

THÈSE DE DOCTORAT

Mathématiques et Applications

Université de Nantes

Modélisation et simulation
de l'activité électrique du coeur dans le thorax,
analyse numérique et méthodes de volumes finis

Charles Pierre

*Soutenue publiquement le 20 septembre 2005,
au laboratoire de mathématiques Jean Leray*

<i>Président du jury</i>	: Yvon MADAY	Pr. (Paris VI)
<i>Examineurs</i>	: Yves COUDIERE	Mc. (Nantes)
	Emmanuel GRENIER	Pr. (ENS Lyon)
	François JAUBERTEAU	Pr. (Nantes)
	Catherine BOLLEY	Pr. (Nantes)
<i>Rapporteurs</i>	: Piero COLLI-FRANZONE	Pr. (Pavia)
	Raphaèle HERBIN	Pr. (Marseille)
<i>Directeur de thèse</i>	: François JAUBERTEAU	
<i>Co-encadrant</i>	: Yves COUDIERE	

Résumé

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de la modélisation en biomathématiques et dans celui de l'analyse numérique et du calcul scientifique.

Le modèle bidomaine décrit l'activité électrique du coeur. Cette activité est complexe : elle relève à l'échelle cellulaire de processus biochimiques et à l'échelle macroscopique de la structure anisotrope des tissus cardiaques, des caractéristiques du thorax. Une application fondamentale du modèle est la simulation d'électrocardiogrammes.

Des méthodes de calcul type volumes finis sont développées pour la résolution du modèle. Dans un premier temps, la stabilité et la convergence de schémas volumes finis classiques est établie, en théorie et numériquement, pour une version simplifiée du modèle bidomaine. Pour faire face à des difficultés conceptuelles et pratiques du modèle complet (anisotropie des tissus, conditions limites, maillages non structurés distordus), une seconde classe de schémas 2D-3D, cell-vertex centered, est mise au point et testée.

Remerciements

Je tiens à remercier tout particulièrement mes directeurs, Yves Coudière et François Jauberteau. D'abord pour avoir su m'initier au monde de la recherche, mais aussi et surtout pour leurs qualités humaines et leur soutien moral qui m'ont accompagné au long de ces trois années de thèse ; je garde une profonde reconnaissance pour leur appui logistique et mon réapprovisionnement régulier en caféine.

Je remercie également particulièrement Franck Plouraboué pour la confiance qu'il m'a toujours témoignée, pour sa réflexion sur la recherche et pour m'avoir fait réaliser que la rigueur était certainement la qualité fondamentale pour un chercheur.

Pour sa collaboration active et sa solidarité sans faille je remercie Rodolphe Turpault qui, par ses coups de main et son énergie, a véritablement dynamisé mon travail.

Je remercie également Catherine Bolley pour son soutien et son attention permanente.

Enfin, comme tout travail se nourrit de *“l'énergie ambiante”*, je tiens à remercier l'équipe des thésards et ex-thésards nantais ainsi que Saïd El Mamouni et Claude Jouault pour l'atmosphère chaleureuse qu'ils contribuèrent à faire régner.

Table des matières

Introduction	9
partie 1. Modélisation de l'activité électrique cardiaque	15
Chapitre 1. Données physiologiques générales	17
1. Physiologie cellulaire	17
2. Anatomie du coeur	20
Chapitre 2. Modèle macroscopique bidomaine pour le tissu cardiaque	23
1. Modèle microscopique de tissu cardiaque	24
2. Modèle macroscopique bidomaine	26
Chapitre 3. Modélisation des courants ioniques membranaires	33
1. Processus du transport ionique membranaire	33
2. La dynamique du calcium : les tampons	36
3. Modèles de membrane	37
Chapitre 4. Le problème direct en électrocardiologie	43
1. Introduction	43
2. Modèles dipolaires	44
3. Modèles couplés coeur/thorax pour le potentiel extra- cardiaque	49
partie 2. Analyse et simulation numérique du modèle monodomaine pour le coeur isolé par des schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles	55
Introduction à la partie II	57
Chapitre 5. Analyse de la stabilité et de la convergence de schémas volumes finis classiques pour le modèle monodomaine	59
1. Introduction	60
2. The System of Partial Differential Equations	62
3. The Finite Volumes Approximation	68
4. Stability Analysis	72
5. Convergence Analysis	75
6. Stabilité des gradients numériques	79

Chapitre 6. Résultats numériques	85
1. Simulations en dimension un	85
2. Simulations en dimension deux	93
3. Simulation en dimension trois	98
4. Conclusion	102
Chapitre 7. Equations paraboliques semi linéaires	107
1. Introduction	107
2. Opérateurs sectoriels	109
3. Espaces fractionnaires	111
4. Résolution du modèle monodomaine	113
5. Régularité des solutions	117
partie 3. Analyse et simulation numérique du modèle bidomaine du coeur couplé avec le thorax par une méthode de <i>volumes finis en dualité discrète</i>	121
Introduction à la partie III	123
Chapitre 8. Maillages DDFV	129
1. Définition des maillages DDFV	129
2. Espaces fonctionnels discrets	135
3. Opérateurs discrets	137
4. Formule de Green discrète	141
5. Noyau de l'opérateur gradient discret	144
Chapitre 9. Application à la résolution d'EDP elliptiques	151
1. Schéma DDFV pour l'équation de Poisson	151
2. Schéma DDFV pour un problème de transmission standard	154
Chapitre 10. Schéma DDFV pour le modèle bidomaine	161
1. Nomenclature et équations	161
2. Existence de solutions	162
3. Résolution du problème bidomaine en espace	163
Chapitre 11. Résultats numériques	167
1. Implémentation pratique	167
2. Simulations numériques	171
Index	184
Index des mots clés	184
Index des notations	185
Bibliographie	187

Introduction

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la modélisation du fonctionnement d'organes vivants. Ce champ d'application des mathématiques est relativement récent comparativement à la modélisation dans le domaine de la physique. Il se heurte en effet aux difficultés suivantes : haute complexité des phénomènes, interdépendance des structures biologiques, difficultés de l'expérimentation *in vivo* et variabilité entre les individus.

Certaines échelles des phénomènes biologiques commencent cependant à être suffisamment bien comprises pour donner cours à des modèles quantitatifs – c'est notamment le cas des phénomènes biochimiques à l'échelle cellulaire.

La recomposition d'un modèle à l'échelle d'un organe entier à partir de la modélisation des échelles microscopiques est d'un développement récent : les prédictions de ces modèles, quoique réalistes, donnent encore principalement lieu à des interprétations qualitatives.

Du point de vue mathématique, le modèle étudié dans cette thèse se présente sous la forme d'un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) du type général d'équations paraboliques semi linéaires de réaction diffusion.

L'analyse numérique de ces EDP est envisagée à partir de méthodes de volumes finis. L'étude de ces méthodes constitue un sujet d'étude à part entière de cette thèse, elle se décompose selon trois niveaux :

- premièrement la construction des schémas volumes finis ; cette construction rend compte d'une part de contraintes d'ordre technique liées à la formulation mathématique générale du modèle et d'autre part de contraintes d'ordre pratique dues à la nécessité de calculer sur des maillages en dimension 3 non structurés et éventuellement distordus issus de données expérimentales,
- deuxièmement l'étude théorique des propriétés de ces schémas : caractère bien posé des schémas (inversibilité), propriétés de stabilité et de convergence,
- troisièmement l'implémentation de ces schémas ; cette étape correspond non seulement à la mise en oeuvre du modèle mais aussi à l'évaluation *a posteriori* des schémas par rapport à la qualité des résultats numériques, au coût de la méthode ...

Projet général. Le coeur a pour fonction de faire circuler le sang dans l'organisme. Cette fonction est assurée par la contraction coordonnée des oreillettes et des ventricules.

La contraction du muscle cardiaque est précédée et générée par des réactions biochimiques ayant lieu au niveau des cellules musculaires. Á l'échelle macroscopique du coeur, le tissu est modélisé par un milieu continu. Les réactions biochimiques au niveau cellulaire se traduisent par l'existence d'une onde de potentiel (le potentiel d'action cardiaque) se propageant dans ce milieu continu. Un champ électrique est généré à l'intérieur et à l'extérieur du coeur, il se manifeste sur la surface du thorax par l'existence d'un potentiel de surface (variable en espace et en temps) dont la mesure correspond à l'examen médical de l'électrocardiogramme (ECG).

La description de l'activité électrique cardiaque correspond à deux objectifs pratiques principaux.

D'une part, en tant que commande de la contraction musculaire, elle définit le fonctionnement mécanique du coeur.

D'autre part, cette activité est caractéristique de l'état physiologique des tissus cardiaques. Son analyse permet le diagnostic de dysfonctionnements de la fonction cardiaque : l'origine d'une arythmie, par exemple, peut être déterminée à partir des perturbations qu'elle induit sur l'activité électrique du coeur. L'outil clinique principal d'analyse de cette activité est l'ECG qui constitue un moyen puissant de diagnostic extrêmement répandu car peu coûteux et facile à réaliser.

L'objet de cette thèse est l'étude de l'activité électrique du coeur ; depuis les réactions biochimiques à son origine au niveau des cellules musculaires cardiaques jusqu'à sa manifestation à la surface du thorax (ECG). Cette étude sera déclinée selon trois axes : modélisation, analyse numérique et simulations numériques.

Partie I. La première partie est entièrement consacrée à la modélisation de l'activité électrique du coeur. Cette activité s'observe à différents niveaux, chacun de ces niveaux est modélisé à partir des données physiologiques.

Au niveau des cellules musculaires cardiaques, des processus biochimiques sont à l'origine du champ électrique généré par le coeur. Il s'agit du transport d'espèces ioniques entre les milieux intra et extra-cellulaires à travers la membrane de la cellule. Ce transport induit des différences de concentrations entre l'intérieur et l'extérieur de la cellule à l'origine d'une différence de potentiel (potentiel transmembranaire) entre ces deux milieux. La dynamique de ces transports est étudiée au chapitre 3.

Au niveau supérieur, les cellules musculaires sont inter-connectées et forment un réseau qui délimite un milieu intra-cellulaire unique séparé du milieu extra-cellulaire par la membrane cellulaire. Cette structure en réseau permet à une modification du potentiel transmembranaire de se propager à l'ensemble des tissus. Cette structure microscopique des tissus est étudiée en 1.

À l'échelle du coeur, les cellules musculaires sont organisées en fibres qui s'enroulent au sein du myocarde, conférant au tissu musculaire un caractère anisotrope pour la conduction électrique. Le *modèle bidomaine* du tissu cardiaque à l'échelle macroscopique, présenté en 2, intègre le modèle microscopique *en réseau* du tissu cardiaque dans ce cadre anisotrope.

Enfin le dernier niveau correspond à l'intégration du coeur dans le thorax et à la modélisation de l'interaction entre ces deux ensembles. Ce dernier échelon correspond à la modélisation du *problème direct en électrocardiologie* (présentée au chapitre 4) : reconstruire le champ de potentiel à la surface du thorax à partir de la modélisation de l'activité électrique cardiaque.

