une bosse qui interagissent (on peut parler de 3-front). Leur interaction est cependant limitée, et nous pensons que l'évolution de ces deux objets mathématiques se fait quasiment indépendamment l'une de l'autre. D'une part, on a le front incident qui avance comme s'il était en milieu homogène, et d'autre part l'éclosion secondaire naissante évolue en regard de son environnement *local*. Cela est dû au fait que les fronts ont des dérivées à décroissance rapide au voisinage de l'infini, et qu'il n'y a pas d'évolution au voisinage de $u = 1$ ou $u = 0$.

Nous posons donc comme conjecture que l'évolution de ce 3-front est quasiment la somme des évolutions du front incident en milieu homogène et de

l'éclosion secondaire avec une diffusivité localement plus forte (quasi-linéarité). En conclusion, on peut dire que l'on a rencontré un effet

- spécifiquement dû à l'hétérogénéité,
- nouveau,
- qui met en échec le modèle standardisé (nous allons y revenir),
- mais qu'on sait contrôler (le défaut doit être *grand et étroit*),
- et dont on imagine pouvoir prédire l'évolution.



IV.4 Étude exacte

Nous venons de montrer que le front d'Ablowitz se capture très bien numériquement. Nous n'avons pas insisté dessus au cours de l'exposé, mais il est notable que ce front soit même mieux approché par notre procédure que le front de Huxley pour le cas bistable (voir les tableaux d'erreurs III.1 et IV.1 pour comparaison). Nous nous plaçons donc dans le cas où l'on capture un front dit d'Ablowitz, par une condition initiale de type

$$u_0(x) = \frac{1}{\left(1 + C_1 \ \exp\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{6}}\right)\right)^2}.$$

L'étude exacte commence par l'analyse en coordonnées collectives. Ici, il est légitime de chercher U sous la forme $U(z) = \frac{1}{(1+(\sqrt{2}-1)\ \exp(z))^2}$, puisqu'il s'agit précisément de la valeur de U en milieu homogène. Alors on peut faire les calculs pour les intégrales :

$$\begin{cases} J_1 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\ dz & = -1 \\ J_2 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U'(z)\ dz & = 1 \\ J_4 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ U'(z)\ dz & = -\frac{1}{2} \\ J_5 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U(z)\ U'(z)\ dz & = \frac{11}{12} \\ J_7 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'^2(z)\ dz & = \frac{1}{5} \\ J_8 = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} z\ U'^2(z)\ dz & = -\frac{1}{6} \end{cases}$$

On a de plus :

$$\begin{cases} J_{10} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} R_m(U(z))\ dz & = \dfrac{5}{6} \\ J_{11} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U(z)\ R_m(U(z))\ dz & = \dfrac{9}{20} \\ J_{12} = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} U'(z)\ R_m(U(z))\ dz & = -\dfrac{1}{6} \end{cases}$$

Les équations sont donc, en toute généralité concernant le défaut, données ci-après. Rappelons encore une fois que cette démarche vaut pour le front d'Ablowitz ($c = \frac{5}{\sqrt{6}}$), et qu'un équivalent est possible pour le front de vitesse minimale, avec des calculs numériques (nous appelons cette démarche l'étude *approchée*).

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{w}{5}(11J_3 - 12J_6) \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{6w}{5}(J_3 - 2J_6) \\ 5\dot{w} - 6\dot{x_0} = 30wJ_9 \end{cases}$$

Si nous retenons uniquement les deux premières équations, et si nous rappelons les définitions de J_3 et J_6, nous obtenons :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{w}{5}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} s(wz + x_0)\ (11 - 12U(z))\ R_m(U(z))\ dz \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{6w}{5}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} s(wz + x_0)\ (1 - 2U(z))\ R_m(U(z))\ dz \end{cases} \tag{IV.2}$$

Au cours de notre travail numérique, nous avons utilisé ce système. Plus loin, nous montrerons la comparaison des résultats obtenus par son entremise et des résultats obtenus par la résolution de l'équation aux dérivées partielles de départ suivie de la procédure d'approche par moindres carrés.

IV.4.1 Défaut constant

Un défaut constant est de la forme $s(x) \equiv s_0$. Alors on peut dire que

$$J_3 = s_0 J_{10} = \frac{5s_0}{6}$$
$$J_6 = s_0 J_{11} = \frac{9s_0}{20}$$
$$J_9 = s_0 J_{12} = -\frac{s_0}{6}$$

Le système devient :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{113 s_0 w}{150} \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} - \dfrac{2 s_0 w}{25} \\ 5\dot{w} - 6\dot{x_0} = -5 s_0 w \end{cases}$$

En remplaçant $\dot{x_0}$ et $\dot{w}$ par leurs valeurs dans la troisième équation, on trouve

$$\frac{12}{5w} - \frac{2 s_0 w}{5} - \frac{72}{25w} - \frac{113 s_0 w}{25} = -5 s_0 w,$$

soit

$$-\frac{12}{25} = \frac{2 s_0 w^2}{25},$$

d'où $w = \sqrt{\frac{6}{s_0}}$ puis $\dot{x_0} = 5\sqrt{\frac{s_0}{6}}$ et $\dot{w} = 0$ en reportant dans les première et deuxième équations. A noter qu'il n'est donc pas nécessaire de supposer $\dot{w} = 0$ pour pouvoir résoudre ces équations (à la différence de ce que l'on a fait en III.1.1), mais qu'au contraire $\dot{w} = 0$ en est une conséquence. On retrouve les valeurs d'Ablowitz vues en I.5.6.

IV.4.2 Vitesse de retour à l'équilibre

Partant du système précédent, on procède à une analyse d'une perturbation autour de l'équilibre ($\dot{x_0}^* = 5\sqrt{\frac{s_0}{6}}, w^* = \sqrt{\frac{6}{s_0}}$). Il vient en différentiant

$$\begin{cases} \delta\dot{x_0} = -\dfrac{12}{25 w^{*2}}\delta w + \dfrac{113 s_0 \delta w}{150} = \dfrac{101 s_0}{150}\delta w \\ \delta\dot{w} = -\dfrac{12}{25 w^{*2}}\delta w - \dfrac{2 s_0 \delta w}{25} = -\dfrac{4 s_0}{25}\delta w \end{cases}$$

Donc

$$\begin{pmatrix} \delta\dot{x_0} \\ \delta\dot{w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{101 s_0}{150} \\ 0 & \frac{-4 s_0}{25} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x_0 \\ \delta w \end{pmatrix}$$

On résoud en $\delta w = e^{-\frac{4 s_0}{25} t}$, puis $\delta x_0 = -\frac{101}{24} e^{-\frac{4 s_0}{25} t}$. Le temps caractéristique de retour à l'équilibre, vaut ici $\frac{25}{4 s_0}$. Il est (un peu plus de) deux fois plus grand que dans le cas bistable, autrement dit la vitesse de retour à l'équilibre est deux fois plus petite. On pourrait se dire que ce n'est pas une différence cruciale ; il y a cependant d'autres considérations qui font que la stabilité dans le cas monostable est globalement moins bonne que dans le cas bistable.