L'interaction coeur/thorax est modélisée par un couplage fort : notamment l'activité électrique du coeur est influencée par les paramètres de la conduction dans le thorax conformément aux données expérimentales.

Le modèle final se présente comme une EDP d'évolution du type équation de réaction diffusion couplée avec deux EDP elliptiques ainsi qu'avec un système d'EDO.

Partie II. La seconde partie porte sur l'étude d'une version simplifiée de ce modèle s'appliquant au coeur seul ; on se place donc en deçà du couplage entre le coeur et le thorax. Ce modèle, dit *modèle monodomaine*, se présente comme une EDP de réaction diffusion couplée avec un système d'EDO.

Quoique les simplifications permettant de déduire ce modèle du modèle général bidomaine soient non physiologiques, ce modèle simplifié conserve toujours une des difficultés majeures pour la résolution du modèle bidomaine : la coexistence d'une dynamique lente et d'une dynamique rapide. Ces deux dynamiques sont l'expression de processus ayant lieu au niveau cellulaire sur des échelles de temps tout à fait différentes, avec un facteur d'échelle de l'ordre de 10^3 . La dynamique rapide induit de brusques changements en temps et en espace sur le potentiel transmembranaire qui a un comportement de type *front d'onde*. Au niveau de la solution du problème continu il ne s'agit pas de la propagation d'une discontinuité, le potentiel étant dirigé par une équation parabolique régularisante. Au niveau des approximations numériques cependant ce front d'onde apparaît comme une discontinuité sur les solutions discrètes.

Cette dynamique rapide a pour conséquence de rendre les calculs instables. Ces questions de stabilité ont motivé l'utilisation de schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles (reprenant la terminologie de [43]). L'avantage de cette méthode est que les solutions du modèle discrétisé possèdent des caractéristiques très proches de celles du modèle continu, qui permettent de transposer des propriétés de stabilité du cas continu au cas discret. Ces résultats de stabilité s'expriment en terme de bornes L^∞ sur les approximations numériques. Cette stabilité *forte* suffit notamment à assurer la convergence des schémas numériques.

Pour ces schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles, les relations de stabilité ainsi que les résultats de convergence qui s'en déduisent sont exposés au chapitre 5.

Cette méthode est mise en oeuvre au chapitre 6. Ce chapitre présente d'une part une analyse *a posteriori* de la convergence des schémas (ainsi que d'autres caractéristiques techniques liées au calcul) et d'autre part des simulations de la propagation du potentiel d'action en dimensions 1, 2 (cas tests sur des géométries simplifiées) et en dimension 3 sur un maillage du coeur issu de données expérimentales.

Le chapitre 7 expose quelques résultats théoriques généraux sur les équations du type paraboliques semi linéaire dont fait partie le modèle monodomaine. L'objectif de ce chapitre est de justifier les résultats d'existence, d'unicité et de régularité des solutions du modèle monodomaine utilisés pour l'analyse numérique au chapitre 5.

Partie III. La troisième partie a pour objectif la résolution du modèle couplé coeur+thorax, décrit dans la première partie, où l'activité électrique du coeur est donnée par le modèle bidomaine.

Le chapitre 8 développe une technique de discrétisation type volumes finis dite méthode *DDFV* (Discrete Duality Finite Volume), selon la terminologie de [36, 4]. Cette méthode, introduite par Hermeline [62, 63] et Domelevo et Omnes [38] sur des maillages en dimension 2, est étendue ici au cas de maillages non structurés en dimension 3.

La technique *DDFV* définit, relativement à un maillage, des opérateurs gradient et divergence discrets. On montre en particulier que, comme l'ont montré Domelevo et Omnes [38] en dimension 2, ces opérateurs discrets présentent des propriétés algébriques similaires aux opérateurs gradient et divergence dans le cas continu, du type formule de Green.

Ces propriétés algébriques permettent de définir des opérateurs elliptiques discrets $\text{div}(G\nabla \cdot)$ symétriques et négatifs. Au chapitre 9 on utilise ces opérateurs discrets pour la formulation de schémas de résolution (symétriques et inversibles) d'EDP elliptiques.

L'étude de la discrétisation de deux types d'EDP elliptiques est présentée dans ce chapitre. Tout d'abord pour l'équation de Poisson dans un milieu non isotrope dont l'anisotropie est donnée par un tenseur régulier.

Ensuite pour un problème de transmission entre deux sous domaines du domaine complet ; ce dernier problème peut aussi être vu comme une équation de Poisson pour un tenseur de conductivité présentant une discontinuité entre deux sous domaines du domaine.

L'étude de la résolution numérique de ces deux types d'EDP par des schémas DDFV est motivée par la résolution du modèle bidomaine. Le premier type correspond à la résolution d'une partie du modèle bidomaine lorsque le coeur est supposé être isolé du thorax. Le second type est une étape vers la résolution du modèle couplé coeur+thorax.

La résolution du modèle bidomaine complet s'accompagne de difficultés supplémentaires par rapport à celle du modèle monodomaine à la partie II.

En particulier les potentiels intra et extra-cellulaires sont définis sur le même domaine (le coeur) mais correspondent à des tenseurs de conductivité différents. On doit donc gérer simultanément deux tenseurs d'anisotropie sur un même maillage. Ce point crée une réelle difficulté pratique que les méthodes DDFV résolvent efficacement, comparativement aux schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles de la partie 2.

D'autre part le problème couplé ressemble à un problème de transmission, mais non standard : les relations de couplage sur l'interface coeur/thorax couplent le milieu extra-cardiaque aux deux milieux intra et extra-cellulaires superposés dans le volume cardiaque. Ces relations (des conditions de continuité du flux de courant) *sont non compatibles* avec les équations elliptiques satisfaites par les potentiels intra et extra-cellulaires dans le coeur.

Les propriétés algébriques des opérateurs gradient et divergence discrets permettent d'inclure les relations de couplage entre le coeur et le thorax en une seule équation unifiée. Ces schémas numériques de résolution du modèle couplé coeur+thorax sont définis au chapitre 10.

Ces schémas numériques sont mis en oeuvre et testés au chapitre 11 : sur des géométries en dimension 2 et 3.

Dans un premier temps ce chapitre compare la gestion de l'anisotropie par les schémas DDFV et les schémas volumes finis sur des maillages admissibles étudiés à la partie 2 ; la convergence du schéma DDFV est également étudiée.

Dans un second temps on applique les schémas à la résolution du modèle couplé coeur+thorax sur une géométrie 2D simple modélisant une coupe transverse du thorax. Des ECG sont calculés à partir de ce modèle, et des troubles du fonctionnement cardiaque, ainsi que leur influence sur les ECG, sont modélisés.

Enfin un exemple de calcul en dimension 3 sur un maillage réaliste du coeur est donné.

Première partie

**Modélisation de l'activité
électrique cardiaque**

CHAPITRE 1

Données physiologiques générales

1. Physiologie cellulaire

1.1. La membrane cellulaire. L'unité de la cellule est assurée par la membrane cellulaire qui sépare l'intérieur de la cellule (le cytoplasme) du milieu extérieur (à la cellule). L'ensemble des échanges entre la cellule et le milieu extérieur est contrôlé par sa membrane.

Structurellement la membrane cellulaire est composée d'une double couche de molécules (des phospholipides), une couche interne et une couche externe apposées symétriquement (voir figure 1). Chaque phospholipide est composé d'une tête hydrophile et d'une queue hydrophobe. La composition aqueuse du milieu extérieur et du cytoplasme force les queues des phospholipides de chaque couche à pointer vers l'intérieur de la membrane. Ces propriétés des composants élémentaires de la membrane assurent ainsi sa cohésion mécanique et son imperméabilité.

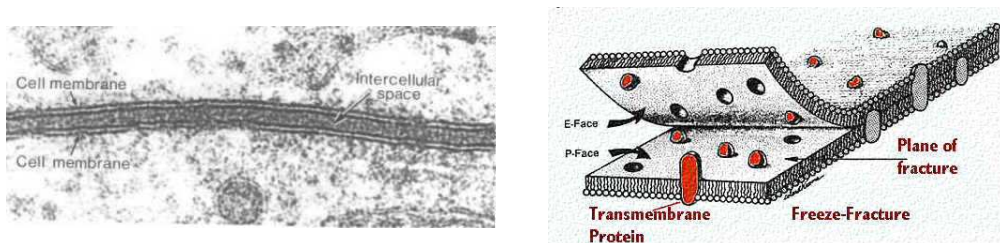


FIGURE 1. La membrane cellulaire, vue au microscope électronique (à gauche), représentation schématique (à droite).

La membrane cellulaire est transpercée par des protéines dont le rôle est d'assurer le flux de substances à travers la membrane. Chacune de ces protéines est spécialisée dans le transport d'une substance précise. Ces protéines peuvent avoir un comportement soit passif, soit actif. Dans le second cas leur activité est alimentée énergiquement par le métabolisme cellulaire de sorte que le transport de substances par ces protéines puisse se faire à contre courant des gradients de concentration (ou, plus précisément, des gradients électrochimiques).

Ainsi la composition chimique du cytoplasme diffère de celle du milieu extérieur. En particulier d'importantes différences de concentrations ioniques ont lieu, la cellule est plus concentrée en ions négatifs

que le milieu extérieur. Ces différences de concentrations induisent une différence de potentiel entre le cytoplasme et le milieu extérieur, le potentiel transmembranaire, et l'on dit que la cellule est *polarisée*. Cette différence de potentiel est négative (quoiqu'elle puisse être variable dans le temps, voir la section suivante), on l'appelle alors *potentiel de repos* ; il est en réalité l'expression d'une intense activité métabolique de la cellule. Les principales espèces ioniques responsables du potentiel de repos sont le sodium Na^+ et le potassium K^+ : comparées aux concentrations extra-cellulaires, la concentration intra-cellulaire en K^+ est forte, celle en Na^+ est faible.

1.2. Cellules excitables : le potentiel d'action cellulaire.

Certains types de cellules (dont les cellules musculaires et les cellules nerveuses) ont la particularité d'avoir un potentiel membranaire potentiellement variable au cours du temps. La modification de leur potentiel de membrane est causée par un stimulus extérieur. On dit que ces cellules sont *excitables* ; dans le cas des cellules musculaires, une modification du potentiel extérieur ou l'application d'un courant électrique sont les stimuli déclencheurs de l'excitation.

Cette excitabilité des cellules musculaires est régie par des propriétés dynamiques de la membrane. Le comportement des protéines membranaires contrôlant les flux ioniques à travers la membrane peut être affecté par une modification des conditions extérieures. Lorsque, sous l'effet d'une stimulation, le potentiel transmembranaire est ramené vers les valeurs positives, on parle de *dépolarisation* de la cellule.

Jusqu'à un certain degré de stimulation, la dépolarisation est proportionnée à la stimulation. Par contre si la stimulation force la cellule à se dépolariser au delà d'une certaine valeur (dite *potentiel de seuil*) la réaction de la cellule n'est plus de nature proportionnée, on assiste alors au *potentiel d'action cellulaire* (figure 2) : le potentiel de membrane subit d'abord une forte et brusque dépolarisation, se stabilise autour d'une valeur de plateau avant de revenir à son potentiel de repos (la cellule se *repolarise*).

Le potentiel d'action cellulaire est principalement causé par deux courants ioniques transmembranaires, un courant d'ions sodium Na^+ rentrant (acteur de la dépolarisation) et un courant d'ions potassium K^+ sortant.

Le milieu intra-cellulaire est fortement concentré en ions potassium K^+ et faiblement concentré en ions sodium Na^+ comparativement au milieu extra-cellulaire.

Lorsque la cellule se dépolarise au delà du potentiel de seuil, la membrane devient perméable à l'ion Na^+ . Un flux rentrant d'ions Na^+ a lieu induisant une très brusque augmentation du potentiel transmembranaire.

Une fois dépolarisée, la membrane devient perméable à l'ion K^+ . Un

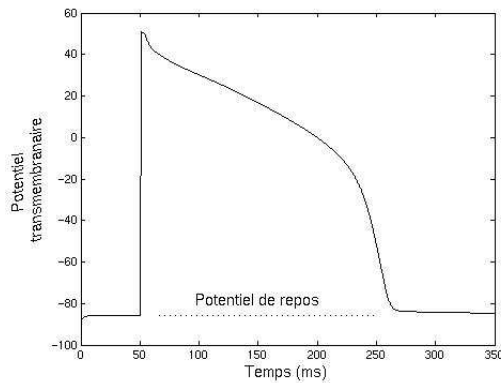


FIGURE 2. Potentiel d'action pour une cellule musculaire cardiaque (ventricule).

flux sortant d'ions potassium a lieu ramenant progressivement le potentiel membranaire vers le potentiel de repos.

La dynamique de l'ensemble des flux ioniques membranaires intervenant dans le potentiel d'action cellulaire est complexe. Sa compréhension nécessite l'étude du comportement de chaque type de protéines membranaires contrôlant les flux ioniques. L'objet de l'électrophysiologie cellulaire est l'étude des mécanismes régissant les transports ioniques à travers la membrane que l'on étudiera plus en détail au chapitre 3.

1.3. Cellules musculaires cardiaques. A l'échelle microscopique, les cellules musculaires du cœur (ou *myocytes cardiaques*) forment un réseau quasi périodique (voir figure 3) dans lequel ces cellules, de forme approximativement cylindrique, sont reliées entre elles par un grand nombre de pores situés sur leurs extrémités ou sur leurs faces latérales et appelées *jonctions*. L'effet de ces jonctions est que l'état d'une cellule est directement affecté par une modification de l'état de ses voisines. Ceci permet au potentiel d'action cellulaire de se propager de cellule en cellule dans l'ensemble du muscle cardiaque qui est parcouru par une onde de potentiel appelé *potentiel d'action cardiaque*.

La seconde particularité des myocytes (en plus d'être excitable) est qu'ils sont contractiles. Leur contraction est assurée par des organites cellulaires, les *sarcomères*, qui sont au repos dans un état long et peuvent passer dans un état court. Le passage de l'état long à l'état court est commandé par l'augmentation de la concentration intra-cellulaire en ion calcium Ca^{2+} . Cette augmentation est directement liée au potentiel d'action de sorte qu'un myocyte cardiaque se contracte lorsqu'il passe à l'état excité.

La propagation du potentiel d'action cardiaque est ainsi la commande de la contraction du muscle cardiaque.

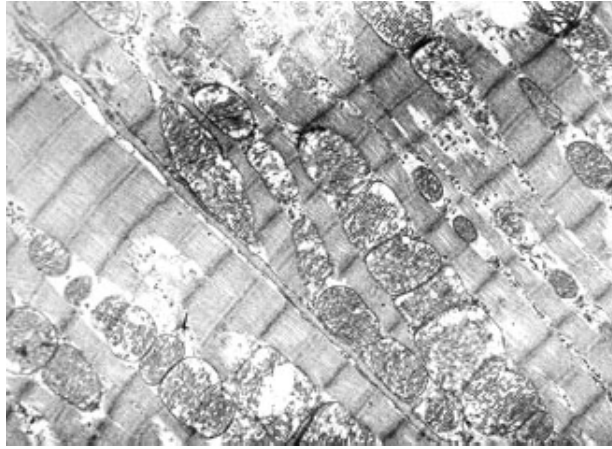


FIGURE 3. Structure en réseau des cellules musculaires cardiaques (microscope électronique).

2. Anatomie du coeur

La fonction organique du coeur est d'assurer la circulation du sang dans l'organisme. En tant que tel le coeur se scinde en deux parties, le coeur droit et le coeur gauche, agissant chacune comme une pompe. Le coeur droit pompe le sang dans les poumons et l'éjecte en direction du coeur gauche qui à son tour l'éjecte par l'aorte dans l'ensemble de l'organisme. Le coeur droit comme le coeur gauche se scindent en deux parties formant chacune une cavité : l'oreillette en haut et le ventricule.

La fonction de pompe du coeur est assurée par la contraction coordonnée de chacune de ses 4 sous parties. La contraction du muscle cardiaque (ou *myocarde*) est différente de la contraction d'un muscle moteur (par exemple du biceps) qui s'attache sur deux os et entraîne lors de sa contraction la mise en rotation d'un de ces os autour de leur articulation : le coeur ne s'appuie sur aucun os. La contraction musculaire du myocarde est rendue possible par son organisation en fibres musculaires (voir figure 4). Ces fibres s'enroulant autour des cavités cardiaques, elles entraînent lors de leur contraction, dans un phénomène de torsion, la diminution volumique des cavités cardiaques.

La contraction des fibres musculaires est commandée par la propagation du potentiel d'action cardiaque qui suit le parcours schématique suivant (voir figure 5) :

- initiation dans le *noeud sinusal*,
- propagation dans les oreillettes,
- passage par le noeud atrio-ventriculaire (A-V),
- propagation dans le tissu conducteur rapide,
- propagation dans les ventricules.

L'initiation de la propagation du potentiel d'action est assurée par un ensemble de cellules musculaires (cellules *pacemaker*) qui présente la

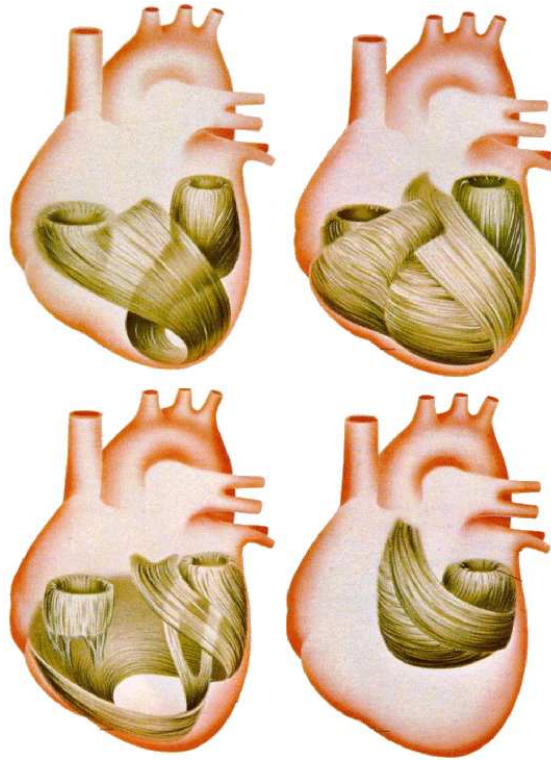


FIGURE 4. Organisation en fibres du myocarde.

particularité de s'exciter spontanément de manière cyclique et coordonnée. Ces cellules sont localisées en haut de l'oreillette droite dans le noeud sinusal. Ces cellules constituent le régulateur de la fréquence cardiaque et leur activité est modulée par divers facteurs organiques. Depuis le noeud sinusal le potentiel d'action se propage dans l'oreillette droite puis dans l'oreillette gauche.

Les oreillettes sont séparées des ventricules par une couche de tissu fibreux faiblement conducteurs. Le seul point de liaison entre les oreillettes et les ventricules est le noeud atrio-ventriculaire situé en bas de l'oreillette gauche. Le noeud atrio ventriculaire est relié à un tissu de conduction rapide (faisceau de Hiss, fibres de Purkinje) qui conduisent le potentiel d'action cardiaque vers le bas des cavités ventriculaires. De là, il se propage à l'ensemble des muscles ventriculaires.

Il est à noter (figure 5) que le profil du potentiel d'action est différent selon la classe de cellules musculaires considérée.

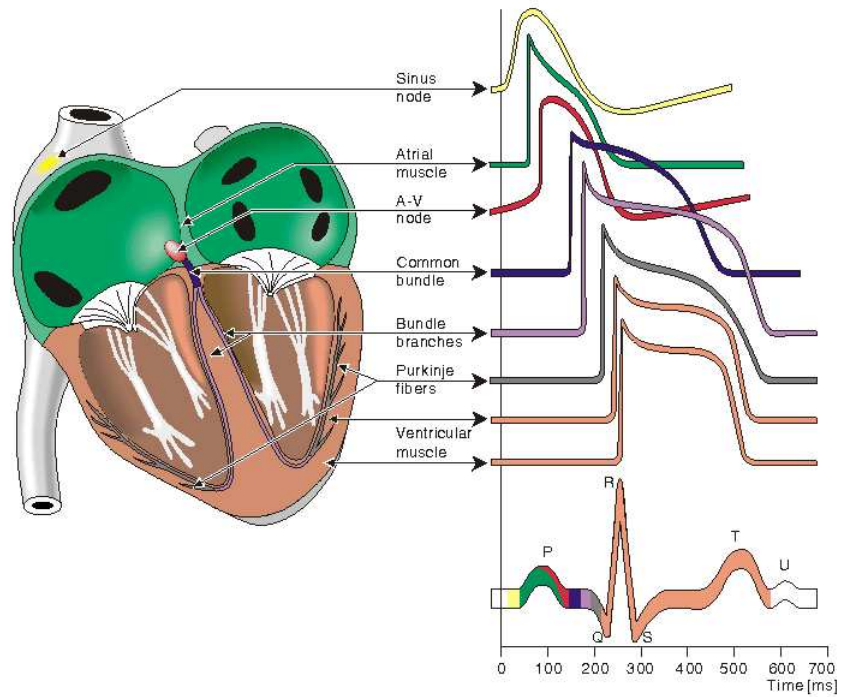


FIGURE 5. Propagation du potentiel d'action cardiaque et profil du potentiel d'action relatif à chaque partie du coeur.