IV.4.3 Défaut large

Comme vu au chapitre III, dans le cas d'un défaut large, la plus grossière approximation que l'on puisse réaliser à partir de (IV.2) donne :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{113w}{150} s(x_0) \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} - \dfrac{2w}{25} s(x_0) \end{cases} \tag{IV.3}$$

Les remarques faites plus haut restent valables.

- Ces équations justifient que l'on puisse parler d'une *vitesse locale* et d'une *largeur locale* du front. En effet, la dépendance de ces coordonnées collectives en s n'apparaît que via $s(x_0)$, c'est-à-dire via la valeur de s en le centre du front x_0, et en *aucun autre point*.
- Lorsque s est constante, nous retrouvons les résultats (I.18), (I.19).
- Il est aussi possible ici que le défaut soit étendu *vers la droite*. La seule condition requise est que le front incident soit en régime établi avant d'atteindre le défaut (plus précisément avant d'atteindre la zone où $s' \neq 0$).

Notons que cette approximation peut encore être affinée en utilisant un développement de Taylor : $s(x_0 + wz) \approx s(x_0) + wzs'(x_0)$. Alors les équations deviennent :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{113w}{150} s(x_0) - \dfrac{w^2}{10} s'(x_0), \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} - \dfrac{2w}{25} s(x_0) + \dfrac{9w^2}{10} s'(x_0). \end{cases}$$

IV.4.4 Défaut étroit

Cas d'un défaut «Dirac»

Le premier défaut étudié en détail est modélisé par une distribution de Dirac : $s(x) = s_0 + s_1\delta(x)$. Dans ce cas, (IV.2) donne :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{113 s_0 w}{150} + \dfrac{s_1}{5}\left(11 - 12U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) R_m\left(U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} - \dfrac{2 s_0 w}{25} + \dfrac{6 s_1}{5}\left(1 - 2U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) R_m\left(U\left(\dfrac{-x_0}{w}\right)\right) \end{cases} \tag{IV.4}$$

Les termes sources sont donnés par :

$$\begin{cases} (11 - 12U(z))\ R_m(U(z)) = \dfrac{e^z(2+e^z)(11(1+e^z)^2 - 12)}{(1+e^z)^6}, \\ (1 - 2U(z))\ R_m(U(z)) = \dfrac{e^z(2+e^z)(-1+2e^z+e^{2z})}{(1+e^z)^6}, \end{cases} \tag{IV.5}$$

Ils sont représentés en figure IV.7.

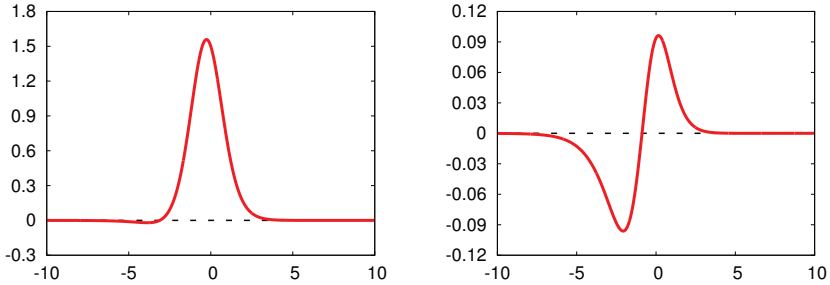


FIGURE IV.7 – Tracés des termes sources pour un «Dirac» : $(11-12U(z))\ R_m(U(z))$ (à gauche) et $(1-2U(z))\ R_m(U(z))$ (à droite) en fonction de la variable z.

On peut faire un certain nombre de remarques à propos de ces termes sources, qui mettront en évidence notamment les différences par rapport au chapitre III. D'abord, notons que les deux termes $(11-12U(z))\ R_m(U(z))$ et $(1-2U(z))\ R_m(U(z))$ ne sont toujours pas symétriques, cependant le premier l'est *presque*. Puisque $(11-12U(z))\ R_m(U(z))$ est largement positif, un défaut cause une accélération du front pour $s_1 > 0$. La zone négative est très petite, et de plus se trouve uniquement dans $\mathbb{R}_-$, de telle sorte que *l'arrêt du front n'est pas possible*. Il ne s'est produit dans aucune de nos simulations. Quant au second terme source, il est presque impair. Pour $s_1 > 0$, on observera une augmentation de la largeur du front incident avant l'obstacle, puis sa diminution après.

Cas d'un défaut «Heaviside»

L'autre défaut étroit que nous étudions est modélisé par $s(x) = s_l + (s_r - s_l)H(x)$ où $H(x)$ est la fonction de Heaviside. À partir de (IV.2), le système d'équations se réduit à :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = \dfrac{12}{25w} + \dfrac{113 s_l w}{150} + \dfrac{(s_r - s_l)w}{5} \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} (11-12U(z))R_m(U(z))dz \\ \dot{w} = \dfrac{12}{25w} - \dfrac{2 s_l w}{25} + \dfrac{6(s_r - s_l)w}{5} \displaystyle\int_{\frac{-x_0}{w}}^{+\infty} (1-2U(z))R_m(U(z))dz \end{cases} \tag{IV.6}$$

Les termes sources sont ici aussi calculables de manière explicite :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_y^{\infty} (11-12U(z))\ R_m(U(z))dz = \frac{113 + 5e^y(125 + 11e^y(11+3e^y))}{30(1+e^y)^5}, \\ \displaystyle\int_y^{\infty} (1-2U(z))\ R_m(U(z))dz = \frac{-2 + 5e^y(2+e^y)(5+3e^y)}{30(1+e^y)^5}. \end{cases} \tag{IV.7}$$

On les trace en figure IV.8.

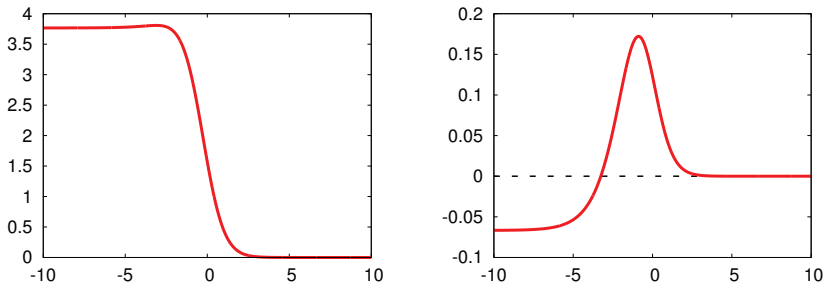


FIGURE IV.8 – Tracés des termes sources pour un « Heaviside » : $\int_y^\infty (11-12U(z))\ R_m(U(z))\ dz$ (à gauche) et $\int_y^\infty (1-2U(z))\ R_m(U(z))\ dz$ (à droite) en fonction de la variable z.