CHAPITRE 2

Modèle macroscopique bidomaine pour le tissu cardiaque

A une échelle microscopique le tissu musculaire cardiaque se décompose en deux milieux distincts. Le premier est composé de l'ensemble des cellules musculaires cardiaques. Le second est formé du reste du volume cardiaque, composé du liquide interstitiel entre les myocytes ainsi que d'autres types de cellules (notamment fibreuses : collagènes). Ces deux milieux sont traditionnellement appelés en physiologie milieu *intra-cellulaire* et milieu *extra-cellulaire* respectivement. Il est à souligner que cette dénomination est relativement trompeuse dans la mesure où le milieu extra-cellulaire comporte lui même des cellules. Il faut donc entendre par milieu intra-cellulaire "*milieu à l'intérieur des cellules musculaires cardiaques*" et par milieu extra-cellulaire "*partie du coeur située à l'extérieur des cellules musculaires cardiaques*". De la même façon on appelle *membrane cellulaire* ou *membrane* la surface de séparation entre ces deux milieux qui est en réalité la membrane des cellules musculaires cardiaques.

A l'échelle microscopique, la propagation du potentiel d'action cardiaque est rendue possible par la structure en réseau du milieu intra-cellulaire (voir figure 3).

A l'échelle macroscopique la propagation du potentiel d'action est similaire à la propagation d'une onde dans un milieu continu. Le tissu cardiaque présente ainsi une dualité entre une structure discrète à l'échelle microscopique (structure en réseau) et un comportement continu à l'échelle macroscopique : en électrophysiologie cette dualité est appelée *nature syncytiale des tissus*.

Le modèle *bidomaine* (aussi appelé modèle syncytial) s'appuie sur cette dualité pour formuler, à partir de la prise en compte de la structure microscopique en réseau, des lois continues à l'échelle macroscopique.

Schmidt [105] a le premier émis cette idée de formuler une représentation macroscopique du tissu cardiaque à partir de deux domaines s'interpénétrant au niveau microscopique. Clerc [16] a repris cette idée et propose un modèle en dimension un (équation de câble) décrivant la propagation du potentiel d'action dans une cellule musculaire cardiaque à la fois le long de son grand axe et transversalement à cet axe. Tung [114] est le premier à avoir formulé mathématiquement le modèle bidomaine en dimension 3. Cette formulation a été reprise dans de nombreuses études, voir Henriquez [57] pour une revue. Krassowska et al.

[73, 71, 72], en assimilant le milieu intra-cellulaire microscopique à un réseau périodique de cellules cylindriques, ont établi formellement le modèle bidomaine à l'échelle macroscopique à partir de procédés d'homogénéisation de la structure microscopique.

Ambrosio *et al.* [3] et plus récemment Pennacchio *et al.* [99] ont démontré rigoureusement (en utilisant des techniques de Γ -convergence) un résultat de convergence des solutions d'un modèle à l'échelle microscopique vers les solutions du modèle bidomaine lorsque le taux de surface de membrane cellulaire par unité de volume tend vers l'infini, *i.e.* lorsque les milieux intra et extra-cellulaires s'interpénètrent à l'infini.

Le modèle bidomaine présente deux avantages majeurs. D'une part il repose sur des bases physiologiques établies expérimentalement à travers l'examen des structures aux niveaux cellulaire et macroscopique du coeur. D'autre part il peut être couplé avec un modèle de l'activité électrique thoracique (ce couplage étant lui aussi établi sur des bases physiologiques établies). Le modèle bidomaine est ainsi idéalement posé pour aborder le *problème direct de l'électrocardiologie* introduit au chapitre 4, dont l'objectif est la modélisation de l'activité électrique du couple coeur+thorax.

On présente dans un premier temps le modèle de tissu cardiaque à l'échelle microscopique en 1 qui servira d'introduction et de justification à l'introduction du modèle bidomaine en 2.

1. Modèle microscopique de tissu cardiaque

On considère le volume H occupé par le coeur comme scindé en deux sous espaces H_i et H_e (les milieux intra et extra-cellulaires). Géométriquement H_i et H_e sont deux ouverts tels que

$$\overline{H} = \overline{H_i} \cup \overline{H_e} \quad , \quad H_i \cap H_e = \emptyset \quad ,$$

et la présence de nombreuses jonctions entre cellules musculaires cardiaques est prise en compte en supposant que H_i est connexe (voir figure 1) de même que la membrane Γ_m séparant ces deux ouverts,

$$\Gamma_m = \partial H_i \cap \partial H_e = \partial H_i - \partial H_e \quad .$$

On supposera que la membrane est régulière et on définit \mathbf{n}_i la normale unitaire à Γ_m sortante pour H_i .

Les milieux intra et extra-cellulaires sont assimilés à des conducteurs passifs à l'état quasistatique (les échelles de temps en électrophysiologie, de l'ordre de la *ms* étant très larges par rapport aux échelles de temps en électromagnétisme), de sorte que l'on peut relier les potentiels électriques $\phi_{i,e} : H_{i,e} \mapsto \mathbb{R}$ dans les milieux intra et extra-cellulaires aux densités volumiques de courant $\mathbf{J}_{i,e} : H_{i,e} \mapsto \mathbb{R}^3$ par la loi d'Ohm :

$$\mathbf{J}_i = -g_i \nabla \phi_i \quad , \quad \mathbf{J}_e = -g_e \nabla \phi_e \quad ,$$

où $g_{i,e} : H_{i,e} \mapsto (0, +\infty)$ est la conductivité (scalaire) des milieux intra et extra-cellulaires.

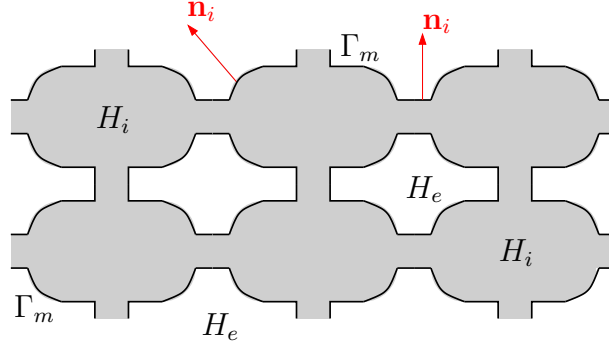


FIGURE 1. Milieux intra et extra-cellulaires.

Sous l'hypothèse de non création de charges les courants volumiques $\mathbf{J}_{i,e}$ sont à divergence nulle et les potentiels $\phi_{i,e}$ vérifient une équation de Laplace :

- (1) $\operatorname{div}(g_i \nabla \phi_i) = 0$ dans H_i
- (2) $\operatorname{div}(g_e \nabla \phi_e) = 0$ dans H_e .

L'aspect dynamique du modèle microscopique est uniquement porté par les phénomènes électriques membranaires.

On a d'abord une relation d'équilibre sur la membrane exprimant la conservation de la charge. Introduisant la densité surfacique de courant $I_m : \Gamma_m \mapsto \mathbb{R}$ mesurée de H_i vers H_e :

$$I_m = \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n}_i = \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{n}_i \quad \text{sur } \Gamma_m ,$$

soit en terme de potentiels :

- (3) $I_m = -g_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{n}_i = -g_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_i \quad \text{sur } \Gamma_m .$

On introduit le potentiel transmembranaire $V_m : \Gamma_m \mapsto \mathbb{R}$,

$$V_m = \phi_i - \phi_e .$$

La membrane Γ_m possède à la fois un comportement électrique capacitif et résistif.

Le comportement capacitif est dû au fait que la membrane est formée d'une double couche de lipides (voir figure 1) isolant le milieu intra-cellulaire du milieu extra-cellulaire. On introduit C_m la capacité par unité de surface de la membrane.

Les protéines membranaires assurant les transports ioniques entre les milieux intra et extra-cellulaires confèrent à la membrane sont comportement résistif : Γ_m est traversée par un courant ionique $I_{ion} : \Gamma_m \mapsto \mathbb{R}$, mesuré depuis H_i vers H_e . Ces courants ioniques sont étudiés au chapitre 3.

Il est à remarquer que cette description capacitive/résistive de la membrane cellulaire est déjà une modélisation "macroscopique" de Γ_m . En effet au sens strict soit l'on se trouve sur la double couche lipidique et

la membrane y a un comportement capacitif, soit l'on se trouve sur une protéine faisant transiter une espèce ionique et Γ_m y a un comportement résistif. Cependant ces protéines sont de petite taille et distribuées de manière dense sur Γ_m relativement à la taille d'une cellule. Ainsi l'on peut formuler statistiquement le comportement moyen de la membrane à l'échelle cellulaire.

I_m satisfait alors l'équation :

$$(4) \quad I_m = C_m \frac{\partial V_m}{\partial t} + I_{ion} = -g_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{n}_i = -g_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_i ,$$

Le modèle microscopique de tissu cardiaque apparaît comme un système de deux EDP de Laplace (1) (2) dans chacun des domaines H_i , H_e , couplées par la condition limite dynamique (4) sur Γ_m . Cette dynamique est alimentée par le métabolisme cellulaire qui entretient des courants ioniques à travers Γ_m à contre courant des gradients physiques. Pour compléter cette description il faut rajouter des conditions limites sur le bord ∂H du coeur, ces conditions limites sont détaillées en 2.3. L'existence de solutions pour ce système d'EDP a été établie dans [30] pour des conditions limites de type Neumann.

2. Modèle macroscopique bidomain

Le modèle microscopique en tant que tel est évidemment inexploitable à l'échelle du coeur entier. D'une part parce que la reconstitution de la géométrie fine à l'échelle cellulaire du coeur est hors de portée expérimentale et d'autre part parce que la taille du système à résoudre serait largement hors de portée des meilleurs calculateurs.

À une échelle macroscopique le coeur présente une structure continue et est organisé en fibres musculaires (voir figure 4). À cette échelle les milieux intra et extra-cellulaire sont indiscernables et l'on considère le volume cardiaque comme étant la superposition de ces deux milieux,

$$H = H_i = H_e .$$

Le degré d'interpénétration de ces deux domaines est donné par le taux de surface membranaire par unité de volume A_m .

2.1. Homogénéisation du modèle microscopique. À une échelle intermédiaire, les cellules musculaires ont une organisation en réseau quasi périodique (voir figure 3). On se place à cette échelle pour homogénéiser formellement les équations (1) (4) selon une analyse présentée en détail dans [71].