Concernant les comportements asymptotiques, ils sont qualitativement les mêmes que dans le cas bistable, à savoir que (si $s_r - s_l > 0$) la vitesse augmente et la largeur diminue. Ici, l'évolution de la vitesse est plus simple, et quasiment monotone (même s'il y a un léger dépassement de la valeur limite à droite avant de l'atteindre). L'évolution de la largeur est très différente du cas bistable, car on a une forte augmentation avant de diminuer. Enfin, l'arrêt du front n'est pas non plus possible avec ce type de défaut (alors qu'il l'était dans le cas bistable).

IV.4.5 Équation de Fisher–KPP avec le front de Huxley

Le fait que notre résultat (II.21) soit donné indépendamment de U incite à faire des tentatives de profil pour une équation donnée. Ainsi, que se passe-t-il si on garde $R_m(u) = u(1-u)$ et que l'on essaye $U_1(z) = \frac{1}{1+\exp(z)}$? On obtient pour le cas homogène le système suivant

$$\begin{cases} \dot{x_0} = w\ sJ_{10} \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} + w\ s(J_{10} - 2J_{11}) \end{cases}$$

soit encore :

$$\begin{cases} \dot{x_0} = w\ s \\ \dot{w} = \dfrac{1}{3w} \end{cases}$$

et cela ne marche pas car alors w diverge. Attention, J_{10} et J_{11} ne sont ni les intégrales du chapitre III, ni celles de ce chapitre, mais elles sont mixtes :

$$\begin{cases} J_{10} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}} R_m(U_1(z))\ dz = \int_{\mathbb{R}} R_m\left(\frac{1}{1+\exp(z)}\right)\ dz \\ J_{11} = \displaystyle\int_{\mathbb{R}} U_1(z) R_m(U_1(z))\ dz = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{1+\exp(z)} R_m\left(\frac{1}{1+\exp(z)}\right)\ dz. \end{cases}$$

Elles valent

$$\begin{cases} J_{10} = 1 \\ J_{11} = \dfrac{1}{2}. \end{cases}$$

Ainsi notre résultat (II.21) trouve-t-il une application amusante, même dans le simple cas homogène : il permet de savoir si un profil candidat est approprié pour une équation donnée. Ici, puisqu'on a un échec grossier pour l'évolution de w, on peut conclure rapidement.



IV.5 Comparaison

La dernière section de ce chapitre est consacrée à la comparaison des modèles complet et standardisé, dans le cas où ce dernier n'est pas mis en échec. À la lumière des résultats vus plus haut, nous savons qu'il nous faudra nous limiter aux défauts

- larges ou
- étroits et petits.

Nous présentons d'abord le cas d'un défaut symétrique large en figure IV.9. Le modèle standardisé prévoit très bien les valeurs limites, avant et après le défaut. Il est en parfait accord avec le modèle complet (l'équation aux dérivées partielles). Le modèle standardisé prévoit bien le comportement global de la solution, toutefois il est moins précis dans les détails que le même modèle dans le cas bistable.

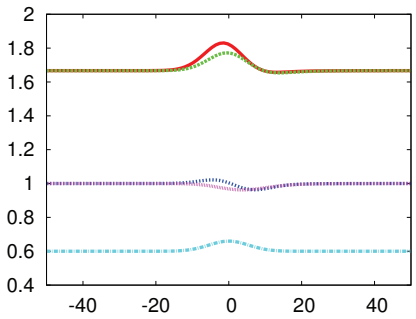


FIGURE IV.9 – Mouvement adiabatique d'un front. Comparaison entre les évolutions des vitesses et largeurs pour les deux modèles. Les paramètres sont $s_0 = 6$, $s_1 = 0,6$ et $d = 30$.

Pour finir, nous montrons le cas d'un défaut symétrique étroit et petit en figure IV.10.

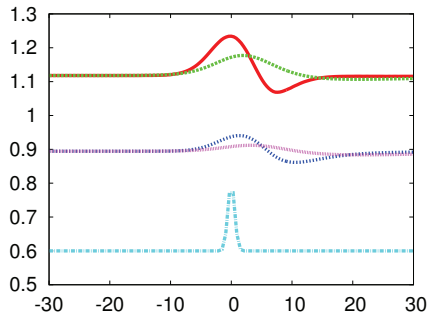


FIGURE IV.10 – Mouvement d'un front qui rencontre un défaut symétrique étroit mais petit. Comparaison entre les évolutions des vitesses et largeurs pour les deux modèles. Les paramètres sont $s_0 = 0,3$, $s_1 = 0,1$ et $d = 0,3$.

Les défauts antisymétriques présentent les mêmes résultats, c'est pourquoi nous n'avons pas jugé utile de présenter les figures correspondantes.

IV.6 Intérêt du modèle standardisé

Les avantages qui sont les mêmes que ceux du chapitre précédent sont
- le gain de temps de calcul,
- la bonne précision d'approximation (quoique sensiblement inférieure à celle du cas bistable),
- l'explicitation des paramètres dans les systèmes d'équations,
- la compréhension des évolutions de x_0 et w divisées en contributions intrinsèques et extrinsèques.

Le modèle standardisé dans le cas monostable se prête aussi à une résolution de problème inverse. Ici, il n'y a aucune différence avec le cas bistable, et donc nous renvoyons au chapitre III pour le détail.

Chapitre V

Généralisation : plusieurs dimensions, plusieurs composants

Abstract

We show in this conclusive chapter two generalizations of our results. First in higher dimension, and then for multiple components. As a conclusion, we give an outline of the work in progress.

Résumé

Dans ce dernier chapitre, nous proposons deux généralisations de nos résultats. Tout d'abord, de manière essentiellement descriptive, en dimension deux. Ensuite à plusieurs composants, en donnant notamment les équations d'évolution issues des lois d'équilibre. Nous terminons en donnant quelques perspectives.

Sommaire

V.1 En dimension supérieure 94
V.1.1 Simulations 94
V.2 Modèles SIR 96
V.2.1 Analyse en coordonnées collectives 97

V.1 En dimension supérieure

Nous proposons dans cette section de présenter sous une forme essentiellement descriptive les généralisations de nos résultats pour la dimension deux. Nous considérons ainsi l'équation suivante :

$$\begin{cases} \partial_t u = \Delta u + s(\mathbf{x})\ R(u), \quad t > 0, \quad u = u(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2, \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}). \end{cases} \tag{V.1}$$

Nous prenons des conditions initiales u_0 dans un ensemble de conditions admissibles, par exemple des fonctions à support compact, positives et bornées par 1.

L'étude peut considérer au moins deux types de fronts intéressants, les fronts sphériques et les fronts planaires. Les premiers sont fonctions du rayon $u(\mathbf{x}, t) = \tilde{u}(r, t)$ où r est la norme euclidienne de $\mathbf{x}$, les seconds sont fonctions d'une coordonnée, par exemple x dans un repère bien choisi $u(\mathbf{x}, t) = \tilde{u}(x, t)$. Nous nous limitons ici aux fronts sphériques.