Considérant un volume B comportant un grand nombre de cellules, on définit sur B les quantités homogénéisées (tildées) $\tilde{I}_m, \tilde{I}_{ion}, \tilde{V}_m$:

$$\begin{aligned}\tilde{I}_m &= \frac{1}{|B \cap \Gamma_m|} \int_{B \cap \Gamma_m} I_m ds \quad , \quad \tilde{I}_{ion} = \frac{1}{|B \cap \Gamma_m|} \int_{B \cap \Gamma_m} I_{ion} ds \\ \tilde{V}_m &= \frac{1}{|B \cap \Gamma_m|} \int_{B \cap \Gamma_m} V_m ds\end{aligned}$$

où $|B \cap \Gamma_m|$ représente la surface de la membrane contenue dans B . Ces quantités vérifient l'équation (4) homogénéisée.

$$(5) \quad \tilde{I}_m = C_m \frac{\partial \tilde{V}_m}{\partial t} + \tilde{I}_{ion} .$$

On a par ailleurs avec (3) les relations suivantes, où \mathbf{n} désigne la normale sortante de B et $|B|$ la mesure de B :

$$(6) \quad \frac{1}{|B|} \int_{\partial B} \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{n} ds = \frac{1}{|B|} \int_{\partial B \cap \Gamma_m} \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{n}_i ds = \frac{1}{|B|} \int_{\partial B \cap \Gamma_m} I_m ds = \frac{|B \cap \Gamma_m|}{|B|} \tilde{I}_m ,$$

et de même :

$$(7) \quad \frac{1}{|B|} \int_{\partial B} \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n} ds = -\frac{|B \cap \Gamma_m|}{|B|} \tilde{I}_m$$

Les quantités $\int_{\partial B} \mathbf{J}_{i,e} \cdot \mathbf{n} ds / |B|$ s'interprètent à travers la formule de la divergence comme étant égales à la divergence du courant volumique homogénéisé $\tilde{\mathbf{J}}_{i,e}$:

$$\operatorname{div} \tilde{\mathbf{J}}_{i,e} := \frac{1}{|B|} \int_{\partial B} \mathbf{J}_{i,e} \cdot \mathbf{n} ds .$$

Utilisant le taux moyen de surface membranaire par unité de volume $A_m \gg 1$, les versions homogénéisées des équations (1) (4) sont données par (en omettant les tildes sur les quantités macroscopiques) :

$$(8) \quad \operatorname{div} (\mathbf{J}_i + \mathbf{J}_e) = 0$$

$$(9) \quad A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = \operatorname{div} \mathbf{J}_e .$$

2.2. Anisotropie des tissus à l'échelle macroscopique. Les variables de potentiel ϕ_i, ϕ_e, V_m ainsi que le courant ionique membranaire I_{ion} sont à l'échelle macroscopique étendus à des fonctions définies sur H tout entier :

$$\phi_i, \phi_e, V_m, I_{ion} : H \mapsto \mathbb{R} .$$

A cette échelle le muscle cardiaque est organisé en fibres musculaires (voir figure 4) ce qui lui confère une nature de conducteur anisotrope : la conductivité électrique est différente selon qu'on la mesure longitudinalement ou transversalement à la fibre. On introduit alors les tenseurs de conductivité macroscopiques G_i, G_e relatifs aux milieux intra et extra-cellulaires. Dans une base orthonormée dont le premier vecteur

est porté par la direction de la fibre musculaire au point $x \in H$, ces tenseurs sont donnés par :

$$G_{i,e}(x) = \text{Diag}(c_{i,e}^l, c_{i,e}^t, c_{i,e}^t) ,$$

où $c_{i,e}^l$ et $c_{i,e}^t$ désignent les conductivités électriques des milieux intra et extra-cellulaires dans la direction longitudinale ou transverse à la fibre en x .

En terme de potentiel, les équations (8) (9) se réécrivent comme :

$$(10) \quad V_m = \phi_i - \phi_e$$

$$(11) \quad \text{div}(G_e \nabla \phi_e + G_i \nabla \phi_i) = 0$$

$$(12) \quad A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = -\text{div}(G_e \nabla \phi_e) .$$

2.3. Conditions limites au bord du coeur. On présente ici les conditions limites au bord du coeur introduites originellement par Tung [114]. Krassowska *et al.* [72] ont justifié ces conditions limites en utilisant un procédé d'homogénéisation des conditions limites physiologiques ayant lieu au niveau cellulaire. D'autres types de conditions limites ont été utilisées dans la littérature [25, 54, 78], ces conditions sont discutées en 3.2.

Les conditions limites sont en réalité des relations de couplage entre l'activité électrique du coeur et celle du thorax exprimant la continuité du potentiel et la continuité du flux de courant à travers la frontière ∂H du coeur. On introduit ainsi le potentiel ϕ_T et la densité de courant volumique \mathbf{J}_T dans le thorax.

La nature du couplage entre l'activité électrique du coeur et celle du thorax est aujourd'hui encore mal identifiée et débattue ; des recherches supplémentaires au niveau physiologique comme au niveau numérique sont encore nécessaires pour clore cette question.

On présente ici un type de couplage coeur/thorax qui nous semble être pertinent avec les données physiologiques ; un second type de couplage coeur/thorax couramment utilisé sera détaillé et discuté en 3.2.

Page, dans [92], a observé expérimentalement au niveau cellulaire que le milieu intra-cellulaire n'est pas en contact avec le thorax. Ainsi le couplage entre le coeur et le thorax a lieu à travers le milieu extra-cellulaire H_e uniquement.

Krassowska *et al.* ont établis formellement une traduction macroscopique de ce couplage par procédé d'homogénéisation dans [72].

Macroscopiquement le couplage se formule par une condition de flux nul au bord du coeur pour ϕ_i (exprimant le fait qu'aucun courant ne sort du milieu intra-cellulaire vers le thorax), la continuité du potentiel

et du flux de courant sur ∂H sont ainsi reportées sur ϕ_e uniquement :

$$(13) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur} \quad \partial H$$

$$(14) \quad G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = \mathbf{J}_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H}$$

$$(15) \quad G_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = 0$$

où $\mathbf{n}_{\partial H}$ désigne la normale sortante au bord du cœur.

Si cette interprétation macroscopique nous semble pertinente avec les données physiologiques, on souligne cependant le fait qu'il n'existe pas de preuve mathématique rigoureuse pour la dérivation des relations d'interface (13) (15) : l'étude de Krassowska *et al.* [72] est formelle et repose en outre sur une interprétation de l'interface cœur/thorax ne prenant pas en compte les différentes micro-structures la composant.

Par ailleurs l'article de Page mentionné ci dessus sous entend également que le milieu extra-cellulaire ne se comporte pas comme un milieu homogène, hypothèse sur laquelle est fondé le modèle bidomain considéré ici.

2.4. Résumé du modèle bidomain. Le modèle bidomain comporte trois inconnues : V_m , ϕ_i , ϕ_e . Comme ces trois grandeurs sont reliées par $V_m = \phi_i - \phi_e$, on choisit de formuler le modèle bidomain en fonction de V_m et ϕ_e uniquement.

Si cette formulation est mathématiquement strictement équivalente à celle des sections précédentes, physiologiquement la formulation qui fait sens est celle en terme de V_m , ϕ_i et ϕ_e . Notamment la condition (20) doit être pensée comme une condition de flux nul sur ϕ_i au bord du cœur.

On souligne également la différence physique de nature entre V_m et ϕ_e : ϕ_e est un potentiel et est donc défini, contrairement à V_m , à une constante additive près.

Le problème à résoudre est constitué d'une équation d'évolution couplée avec une équation elliptique,

$$(16) \quad A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = -\text{div} (G_e \nabla \phi_e)$$

$$(17) \quad \text{div} ((G_i + G_e) \nabla \phi_e) = -\text{div} (G_i \nabla V_m)$$

avec les conditions limites au bord du cœur,

$$(18) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur} \quad \partial H$$

$$(19) \quad G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H}$$

$$(20) \quad G_i \nabla V_m \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = -G_i \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H}$$

et la condition initiale sur V_m :

$$(21) \quad V_m(x, t = 0) = V_m^0,$$

la donnée initiale sur ϕ_e étant définie par l'équation elliptique (17).

Des valeurs caractéristiques pour les constantes physiques, quoique variables selon les auteurs, peuvent être avancées (voir par exemple [76, 103]) :

constante	valeur et unité	
A_m	2000	cm^{-1}
C_m	1.0	$\mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$
c_i^l	3.0	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_i^t	0.32	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_e^l	2.0	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_e^t	1.35	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$

TABLE 1. Valeurs caractéristiques pour les constantes du modèle bidomaine.

2.5. Le modèle monodomaine. Une difficulté majeure (théorique et numérique) du modèle bidomaine est que dans l'équation d'évolution (16) l'opérateur différentiel $-\text{div}(G_e \nabla \phi_e)$ n'est pas donné explicitement à partir de V_m mais seulement implicitement par le problème elliptique (17).

Numériquement on doit donc résoudre une équation elliptique à chaque pas de temps afin de réactualiser la variable V_m .

Dans le cas particulier où les rapports d'anisotropie dans les milieux intra et extra-cellulaires sont égaux, c'est à dire s'il existe une constante $\lambda > 0$ telle que

$$(22) \quad \forall x \in H : G_i(x) = \lambda G_e(x),$$

cette difficulté peut être contournée et les équations (16) (17) peuvent se réécrire en une seule équation sur V_m .

En effet (17) se réécrit comme,

$$(\lambda + 1)\text{div}(G_e \nabla \phi_e) = -\text{div}(G_i \nabla V_m)$$

de sorte que l'on a :

$$(23) \quad A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = \frac{1}{\lambda + 1} \text{div}(G_i \nabla V_m).$$

Cette simplification du modèle bidomaine est appelée modèle *monodomaine*.

Cette formulation simplifiée est adaptée au cas où le coeur est supposé isolé. On peut alors se contenter de calculer le potentiel transmembranaire V_m à partir de l'équation (23) complétée par des conditions de flux nul Neumann homogène au bord du coeur.

En revanche si l'on considère le cas où l'activité du coeur est couplée avec celle du thorax, les relations de couplage (18) (20) rendent nécessaire de recalculer le potentiel extra-cellulaire ϕ_e à partir de V_m et de l'équation (17), auquel cas le modèle monodomaine devient équivalent en terme

de coût en temps de calcul au modèle bidomaine.

Enfin l'hypothèse 22 n'est pas vérifiée physiologiquement, les rapports d'anisotropie $c_{i,e}^l/c_{i,e}^t$ dans les milieux intra et extra-cellulaires diffèrent d'un facteur de l'ordre de 6 (voir table 1).

On mentionne cependant que récemment (voir [15, 28, 29]), le modèle monodomaine a été dérivé comme une approximation du modèle bidomaine, sans utiliser l'hypothèse des rapports d'anisotropie égaux. Cette approximation permet de coupler l'activité électrique du coeur et celle du thorax à partir de deux équations elliptiques : une dans le coeur et une dans le thorax, couplées sur l'interface coeur/thorax.

CHAPITRE 3

Modélisation des courants ioniques membranaires

Afin de fermer le modèle bidomaine introduit au chapitre précédent, il faut y inclure un modèle du transport ionique à travers la membrane cellulaire – dont la physiologie élémentaire est décrite en 1 – afin de calculer le courant ionique I_{ion} membranaire. Le transport ionique membranaire est tout à fait complexe et n'est aujourd'hui que partiellement compris. Il n'est ainsi pas envisageable de modéliser ces phénomènes dans leur ensemble. On se limite à la modélisation du transport ionique membranaire de trois espèces ioniques : le sodium Na^+ , le potassium K^+ et le calcium Ca^{2+} .

Le transport des ions sodium et potassium permet de modéliser le potentiel d'action cellulaire; l'ion Ca^{2+} participe également à la dépolarisation de la cellule. En réalité d'autres ions participent aux processus de dépolarisation et de repolarisation. C'est le cas de l'ion chlorure Cl^- qui permet de conserver l'électroneutralité des solutés. Sa dynamique n'influant pas sur le profil du potentiel de membrane V_m on ne le prend pas en compte. Le pH (de même que certaines drogues) est également influent dans la mesure où il perturbe le comportement de certaines protéines intervenant dans le transport ionique. Dans l'absolu son influence pourrait être prise en compte en modélisant le transport de l'ion H^+ à travers la membrane. En pratique cette influence sera prise en compte de manière indirecte en modifiant certains paramètres du modèle.

La modélisation de la dynamique de l'ion Ca^{2+} permet de coupler un modèle de la propagation du potentiel d'action cardiaque à un modèle mécanique du myocarde. Une description fine de cet ion est ainsi fondamentale en électrocardiologie.

1. Processus du transport ionique membranaire

Le transit de substances (moléculaires ou ioniques) d'un côté à l'autre de la membrane cellulaire est contrôlé par des protéines membranaires. Pour une telle protéine, le transport d'une substance est le résultat d'un processus chimique lui permettant de capter cette substance par une de ses extrémités et de libérer la même substance sur l'autre extrémité. Cette activité est en général spécifique et orientée : un type de protéine est spécialisé dans le transport d'une substance et effectue ce transport dans un seul sens (de l'intérieur vers l'extérieur ou le contraire).

Les modèles récents de membrane classent les protéines membranaires chargées du transport ionique selon trois catégories : les *canaux ioniques*, les *pompes* et les *transporteurs*. Un canal ionique fait transiter un ion dans le sens de son gradient électrochimique uniquement. Les pompes et les transporteurs ont la capacité de faire transiter une espèce ionique dans le sens contraire à son gradient électrochimique. Leur activité nécessite donc une source d'énergie. Le rôle des pompes et des transporteurs est de ramener les concentrations ioniques dans la cellule vers leurs valeurs normales après que celles-ci aient été modifiées, par l'ouverture d'un canal ionique notamment.

1.0.1. *Les canaux ioniques.* Un canal ionique laisse passer dans un sens donné une espèce ionique conformément à son gradient électrochimique. Son comportement est simplement modélisé par une résistance. On parle de *transport passif* relativement aux canaux ioniques dans le sens où leur activité ne demande aucun apport en énergie. Un canal ionique est cependant actif dans la mesure où sa conductivité est variable selon les conditions extérieures ; il peut en particulier être fermé.

Le canal ionique le plus étudié est sans doute le canal sodium rapide qui permet au sodium Na^+ de pénétrer dans la cellule. Ce canal est l'acteur principal de la dépolarisation cellulaire.

Le courant i_{Na} d'ions Na^+ à travers ce canal est proportionnel à son gradient électrochimique,

$$(24) \quad i_{Na} = g_{Na} (V_m - E_{Na}) ,$$

où le potentiel électrochimique E_{Na} de l'ion Na^+ est donné par la loi de Nernst en fonction des concentrations intra-cellulaire et extra-cellulaire $[Na]_i$, $[Na]_e$ en ion sodium,

$$(25) \quad E_{Na} = \frac{RT}{\mathcal{F}} \ln \frac{[Na]_e}{[Na]_i} ,$$

(R , T et \mathcal{F} désignant respectivement la constante des gaz parfaits, la température et la constante de Faraday).

La conductivité g_{Na} du canal ionique dépend de plusieurs facteurs : des concentrations intra et extra-cellulaires en Na^+ et du potentiel transmembranaire V_m notamment ; cette liste n'étant pas exhaustive. En introduisant la variable de porte $0 \leq H \leq 1$ décrivant l'état d'ouverture du canal ionique et sa conductivité maximale \bar{g}_{Na} on écrit :

$$(26) \quad g_{Na} = \bar{g}_{Na} H .$$

Il est délicat de déterminer l'ensemble des variables intervenant dans la fonction de porte H . Il est encore plus difficile de donner explicitement la loi qui lie H à ces variables, $H = H(V_m, [Na]_i, [Na]_e, \dots)$, d'autant plus que ces paramètres sont en interdépendance.

En pratique le comportement de H est établi de façon phénoménologique. Dans le modèle originel de Hodgkin et Huxley [65], H était déterminée

à partir de deux variables de porte, $H = H(m, h)$, elles mêmes obéissant à des ODE :

$$\frac{dm}{dt} = f_m(V_m, m) \quad , \quad \frac{dh}{dt} = f_h(V_m, h) \quad .$$

D'autres facteurs peuvent affecter les propriétés générales d'un canal ionique. Par exemple la conductivité maximale \bar{g}_{Na} du canal sodium rapide dépend du pH . Si le milieu intra-cellulaire est trop acide, cette conductivité est diminuée, ce qui affecte sensiblement le profil du potentiel d'action. Ce phénomène se produit lors de l'ischémie : le manque en oxygène du tissu cardiaque engendrant une acidose des tissus.

1.0.2. *Les pompes.* Les pompes sont des protéines membranaires qui peuvent faire entrer et sortir des espèces ioniques à contre-courant de leurs gradients électrochimiques. L'énergie nécessaire à leur fonction est directement fournie par le métabolisme cellulaire, précisément par les molécules d'*ATP* (Adénosine Tri Phosphate) dont l'hydrolyse constitue la source énergétique de la cellule.

L'exemple type de pompe est la pompe $Na/K - ATPase$. Pour une molécule d'*ATP* hydrolysée, cette pompe fait rentrer deux ions potassium K^+ et sortir trois ions sodium Na^+ dans le même temps. Au repos la cellule est fortement concentrée en potassium et faiblement concentrée en sodium. A la fin du potentiel d'action cellulaire, la cellule s'est enrichie en sodium et appauvrie en potassium (suite à l'ouverture du canal ionique sodium rentrant, lors de la dépolarisation, et du canal ionique potassium sortant, pendant la repolarisation). L'activation de la pompe Na/K permet alors à la cellule de retrouver ses concentrations initiales en sodium et potassium.

L'activité de cette pompe est liée aux concentrations $[K]_{i,e}$ et $[Na]_{i,e}$ ainsi qu'au potentiel membranaire et à l'*ATP*. Elle est traversée par un courant d'intensité $i_{Na/K}$ donné par :

$$i_{Na/K} = F(V_m, [Na]_{i,e}, [K]_{i,e}, ATP) \quad .$$

Les courants en ion sodium, $i_{Na, Na/K}$, et en ion potassium, $i_{K, Na/K}$, à travers cette pompe sont calculés à partir de ce courant

$$i_{Na, Na/K} = 3i_{Na/K} \quad , \quad i_{K, Na/K} = -2i_{Na/K} \quad ,$$

ce qui permet de réactualiser les concentrations intra et extra-cellulaires en sodium et potassium.

1.0.3. *Les transporteurs.* Les transporteurs réalisent un transport ionique actif à travers la membrane mais n'utilisent pas directement l'énergie issue du métabolisme cellulaire : l'énergie est fournie par un ion qui suit son gradient électrochimique. Ce phénomène s'appelle transport couplé, car il couple un canal ionique à un transporteur membranaire et utilise l'énergie de l'un pour activer l'autre. On peut cependant considérer que l'énergie utilisée par les transporteurs provient indirectement de l'activité métabolique de la cellule. En effet l'existence

de gradients électrochimiques est due à la polarisation de la cellule elle même réalisée par la pompe Na/K. On peut ainsi considérer que c'est bien l'*ATP* qui a fourni, indirectement, l'énergie.

Le flux ionique à travers un transporteur est calculé par une loi explicite prenant en compte les concentrations intra et extra-cellulaires de l'ion qui le traverse ainsi que l'état (actif ou non) du canal ionique qui lui est associé.

1.0.4. *Modèle déterministe ou modèle probabiliste ?* Les différents acteurs du transport ionique membranaire ont un comportement présenté ici comme déterministe. Le courant traversant tel type de protéine membranaire est déterminé par une loi faisant intervenir différents facteurs. Cette représentation déterministe est en réalité un effet statistique. Individuellement l'état dans lequel se trouve un canal ionique (par exemple) revêt une certaine marge aléatoire. Ces protéines étant très densément réparties sur la membrane leur comportement global obéit à des règles déterministes.

Cependant il apparaît que deux canaux ioniques du même type peuvent avoir des comportements sensiblement différents (pour des raisons de mutations lors de leurs synthèses), impliquant un certain aspect probabiliste dans le comportement d'un ensemble de canaux ioniques. Cet aspect a été récemment pris en compte dans un modèle de transport ionique membranaire : Colleen *et al.* [17] et Faber *et al.* [47] ont utilisé des modèles probabilistes pour modéliser le comportement de canaux ioniques.

2. La dynamique du calcium : les tampons

La concentration en calcium Ca^{2+} dans le cytoplasme est très faible ($\simeq 10^{-6}, 10^{-7} \text{ mol.L}^{-1}$). Cet ion est par contre plus concentré dans le milieu extérieur ($[Ca^{2+}]_e \simeq 10^{-3} \text{ mol.L}^{-1}$) et ce gradient de concentration est utilisé lors de la repolarisation cellulaire ou un courant rentrant de Ca^{2+} prend place par le canal Ca^{2+} . Quoique le gradient électrochimique du calcium soit important, la concentrations extra-cellulaire en Ca^{2+} est faible comparée à $[K]_i$ ou à $[Na]_e$. L'influence du courant ionique membranaire de calcium sur la repolarisation reste ainsi limité comparée à celle du potassium.

Dans le cytoplasme le calcium est toxique et sa concentration doit rester faible. On distingue plusieurs mécanismes de régulation de cette concentration :

- la pompe *Ca* et le transporteur *Na/Ca* permettent de rejeter du calcium dans le milieu extra-cellulaire ;
- des structures *tampons* situées dans la cellule et dont le but est de stocker le calcium. Les tampons jouent un rôle important dans la contraction musculaire en relâchant dans le cytoplasme une partie du calcium qu'ils ont accumulé.

Les tampons sont des protéines capables de stocker le calcium. L'un de ces tampons est la *troponine* qui fait partie du dispositif de la contraction : elle capte le calcium au delà d'une certaine concentration ce qui active la contraction.

Un second acteur de la régulation du calcium est le *réticulum sarcoplasmique*. Cet organite contient une molécule tampon (la *calséquestrine*). Lors de la repolarisation, un flux entrant de Ca^{2+} pénètre la cellule. Conjointement le réticulum sarcoplasmique relâche du calcium dans le milieu intra-cellulaire. Ces deux évènements coordonnés entraînent ensuite la contraction.

Le réticulum sarcoplasmique est une structure fermée intra-cellulaire qui récupère le calcium par la pompe *Ca*. A l'intérieur du réticulum le calcium est stocké par la *calséquestrine*. Le réticulum relâche ce calcium lors de la repolarisation, en utilisant deux canaux ioniques (voir figure 1).

3. Modèles de membrane

3.0.5. *Présentation historique.* L'histoire de la modélisation des transports ioniques membranaires est étroitement liée à l'évolution des techniques expérimentales en biologie cellulaire.

Une première étape est franchie en 1952 par Hodgkin et Huxley [65] qui proposèrent le premier modèle du potentiel d'action cellulaire. Ce modèle fut établi pour l'axone géant de la pieuvre qui est probablement, pour des raisons de dimensions, la cellule excitable la plus simple à étudier.