V.1.1 Simulations

Pour notre étude numérique, nous avons utilisé le logiciel de résolution par éléments finis de systèmes d'équations aux dérivées partielles COMSOL.En pratique, les simulations ont été faites dans un rectangle avec des conditions aux limites de Neumann. Le nombre d'éléments est d'environ 10000. Il est à noter qu'une bonne discrétisation spatiale est essentielle pour obtenir des résultats fiables dans le cas monostable. Ceci est probablement dû à l'instabilité de l'état 0.

Nous avons retrouvé les effets spécifiquement dûs aux hétérogénéités étudiés aux chapitres précédents, à savoir l'arrêt du front pour le cas bistable et l'apparition d'éclosions secondaires pour le cas monostable.

Cas bistable

L'arrêt du front est rendu possible par :

1. des défauts symétriques ou antisymétriques étroits,
2. des zones sans réaction, ce que nous illustrons en figure V.1.

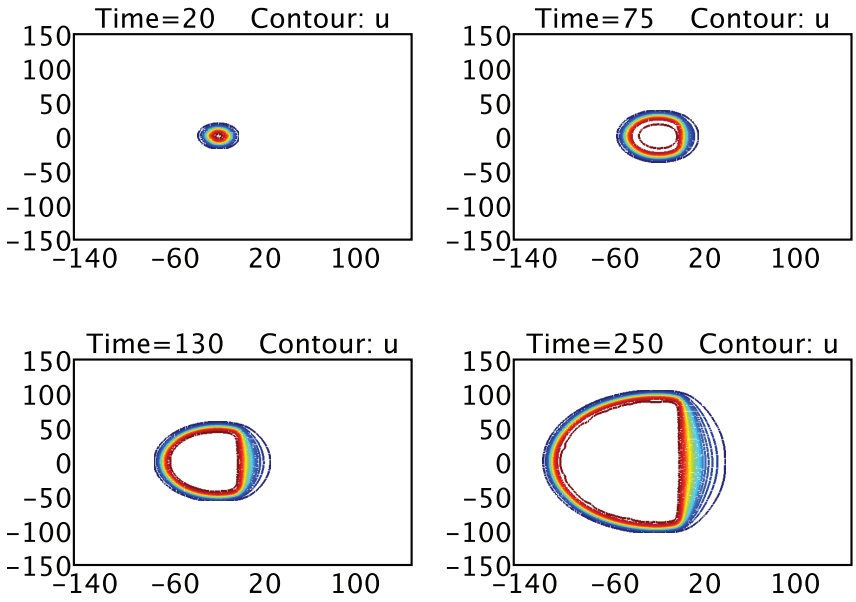


FIGURE V.1 – Mouvement d'un front qui rencontre une zone sans réaction de type «bande» : $0 \leq x \leq d$. Les quatre figures montrent les lignes de niveaux tracées à des temps croissants : t_0 en haut à gauche, t_1 en haut à droite, t_2 en bas à gauche et t_3 en bas à droite. Les paramètres sont $s_0 = 0,5$ et $d = 40$.

On voit clairement le front s'arrêter : il n'y a pas de propagation dans la région de droite.

Cas monostable

Lorsque le terme de réaction est du type Fisher–KPP,

1. il n'y a au contraire pas d'arrêt du front,

2. mais des éclosions secondaires dans le cas de défauts étroits et grands. Nous donnons une figure illustrant ce phénomène en V.2.

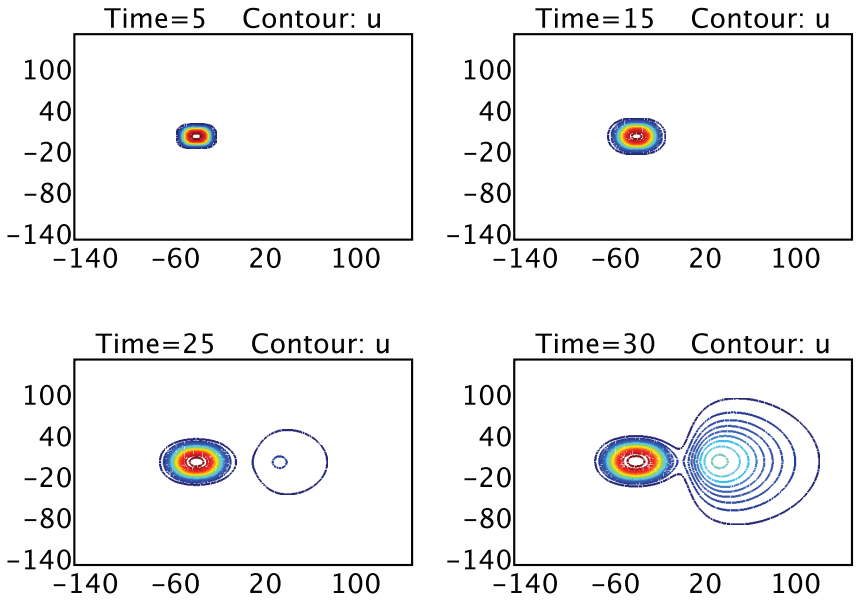


FIGURE V.2 – Mouvement d'un front qui rencontre un défaut antisymétrique étroit. Les quatre figures montrent les lignes de niveaux tracées à des temps croissants : t_0 en haut à gauche, t_1 en haut à droite, t_2 en bas à gauche et t_3 en bas à droite. Les paramètres sont $s_l = 0,3$ et $s_r = 0,6$.



V.2 Modèles SIR

Le modèle SIR est un modèle classique utilisé en épidémiologie. Il tire son nom des classes de populations considérées, les susceptibles, les infectés, et les rétablis. Dans un cas simple, on peut considérer la taille de la population constante ($s + i + r = n$) si bien que l'on écrit seulement l'évolution des deux premiers composants :

$$\begin{cases} \partial_t s = -f(i,s) \\ \partial_t i = f(i,s) - \beta i, \end{cases} \tag{V.2}$$

étant entendu que $\partial_t r = \beta i$. On peut avoir $f(i,s) = \alpha si$ par exemple, α et β étant des constantes positives.

Si on autorise les populations à se déplacer (avec même diffusivité), on ob-

tient le modèle suivant :

$$\begin{cases} \partial_t s = \Delta s - f(i,s) \\ \partial_t i = \Delta i + f(i,s) - \beta i \end{cases} \tag{V.3}$$

Si maintenant on veut considérer des modèles tenant compte de l'environnement, on peut

- découper la population en classes [Boa+10] de façon similaire à (II.1). On donne un exemple simple pour deux classes :

$$\begin{cases} \partial_t s_1 = - f_1(i_1, s_1, i_2) \\ \partial_t i_1 = f_1(i_1, s_1, i_2) - \beta i_1 \\ \partial_t s_2 = - f_2(i_2, s_2, i_1) \\ \partial_t i_2 = f_2(i_2, s_2, i_1) - \beta i_2 \end{cases} \tag{V.4}$$

  On peut avoir $f_1(i_1, s_1, i_2) = s_1(\alpha_1 i_1 + \alpha_{2\to 1} i_2)$ et $f_2(i_2, s_2, i_1) = s_2(\alpha_2 i_2 + \alpha_{1\to 2} i_1)$.
- faire la même chose avec des laplaciens

$$\begin{cases} \partial_t s_1 = \Delta s_1 - f_1(i_1, s_1, i_2) \\ \partial_t i_1 = \Delta i_1 + f_1(i_1, s_1, i_2) - \beta i_1 \\ \partial_t s_2 = \Delta s_2 - f_2(i_2, s_2, i_1) \\ \partial_t i_2 = \Delta i_2 + f_2(i_2, s_2, i_1) - \beta i_2 \end{cases} \tag{V.5}$$

- écrire simplement le modèle suivant, qui se rapproche de notre étude des chapitres II, III, IV :

$$\begin{cases} \partial_t s = \Delta s - f(i,s,x) \\ \partial_t i = \Delta i + f(i,s,x) - \beta(x) i \end{cases} \tag{V.6}$$

  On peut avoir $f(i,s,x) = \alpha(x) si$.

V.2.1 Analyse en coordonnées collectives

Nous esquissons dans cette section l'analyse que l'on peut mener sur le système (V.6).

De manière générale, on peut supposer que l'on a besoin de deux positions et de deux largeurs pour approcher finement les variations du front :

$$s(x,t) = S\left(\frac{x - x_0}{w_0}\right), i(x,t) = I\left(\frac{x - x_1}{w_1}\right),$$

ce qui donne les formules de changement de variable suivantes :

$$S(z) = s\left(w_0\, z + x_0, t\right), I(z) = i\left(w_1\, z + x_1, t\right).$$

Il nous faudra donc *quatre* lois d'équilibre pour obtenir l'évolution de ces quatre coordonnées collectives. De manière similaire au chapitre II, on calcule les dérivées partielles de s et i en fonction des dérivées de S et I :

$$\begin{aligned}
\partial_t s &= -\frac{1}{w_0}\left(\dot{x_0} + \frac{\dot{w_0}(x-x_0)}{w_0}\right) S'\left(\frac{x-x_0}{w_0}\right) \\
\partial_x s &= \frac{1}{w_0} S'\left(\frac{x-x_0}{w_0}\right) \\
\Delta s &= \frac{1}{w_0^2} S''\left(\frac{x-x_0}{w_0}\right).
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\partial_t i &= -\frac{1}{w_1}\left(\dot{x_1} + \frac{\dot{w_1}(x-x_1)}{w_1}\right) I'\left(\frac{x-x_1}{w_1}\right) \\
\partial_x i &= \frac{1}{w_1} I'\left(\frac{x-x_1}{w_1}\right) \\
\Delta i &= \frac{1}{w_1^2} I''\left(\frac{x-x_1}{w_1}\right).
\end{aligned}$$

Nous donnons directement les résultats obtenus pour le premier groupe de lois d'équilibre (provenant des équations inchangées). Tout d'abord, en intégrant la première équation de (V.6) :

$$-\dot{x_0}\int_{-\infty}^{+\infty} S'(z)\,dz - \dot{w_0}\int_{-\infty}^{+\infty} zS'(z)\,dz = -w_0\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(w_0\,z+x_0)S(z)I\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0-x_1}{w_1}\right)\,dz,$$

puis en intégrant la seconde :

$$\begin{aligned}
&-\dot{x_1}\int_{-\infty}^{+\infty} I'(z)\,dz - \dot{w_1}\int_{-\infty}^{+\infty} zI'(z)\,dz \\
&= w_0\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(w_0\,z+x_0)S(z)I\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0-x_1}{w_1}\right)\,dz - w_1\int_{-\infty}^{+\infty} \beta(w_1\,z+x_1)I(z)\,dz.
\end{aligned}$$

Notons qu'il a fallu être astucieux dans les changements de variable aux seconds membres. Ces lois d'équilibre sont moins satisfaisantes que celle obtenue lorsque nous n'avions qu'un composant. Elles présentent toutefois un intérêt dans deux cas majeurs :

1. tout d'abord, dans le cas de défauts bien particuliers qui simplifieront l'intégrale la plus compliquée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(w_0\,z+x_0)S(z)I\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0-x_1}{w_1}\right)\,dz.$$

Un obstacle Dirac $\alpha(x) = \alpha_0 + \alpha_1\delta_0(x)$ donnerait par exemple

$$\alpha_0 w_0\int_{-\infty}^{+\infty} S(z)I\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0-x_1}{w_1}\right)\,dz + \alpha_1 w_0 S\left(\frac{-x_0}{w_0}\right)I\left(\frac{-x_1}{w_1}\right).$$

2. ensuite, si les simulations numériques montrent que l'on peut faire des simplifications (par exemple $x_0 = x_1$ tout le temps, ce qui est très raisonnable)

Nous donnons maintenant les résultats pour le second groupe de lois d'équilibre. Elles proviennent des équations multipliées par s ou i. La première est :

$$-\dot{x_0}\int_{-\infty}^{+\infty} S(z)\ S'(z)\ dz - \dot{w_0}\int_{-\infty}^{+\infty} zS(z)\ S'(z)\ dz = -\frac{1}{w_0}\int_{-\infty}^{+\infty} S'^2(z)\ dz$$
$$- w_0\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(w_0\ z + x_0)S^2(z)I\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0 - x_1}{w_1}\right)\ dz,$$

tandis que la seconde est :

$$-\dot{x_1}\int_{-\infty}^{+\infty} I(z)\ I'(z)\ dz - \dot{w_1}\int_{-\infty}^{+\infty} zI(z)\ I'(z)\ dz = -\frac{1}{w_1}\int_{-\infty}^{+\infty} I'^2(z)\ dz$$
$$+w_0\int_{-\infty}^{+\infty} \alpha(w_0\ z+x_0)S(z)I^2\left(\frac{w_0}{w_1}z + \frac{x_0 - x_1}{w_1}\right)\ dz - w_1\int_{-\infty}^{+\infty} \beta(w_1\ z+x_1)I^2(z)\ dz.$$

Notons qu'il peut être utile pour obtenir des simplifications de multiplier par $s+i$ car on a l'équation d'évolution $\partial_t(s+i) = \Delta(s+i) - \beta i$. La démarche est alors identique à celle du chapitre II.

1. Il faut d'abord valider ces équations différentielles dans le cas homogène (α et β constants).
2. Pour cela, en l'absence de formes explicites pour les fronts, il faudra pratiquer l'étude approchée (comme en IV.2).
3. On peut ensuite s'attaquer à des défauts simples, comme le déjà mentionné Dirac, ou un Heaviside.