Ce modèle originel modélise le potentiel d'action à partir de trois courants ioniques,

$$(27) \quad I_{ion} = I_{Na} + I_K + I_L .$$

Le premier courant correspond à la modélisation du canal sodium rapide. Le second modélise le flux de potassium sortant lors de la repolarisation. Le courant I_L est un courant de correction modélisant les autres courants membranaires non identifiés alors.

Ce modèle a été adapté à d'autres types de cellules et amélioré en considérant un plus grand nombre de canaux ioniques. En 1962, Noble [91] propose la première adaptation aux cellules musculaires cardiaques. Ce modèle provient de l'étude de cellules du réseau de Purkinje qui sont de grande taille et donc plus faciles à étudier. Ce premier modèle en électrocardiologie reprend la décomposition (27), il a été par la suite affiné par McAllister, Noble et Tsien [86] en 1975 qui proposent une modélisation de la dépolarisation à partir de trois courants sortant de potassium (trois canaux ioniques) et deux courants rentrant de calcium.

Le premier modèle pour le ventricule chez les mammifères est proposé

en 1977 par Beeler et Reuter [7]. Cette description a subi plusieurs améliorations dont la plus significative en 1991 par Luo et Rudy [82].

Tous ces modèles présentent le même inconvénient, ils ne modélisent que des canaux ioniques et par conséquent ne permettent pas d'expliquer le retour des concentrations en sodium et potassium à leur niveau initial.

Une seconde étape est marquée en 1985 par Di Francesco et Noble [37] qui introduisent une modélisation des pompes. Leur modèle décrit la dépolarisation par le canal sodium rapide et la repolarisation par trois canaux à potassium et deux canaux à calcium. Deux pompes sont modélisées, la pompe Na/K et la pompe Na/Ca dont l'action permet aux concentrations en sodium, potassium et calcium de retrouver leurs états initiaux.

Une troisième étape importante est marquée en 1994 par le second modèle de Luo et Rudy [84, 83] qui, dans un modèle de cellule ventriculaire, ont pris en compte les mécanismes intra-cellulaires de la régulation du calcium (voir figure 1). Ce modèle prend en compte à la fois l'effet tampon de la troponine (directement liée à la contraction musculaire) et celui du réticulum sarcoplasmique (voir figure 1); un troisième tampon, la *calmoduline*, est également considéré.

Dans les dix dernières années ce modèle a été constamment amélioré. Zeng *et al.* [118] proposent une description améliorée des canaux ioniques potassium pour la repolarisation. Shaw et Rudy [108] proposent des adaptations du modèle simulant des dysfonctionnements pathologiques, tels que l'ischémie. Colleen *et al.* [17] propose une version probabiliste du modèle, certains canaux ioniques ayant un fonctionnement aléatoire... Tous ces modèles sont issus d'expérimentations sur les cellules ventriculaires du cochon d'Inde. Dernièrement Tusscher [113] a proposé un modèle adapté aux cellules ventriculaires de l'homme.

Enfin on précise que cette bibliographie a pour objet principal les cellules ventriculaires, responsables de l'essentiel de l'activité électrique cardiaque. De nombreuses autres études portant sur d'autres types de cellules cardiaques, notamment les cellules *pacemaker* du noeud sinusal, ont également été publiées.

3.0.6. *Implémentation.* Dans la partie 3 on utilisera des modèles de membrane du type Luo, Rudy II. Pour modéliser le potentiel d'action cellulaire normal on utilisera le modèle de Faber et Rudy [47] ainsi que le modèle de Shaw et Rudy [108] pour modéliser le potentiel d'action d'une cellule en état d'ischémie.

L'intensité surfacique du courant ionique membranaire I_{ion} est calculé en le décomposant en chacune de ses composantes

$$I_{ion} = \sum_X I_X ,$$

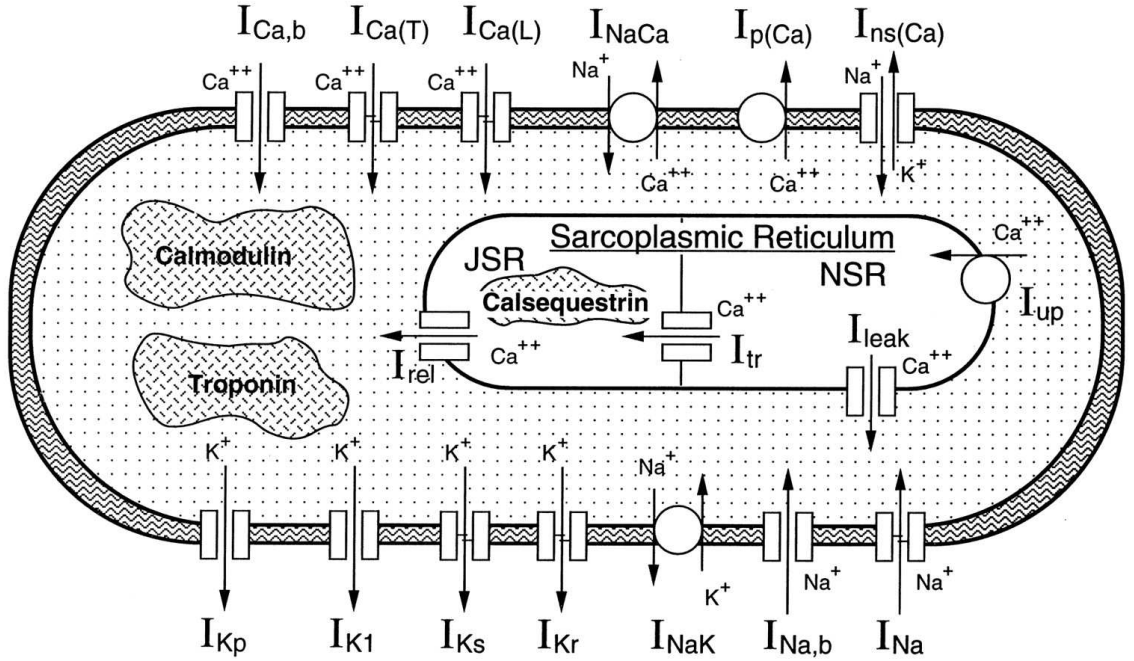


FIGURE 1. Diagramme du modèle Luo, Rudy II

où I_X est le courant à travers chaque pompe, canal ou transporteur pris en compte.

Le courant à travers une pompe ou un transporteur est donné par une loi explicite faisant intervenir le potentiel transmembranaire et des concentrations ioniques.

Pour un canal ionique X le courant qui le traverse est donné par les lois (24) (26). Son calcul nécessite d'une part le calcul du potentiel électrochimique E_x pour l'ion x traversant X , ce potentiel est donné par la loi de Nernst (25) qui fait intervenir les concentrations $[x]_{i,e}$. D'autre part il faut calculer la fonction de porte H_X du canal X . Pour certains canaux H_X est calculée explicitement. Pour d'autres son calcul fait intervenir des variables de porte $H_X = H_X(\mathbf{w}^X)$, $\mathbf{w}^X = w_1^X, \dots, w_N^X$. Chacune de ces variables est définie implicitement par une EDO,

$$\frac{dw_i^X}{dt} = f_i(V_m, w_i^X).$$

Parmi ces EDO, celles relatives aux variables de porte du canal sodium rapide sont raides et doivent être résolues par des méthodes adaptées (voir section 1.2).

Les concentrations en sodium, potassium et calcium sont réactualisées à chaque instant à partir du calcul des flux totaux I_{Na} , I_K et I_{Ca} sortant de la cellule. La concentration en calcium intra-cellulaire fait également intervenir les processus de tamponnage. En particulier il est nécessaire

pour prendre en compte l'influence du réticulum sarcoplasmique sur la concentration en calcium de définir les concentrations $[Ca]_{NSR}$ et $[Ca]_{JSR}$ à l'intérieur du réticulum (voir figure 1). Ces concentrations sont données par des formules explicites.

Au final le calcul de I_{ion} fait intervenir $1 + 6 + N$ paramètres qui doivent être réactualisés à chaque instant et qui se décomposent comme

- le potentiel transmembranaire V_m ;
- 6 concentrations ioniques $[Na]_{i,e}$, $[K]_{i,e}$, $[Ca]_{i,e}$;
- N variables de porte.

Cette actualisation se fait à partir d'un système d'EDO et ce calcul peut être résumé comme :

$$(28) \quad \begin{aligned} I_{ion} &= I_{ion}(V_m; [X_1], \dots, [X_6]; w_1, \dots, w_N) \\ \frac{d[X_i]}{dt} &= \lambda I_{X_i} \quad , \quad i = 1 \dots 6 \\ \frac{dw_j}{dt} &= f_j(V_m, w_i) \quad , \quad j = 1 \dots N . \end{aligned}$$

Pour les modèles du type Luo Rudy, le nombre de variables de porte est de l'ordre de $N \simeq 15$.

3.0.7. *Les modèles non physiologiques.* D'autres modèles ont été introduits comme des approximations des modèles de courants ioniques. Ces modèles ne sont pas réalistes dans la mesure où les quantités qu'ils font intervenir ne sont pas interprétables en terme de grandeurs biologiques : ils se contentent de décrire le phénomène d'excitabilité cellulaire. Leur avantage est de ne faire intervenir qu'un petit nombre de paramètres, ils sont en conséquence très pratiques pour formuler une analyse numérique du modèle complet. On utilisera ce type de modèle dans la partie 2.

Le modèle de Fitzhugh et Nagumo [49, 89] est une approximation du modèle originel de Hodgkin et Huxley [65]. Il fait intervenir en plus du potentiel transmembranaire une seconde variable u – dite de recouvrement – qui permet de simuler la repolarisation. On peut écrire ce modèle comme :

$$\begin{aligned} I_{ion} &= I_{ion}(V_m, u) = -\frac{1}{\varepsilon} (f(V_m) - u) \\ \frac{du}{dt} &= k(V_m - V_r) - u \quad , \quad k > 0 , \end{aligned}$$

où $\varepsilon \ll 1$ rend compte de la raideur de la dépolarisation, et f est une fonction de type cubique $f(v) = -(v - V_r)(v - V_s)(v - V_a)$, $V_r < V_s < V_a$ représentant le potentiel de repos, de seuil et le potentiel d'activité.

Aliev et Panfilov [96] ont proposé en 1996 une version modifiée du modèle de Fitzhugh Nagumo plus adaptée aux cellules musculaires

cardiaques. Il est donné par :

$$I_{ion} = I_{ion}(V_m, u) = -\frac{1}{\varepsilon} (k f(V_m) - V_m u)$$
$$\frac{du}{dt} = k (V_m - V_r) (V_s + V_a - V_m) - u \quad , \quad k > 0 .$$

En plus d'être mieux adapté à la description du potentiel d'action cardiaque, il existe pour ce modèle une dépendance simple entre ses paramètres, k et V_s , et les caractéristiques globales de la propagation du potentiel d'action (vitesse et APD) établie en 1.4.