Conclusion

Nous avons étudié dans cette thèse comment des défauts *localisés* influencent la propagation de fronts de réaction-diffusion. La convergence d'une solution vers un profil donné est un sujet central dans la théorie de ces équations. Dans ce travail, nous avons montré qu'un défaut local peut avoir un impact global sur cette convergence.
L'arrêt du front dans des situations hétérogènes est un sujet actuel de recherche. Comme nous l'avons mentionné au chapitre III, nos résultats indiquent que le simple modèle de réaction-diffusion bistable avec un terme de défaut peut décrire phénoménologiquement nombre de situations où des fronts progressifs s'arrêtent. Les critères d'arrêt obtenus sont ainsi susceptibles d'applications. À l'inverse, le modèle de réaction-diffusion monostable avec un terme de défaut décrit lui des situations où des éclosions secondaires apparaissent en aval du front progressif. Enfin les comportements distincts des fronts bistables et monostables pour une zone sans réaction nous permettent de discriminer entre les deux par l'observation.
Ce travail ouvre des perspectives que nous jugeons intéressantes. Il y a à faire des simulations pour les modèles SIR, ainsi qu'une analyse en coordonnées collectives en dimension deux. Ce sont donc les deux premières pistes naturelles à poursuivre. Il serait ensuite possible de :

- Faire le lien avec les situations concrètes - forcément hétérogènes - et appliquer nos résultats.
- Établir des résultats de convergence plus généraux, et rapprocher notre définition de front progressif généralisé de celles déjà existantes.
- Étudier d'autres dépendances de la réactivité, par exemple une dépendance en t (pour couvrir des phénomènes saisonniers), ou une dépendance en $x - ct$ (pour modéliser le déplacement d'un habitat favorable à une vitesse c).
- Généraliser nos résultats à d'autres termes de réaction, comme par exemple celui de combustion.

Bibliographie

[ADG09] Lamia Abbas, Jacques Demongeot et Nicolas Glade. « Synchrony in reaction-diffusion models of morphogenesis : applications to curvature-dependent proliferation and zero-diffusion front waves. » Dans : *Philos. Trans. R. Soc. Lond., Ser. A, Math. Phys. Eng. Sci.* 367.1908 (2009), p. 4829–4862. DOI : 10.1098/rsta.2009.0170.

[Abd+03] Fatkhulla Kh. Abdullaev et al. « Controlling collapse in Bose-Einstein condensates by temporal modulation of the scattering length ». Dans : *Phys. Rev. A* 67 (1 2003), p. 013605. DOI : 10.1103/PhysRevA.67.013605. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.67.013605.

[AZ79] Mark J. Ablowitz et Anthony Zeppetella. « Explicit solutions of Fisher's equation for a special wave speed ». Dans : *Bulletin of Mathematical Biology* 41.6 (1979), p. 835 –840. ISSN : 0092-8240. DOI : 10.1016/S0092-8240(79)80020-8. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092824079800208 (cf. p. 20).

[AAA12] B. Ambrosio et M.A. Aziz-Alaoui. « Synchronization and control of coupled reaction–diffusion systems of the FitzHugh–Nagumo type ». Dans : *Computers and Mathematics with Applications* (2012). in press. ISSN : 0898-1221. DOI : 10.1016/j.camwa.2012.01.056. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122112000776.

[AW78] D.G Aronson et H.F Weinberger. « Multidimensional nonlinear diffusion arising in population genetics ». Dans : *Advances in Mathematics* 30.1 (1978), p. 33 –76. ISSN : 0001-8708. DOI : 10.1016/0001-8708(78)90130-5. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0001870878901305 (cf. p. 15).

[ACK08] W. Artiles, P. Carvalho et R. Kraenkel. « Patch-size and isolation effects in the Fisher–Kolmogorov equation ». Dans : *Journal of Mathematical Biology* 57 (4 2008), p. 521–535. ISSN : 0303-6812. DOI : 10.1007/s00285-008-0174-2. URL : http://dx.doi.org/10.1007/s00285-008-0174-2 (cf. p. 30).

[BD96] R. D. Benguria et M. C. Depassier. « Speed of Fronts of the Reaction-Diffusion Equation ». Dans : *Phys. Rev. Lett.* 77 (6 1996), p. 1171–1173. DOI : 10.1103/PhysRevLett.77.1171. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.1171.

[Ber09] Henri Berestycki. *Équations de réaction-diffusion et dynamiques de populations biologiques*. Notes de cours, 2009 (cf. p. 15).

[BHR05a] Henri Berestycki, François Hamel et Lionel Roques. « Analysis of the periodically fragmented environment model : I – Species persistence ». Dans : *Journal of Mathematical Biology* 51 (1 2005), p. 75–113. ISSN : 0303-6812. DOI : 10.1007/s00285-004-0313-3. URL : http://dx.doi.org/10.1007/s00285-004-0313-3 (cf. p. 29).

[BHR05b] Henri Berestycki, François Hamel et Lionel Roques. « Analysis of the periodically fragmented environment model : II—biological invasions and pulsating travelling fronts ». Dans : *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 84.8 (2005), p. 1101 –1146. ISSN : 0021-7824. DOI : 10.1016/j.matpur.2004.10.006. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021782404001345.

[BMH09] Henri Berestycki, Hiroshi Matano et François Hamel. « Bistable traveling waves around an obstacle ». Dans : *Communications on Pure and Applied Mathematics* 62.6 (2009), p. 729–788. ISSN : 1097-0312. DOI : 10.1002/cpa.20275. URL : http://dx.doi.org/10.1002/cpa.20275.

[Boa+10] Stefanella Boatto et al. « Epidemics Modelings : Some New Challenges ». Dans : *AIP Conference Proceedings* 1281.1 (2010). Sous la dir. de Theodore E. Simos, George Psihoyios et Ch. Tsitouras, p. 1529–1529. DOI : 10.1063/1.3498081. URL : http://link.aip.org/link/?APC/1281/1529/1 (cf. p. 97).

[CS11] Jean-Guy Caputo et Benoit Sarels. « Reaction-diffusion front crossing a local defect ». Dans : *Phys. Rev. E* 84 (4 2011), p. 041108. DOI : 10.1103/PhysRevE.84.041108. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.041108 (cf. p. 25, 47).

[CB01] A. Carpio et L. L. Bonilla. « Wave Front Depinning Transition in Discrete One-Dimensional Reaction-Diffusion Systems ». Dans : *Phys. Rev. Lett.* 86 (26 2001), p. 6034–6037. DOI : 10.1103/PhysRevLett.86.6034. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.86.6034 (cf. p. 67).

[CH90] Thierry Cazenave et Alain Haraux. *Introduction aux problèmes d'évolution semi-linéaires*. Ellipses, 1990 (cf. p. 7).

[Cha06] G. Chapuisat. « Ondes progressives et modélisation des accidents vasculaires cérébraux ischémiques ». Thèse de doct. Université de Paris-Sud, 2006.

[Cha10] Guillemette Chapuisat. *Un modèle de réaction-diffusion pour la croissance tumorale*. Notes de cours, 2010 (cf. p. 15).

[CG05] Guillemette Chapuisat et Emmanuel Grenier. « Existence and Nonexistence of Traveling Wave Solutions for a Bistable Reaction-Diffusion Equation in an Infinite Cylinder Whose Diameter is Suddenly Increased ». Dans : *Communications in Partial Differential Equations* 30.12 (2005), p. 1805–1816. DOI : 10.1080/03605300500300006. eprint : http://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/03605300500300006.

[CP+09] G. Cruz-Pacheco et al. « Modelling of the influenza A(H1N1)v outbreak in Mexico City, April-May 2009, with control sanitary measures ». Dans : *Euro Surveill.* 14 (26 2009). URL : http://www.eurosurveillance.org/ViewArticle.aspx?ArticleId=19254.

[DBV09] D. Dalmas, E. Barthel et D. Vandembroucq. « Crack front pinning by design in planar heterogeneous interfaces ». Dans : *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 57.3 (2009), p. 446 – 457. ISSN : 0022-5096. DOI : 10.1016/j.jmps.2008.11.012. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002250960800210X (cf. p. 67).

[Dio+08] F. Diotallevi et al. « Front pinning in capillary filling of chemically coated channels ». Dans : *Phys. Rev. E* 78 (3 2008), p. 036305. DOI : 10.1103/PhysRevE.78.036305. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.036305 (cf. p. 67).

[FM77] Paul C. Fife et J. B. McLeod. « The approach of solutions of nonlinear diffusion equations to travelling front solutions ». Dans : *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 65 (4 1977), p. 335–361. ISSN : 0003-9527. DOI : 10.1007/BF00250432. URL : http://dx.doi.org/10.1007/BF00250432.

[Fis37] R. A. Fisher. « The wave of advance of advantageous genes ». Dans : *Annals of Human Genetics* 7.4 (1937), p. 355–369. ISSN : 1469-1809. DOI : 10.1111/j.1469-1809.1937.tb02153.x. URL : http://dx.doi.org/10.1111/j.1469-1809.1937.tb02153.x (cf. p. 3).

[FI06] R. FitzHugh et E. M. Izhikevich. « FitzHugh-Nagumo model ». Dans : *Scholarpedia* 1.9 (2006), p. 1349.

[For05] L. Forest. « Modèles de morphogenèse tissulaire à partir de dynamiques cellulaires intégrées - Application principale à la croissance radiale secondaire des conifères ». Thèse de doct. Université Joseph Fourier, 2005.

[Gau+10] Jean Gaudart et al. « Demography and Diffusion in Epidemics : Malaria and Black Death Spread ». Dans : *Acta Biotheoretica* 58 (2 2010). 10.1007/s10441-010-9103-z, p. 277–305. ISSN : 0001-5342. URL : http://dx.doi.org/10.1007/s10441-010-9103-z (cf. p. vi).

[Gau+09] Jean Gaudart et al. « Modelling malaria incidence with environmental dependency in a locality of Sudanese savannah area, Mali ». Dans : *Malaria Journal* 8.1 (2009), p. 61. ISSN : 1475-2875. DOI : 10.1186/1475-2875-8-61. URL : http://www.malariajournal.com/content/8/1/61.

[GK01] B. H. Gilding et R. Kersner. *Travelling waves in nonlinear diffusion-convection-reaction*. Memorandum 1585. Enschede : Department of Applied Mathematics, University of Twente, 2001.

[Gri96] P. Grindrod. *The theory and applications of reaction-diffusion equations : Patterns and waves*. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 1996.

[GM84] A V Gurevich et R G Mints. « Localized waves in inhomogeneous media ». Dans : *Soviet Physics Uspekhi* 27.1 (1984), p. 19. URL : http://stacks.iop.org/0038-5670/27/i=1/a=R02.

[HNW93] Ernst Hairer, Syvert P. Norsett et Gerhard Wanner. *Solving ODE I : Nonstiff problems*. Springer, 1993 (cf. p. 34).

[Han06] P. Hantz. « Pattern Formation in a New Class of Precipitation Reactions ». Thèse de doct. Université de Genève, 2006.

[Hau+09] F. Haudin et al. « Driven Front Propagation in 1D Spatially Periodic Media ». Dans : *Phys. Rev. Lett.* 103 (12 2009), p. 128003. DOI : 10.1103/PhysRevLett.103.128003. URL : http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.128003.

[KPP37] A. Kolmogorov, I. Petrovskii et N. Piscounov. « A study of the diffusion equation with increase in the amount of substance, and its application to a biological problem ». Dans : *Bull. Moscow Univ., Math. Mech.* 1 (1937), p. 1–25 (cf. p. 3).

[Mur02] J.D. Murray. *Mathematical Biology I : An Introduction*. Springer, 2002.

[Mur03] J.D. Murray. *Mathematical Biology II : Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer, 2003.

[Myl03] M. Myllys. « Experimental realization of KPZ dynamics : slow combustion of paper ». Thèse de doct. University of Jyväskylä, 2003.

[NSS97] Takashi Naka, Kosuke Shiba et Naoto Sakamoto. « A two-dimensional compartment model for the reaction-diffusion system of acetylcholine in the synaptic cleft at the neuromuscular junction ». Dans : *Biosystems* 41.1 (1997), p. 17 –27. ISSN : 0303-2647. DOI : 10.1016/S0303-2647(96)01659-0. URL : http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0303264796016590 (cf. p. 27).

[NX04] James Nolen et Jack Xin. « Variational principle based computation of KPP average front speeds in random shear flows ». Dans : *Methods Appl. Anal.* 11.3 (2004), p. 389–398 (cf. p. 37).

[NGS05] John Novembre, Alison P Galvani et Montgomery Slatkin. « The Geographic Spread of the CCR5 Delta32 HIV-Resistance Allele ». Dans : *PLoS Biol* 3.11 (oct. 2005), e339. DOI : 10.1371/journal.pbio.0030339. URL : http://dx.doi.org/10.1371%2Fjournal.pbio.0030339 (cf. p. 30).

[Pre+96] William H. Press et al. *Numerical recipes in Fortran 90*. Cambridge, 1996 (cf. p. 35).

[QS07] Pavol Quittner et Philippe Souplet. *Superlinear parabolic problems - Blow-up global existence and steady states*. Birkhäuser, 2007 (cf. p. 7).

[Rao09] G. Raoul. « Etude qualitative et numérique d'équations aux dérivées partielles issues des sciences de la nature ». Thèse de doct. École Normale Supérieure de Cachan, 2009.

[Ras+08] A. R. Rasmussen et al. « Analytical and numerical modeling of front propagation and interaction of fronts in nonlinear thermoviscous fluids including dissipation ». Dans : *ArXiv e-prints* (2008). arXiv :0806.0105 [physics.flu-dyn] (cf. p. 28).

[RM03] V. Roussier-Michon. « Sur la stabilité des ondes sphériques et le mouvement d'un fluide entre deux plaques infinies ». Thèse de doct. Université de Paris-Sud, 2003.

[SKG08] Igor Sazonov, Mark Kelbert et Michael B. Gravenor. « The Speed of Epidemic Waves in a One-Dimensional Lattice of SIR Models ». Dans : *Mathematical Modelling of Natural Phenomena* 3 (04 2008), p. 28–47. DOI : 10.1051/mmnp:2008069.

[Sco03] Alwyn Scott. *Nonlinear science*. Oxford, 2003 (cf. p. 38, 57).

[Smo83] Joel Smoller. *Shock waves and reaction-diffusion equations*. Springer, 1983.

[TP02] R. Texier-Picard. « Problèmes de réaction-diffusion avec convection : Une étude mathématique et numérique ». Thèse de doct. Université Claude Bernard, 2002.

[Xin00] Jack Xin. « Front Propagation in Heterogeneous Media ». Dans : *SIAM Review* 42.2 (2000), p. 161–230. DOI : 10.1137/S0036144599364296. URL : http://link.aip.org/link/?SIR/42/161/1 (cf. p. vi, 29).

[Zel92] Ya. B. Zeldovich. *Selected works of Yakov Borisovich Zeldovich - Volume 1*. Princeton University Press, 1992 (cf. p. 4).

Table des matières

Introduction v

I Théorie des équations de réaction-diffusion 1
- I.1 En compagnie de Fisher, Kolmogorov, Skellam... 3
- I.2 Définitions 5
- I.3 Aspect problème de Cauchy 7
- I.4 Équation bistable 7
  - I.4.1 États stationnaires et stabilité 7
  - I.4.2 Solutions progressives 8
  - I.4.3 Analyse de stabilité 8
  - I.4.4 Front explicite 9
  - I.4.5 Équation non adimensionnée 12
- I.5 Équation de Fisher–KPP 13
  - I.5.1 États stationnaires et stabilité 13
  - I.5.2 Solutions progressives 14
  - I.5.3 Analyse de stabilité 14
  - I.5.4 Existence d'un front progressif 15
  - I.5.5 Existence d'une infinité de fronts progressifs ; vitesse critique 18
  - I.5.6 Fronts particuliers 19
  - I.5.7 Équation non adimensionnée 22

II Équations de réaction-diffusion dans des milieux hétérogènes 25
- II.1 Choix du modèle 27
- II.2 Établissement du modèle 27
  - II.2.1 Défaut 29
  - II.2.2 Conditions initiales 31
  - II.2.3 Échelles en jeu 32
  - II.2.4 Programme : formules à généraliser, cas à considérer 32
- II.3 Méthodes numériques 33
  - II.3.1 Résoudre une équation de réaction-diffusion en une dimension 33
  - II.3.2 Approcher le front 34
- II.4 Standardisation du modèle : analyse en coordonnées collectives 36

II.4.1 Une première approche : estimation de la vitesse 36
II.4.2 Raffinement : position et largeur du front 38
II.4.3 Première loi d'équilibre 40
II.4.4 Deuxième loi d'équilibre 41
II.4.5 Autres lois d'équilibre 42
II.4.6 Explicitation des équations 43
II.4.7 Généralisation à d'autres défauts 44

III Cas bistable **47**
III.1 Analyse en coordonnées collectives 49
III.1.1 Défaut constant 50
III.1.2 Vitesse de retour à l'équilibre 51
III.1.3 Défaut large 51
III.1.4 Défaut étroit 52
III.2 Simulations numériques 55
III.2.1 Défaut symétrique 56
III.2.2 Défaut antisymétrique 58
III.3 Comparaison entre modèles 59
III.3.1 Défaut large 60
III.3.2 Défaut étroit, ou comment arrêter un front progressif . . 61
III.4 Intérêt du modèle standardisé 63
III.4.1 Arrêt du front par un défaut symétrique 63
III.4.2 Arrêt du front par un défaut antisymétrique 67
III.4.3 Arrêt du front par une zone sans réaction 69
III.4.4 Problème inverse 72

IV Cas monostable **75**
IV.1 Dépendance en la condition initiale 77
IV.2 Comment faire l'étude approchée 78
IV.3 Simulations numériques 79
IV.3.1 Défaut large 80
IV.3.2 Défaut étroit 81
IV.3.3 Éclosions secondaires 82
IV.4 Étude exacte 84
IV.4.1 Défaut constant 85
IV.4.2 Vitesse de retour à l'équilibre 86
IV.4.3 Défaut large 87
IV.4.4 Défaut étroit 87
IV.4.5 Équation de Fisher–KPP avec le front de Huxley 89
IV.5 Comparaison 90
IV.6 Intérêt du modèle standardisé 91

V Généralisation : plusieurs dimensions, plusieurs composants **93**
V.1 En dimension supérieure 94
V.1.1 Simulations 94
V.2 Modèles SIR 96
V.2.1 Analyse en coordonnées collectives 97

Conclusion **101**

Table des figures

I.1 Différents termes de réaction 5

III.1 Terme de réaction bistable. Ici on a choisi $a = 0,3$. 49
III.2 Termes sources pour un Dirac 53
III.3 Termes sources pour un Heaviside 54
III.4 Mouvement adiabatique d'un front 56
III.5 Mouvement d'un front 57
III.6 Arrêt du front 58
III.7 Interaction d'un front avec un défaut antisymétrique large 58
III.8 Interaction d'un front avec un défaut antisymétrique étroit . . . 59
III.9 Comparaison pour des défauts symétrique et antisymétrique . . . 60
III.10 Comparaison pour un défaut antisymétrique large 60
III.11 Comparaison pour un défaut symétrique étroit 61
III.12 Comparaison pour un défaut antisymétrique étroit 62
III.13 Comparaison pour un défaut antisymétrique étroit (pinning) . . . 62
III.14 Tracé de la fonction d'arrêt 66
III.15 Termes sources pour une zone sans réaction 70
III.16 Tracé de la fonction d'arrêt 71
III.17 Problème inverse 72

IV.1 Terme de réaction monostable. 77
IV.2 Défaut symétrique large 80
IV.3 Défaut antisymétrique large 81
IV.4 Défaut symétrique étroit petit 82
IV.5 Défaut antisymétrique étroit petit 82
IV.6 Défaut symétrique étroit grand : éclosion secondaire 83
IV.7 Termes sources pour un Dirac 88
IV.8 Termes sources pour un Heaviside 89
IV.9 Comparaison pour un défaut symétrique large 90
IV.10 Comparaison pour un défaut symétrique étroit petit 91

V.1 Bande sans réaction : arrêt du front 95
V.2 Défaut antisymétrique étroit : éclosion secondaire 96