CHAPITRE 4

Le problème direct en électrocardiologie

1. Introduction

L'activité électrique cardiaque est à l'origine d'un champ de potentiel dans le thorax (variable en temps et en espace) qui peut se mesurer à la surface du corps. L'existence de ce champ de potentiel a été mise en évidence il y a plus de 100 ans par Waller [115]. La technique de mesure de Waller a été par la suite améliorée par Einthoven [41], qui a mis au point un appareil suffisamment sensible pour enregistrer les variations dans le temps du potentiel de surface. Son procédé d'enregistrement fut dénommé électrocardiogramme par Waller et est l'ancêtre de l'examen moderne du même nom. Waller et Einthoven ont mis en évidence que ce potentiel de surface était en relation avec l'activité cardiaque pour la correspondance entre les variations de ce potentiel en temps et les battements du coeur. Ces travaux valurent à Einthoven d'être lauréat du prix Nobel de physiologie en 1924.

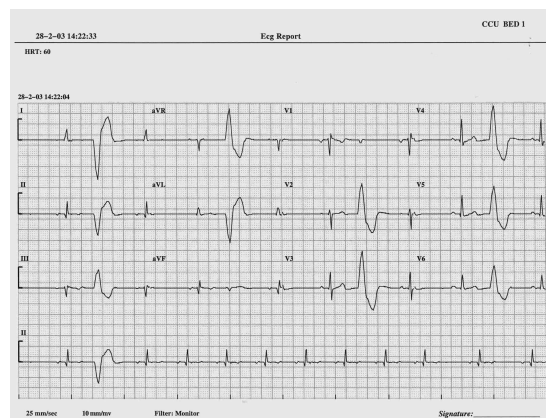


FIGURE 1. Enregistrement standard sur 12 électrodes de l'ECG

La technique de l'ECG d'Einthoven a été modernisée par la suite. Le nombre d'électrodes utilisées ainsi que leur placement sur le corps a évolué pour aboutir dans les années cinquante à une version standardisée, actuellement en vigueur, utilisant 12 électrodes : la figure 1 illustre les différences de forme de l'ECG selon l'électrode d'enregistrement.

Une période d'un ECG est divisée en trois zones, *P*, *QRS* et *T* (voir figure 2). Cette terminologie standard introduite par Einthoven est

actuellement comprise de la manière suivante : l'onde P correspond à la dépolarisation des oreillettes en début de cycle cardiaque, le complexe QRS correspond à la dépolarisation des ventricules et l'onde T à leur repolarisation en fin de cycle.

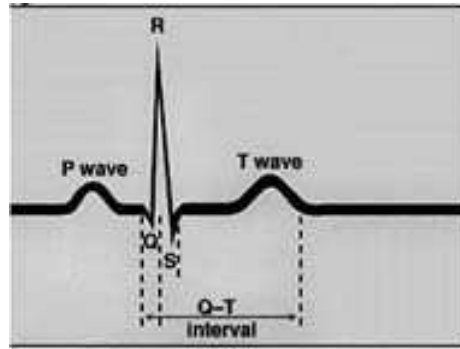


FIGURE 2. Terminologie descriptive classique P , QRS , T de l'ECG.

L'ECG est, dès les origines, interprété en terme d'amplitude et d'intervalles de temps reliés à des états cliniquement identifiés. Par exemple une amplitude anormalement élevée du complexe QRS est caractéristique d'une hypertrophie ventriculaire. Le diagnostic par ECG a été considérablement affiné depuis la version standard de l'ECG il y a 60 ans et l'ECG est actuellement l'outil le plus utilisé pour l'examen de la fonction cardiaque.

Le *problème direct en électrocardiologie* est celui de la reconstitution du potentiel de surface à partir de la modélisation de l'activité électrique cardiaque. Il a pour objectif d'améliorer la compréhension de l'influence des paramètres physiologiques et géométriques du coeur sur le potentiel de surface, notamment afin de faire progresser le diagnostic par ECG. Ce problème est également un premier pas vers le *problème inverse en électrocardiologie* dont l'objectif est la reconstitution de l'état physiologique du coeur à partir de la mesure du potentiel de surface.

2. Modèles dipolaires

Un premier pas vers la modélisation en électrocardiologie a été accompli à l'origine par Einthoven et Waller qui ont suggéré que le coeur se comporte électriquement comme un dipôle. Einthoven a mis au point une technique de reconstitution du *vecteur cardiaque* (le moment de ce dipôle) à partir de la mesure de l'ECG en trois points. Le vecteur cardiaque est un vecteur tournant de façon cyclique dont les caractéristiques sont toujours utilisées pour le diagnostic, par exemple une déflexion prononcée à droite du vecteur cardiaque est caractéristique d'une hypertrophie du ventricule droit.

Cette première modélisation de l'activité électrique du coeur agissant comme un dipôle est confortée phénoménologiquement par le fait que le muscle cardiaque est parcouru par une onde de dépolarisation dont le front d'onde est raide. Ce front d'onde apparaît comme une couche mince séparant deux zones de charges électriques différentes. Cette configuration s'interprète naturellement en terme de dipôle mobile.

Cependant ce modèle s'est par la suite avéré être en inadéquation avec l'expérience. Dans les années 60 une modélisation en plusieurs dipôles [111, 51] est proposée afin de mieux prendre en compte la forme du front de l'onde de dépolarisation. Le coeur est alors idéalement représenté comme une source de courant généré par une distribution spatiale de dipôles sur la surface du front d'onde et orientés perpendiculairement à cette surface. Colli-Franzone *et al.* ont amélioré cette modélisation dans [27, 26, 19, 25] en y incluant l'influence de l'anisotropie du milieu cardiaque et de la rotation des fibres musculaires en proposant le modèle d'*oblique dipôle layer*, les résultats numériques de ce modèle ont été confrontés avec les données expérimentales dans plusieurs articles [31, 32, 21, 22, 24].

Ce modèle est particulièrement intéressant pour la compréhension du potentiel extra-cardiaque et la correspondance qu'il établit entre l'évolution en temps de la position du front de l'onde de dépolarisation, l'anisotropie du milieu cardiaque et le potentiel de surface. De plus, comme seul le déplacement du front de l'onde de dépolarisation est pris en compte, ce modèle présente un avantage certain en terme de coût en temps de calcul.

2.1. Modèle eikonal. Le modèle eikonal s'attache à la modélisation de la dynamique du front de l'onde de dépolarisation. Il a pour justification théorique le fait que ce front d'onde est raide ce qui permet de procéder à une analyse de perturbation singulière du modèle bidomaine.

Keener [69] a proposé un tel modèle prenant en compte la distribution des fibres musculaires sur la propagation du front de l'onde dans le cadre du modèle monodomaine. Colli-Franzone *et al.* [25, 23, 18, 20] ont proposé une version plus générale de cette analyse dans le cadre du modèle bidomaine, que l'on résume ici.

Dans l'optique de modéliser l'évolution du front d'onde, il n'est pas nécessaire de traiter l'ensemble des courants ioniques membranaires intervenant dans le cycle complet du potentiel d'action cellulaire. La dépolarisation est due au courant sodium rapide I_{Na} qui est voltage-dépendant et dont la dynamique (voir par exemple [25]) est modélisée par :

$$I_{ion} \simeq I_{Na} = -g_{Na} f(V_m) ,$$

où g_{Na} est la conductivité maximale du canal sodium rapide et où f est une fonction de type cubique ; c'est à dire telle que $f \in C^1(\mathbb{R})$ s'annule exactement trois fois,

$$f(V_r) = f(V_s) = f(V_a) = 0 \quad \text{et} \quad V_r < V_s < V_a ,$$

et vérifie $f'(V_r) < 0$, $f'(V_a) < 0$. V_r est la différence de potentiel membranaire au repos et V_a la différence de potentiel membranaire en haut du front d'onde. Le potentiel de seuil d'excitabilité V_s doit être tel que $\int_{V_r}^{V_a} f(v)dv > 0$ ce qui assure que I_{Na} agit comme une bascule faisant passer de la valeur V_r à la valeur V_a .

L'exemple type de fonction cubique est donné par :

(29)

$$f(v) = -\Lambda(v-V_r)(v-V_s)(v-V_a) , \quad V_r < V_s < V_a \quad \text{et} \quad V_s < \frac{V_r + V_a}{2} .$$

Le modèle bidomaine (16) (21) sur le domaine H occupé par le coeur se réécrit alors dans la région du front d'onde comme :

$$(30) \quad A_m C_m \partial_t V_m = -\text{div}(G_e \nabla \phi_e) + A_m g_{Na} f(V_m)$$

$$(31) \quad \text{div}(G \nabla \phi_e) = -\text{div}(G_i \nabla V_m) ,$$

où $G = G_i + G_e$ est la somme des tenseurs de conductivité intra et extra-cellulaires.

En adimensionnant les échelles de temps et d'espace de telle sorte que la vitesse de propagation du front d'onde soit de l'ordre de 1, et en utilisant les ordres de grandeur caractéristiques des paramètres physiques, il est alors possible de réécrire (30) (31) selon une formulation adimensionnée de type perturbation singulière,

$$(32) \quad \varepsilon \partial_t V_m = -\varepsilon^2 \text{div}(\tilde{G}_e \nabla \phi_e) + f(V_m)$$

$$(33) \quad \text{div}(\tilde{G} \nabla \phi_e) = -\text{div}(\tilde{G}_i \nabla V_m) ,$$

où les quantités tildées sont de l'ordre de 1 et où le petit paramètre ε est de l'ordre de 10^{-3} (voir [25]).

Si l'on fait l'hypothèse d'une *propagation stationnaire* du front de l'onde de dépolarisation, *i.e.* telle que deux parties du front d'onde n'entrent pas en collision et telle que l'onde n'est pas ré-entrante, on peut définir en chaque point $x \in H$ le temps d'activation $\Psi(x)$ par le temps que met le front d'onde à atteindre ce point,

$$\Psi(x) = t \quad \text{tel que} \quad V_m(x, t) = \frac{V_r + V_a}{2} ,$$

et le front d'onde $S(t)$ à l'instant t est donné par le lieu géométrique,

$$S(t) = \{x \in H, \Psi(x) = t\} .$$

La dynamique du front d'onde $S(t)$ est intimement liée à la dynamique des solutions de type front d'onde de l'équation bistable sur

\mathbb{R} :

$$(34) \quad u_t = u_{xx} + f(u) , \quad x, t \in \mathbb{R} .$$

Cette équation possède, à une translation en espace près, une solution de type front d'onde (voir par exemple [48]) $u(x, t) = U_0(x + c_0 t)$ dont le profil est monotone et vérifie $U_0(-\infty) = V_r$ et $U_0(+\infty) = V_a$. Si l'on impose en outre la condition sur f , $\int_{V_r}^{V_a} f(v) dv > 0$, alors $c_0 > 0$ et U_0 se comporte comme une bascule de V_r vers V_a . On détermine uniquement le profil U_0 avec la condition de normalisation $U_0(0) = (V_r + V_a)/2$. Dans le cas où f est exactement du type cubique (29), c_0 et U_0 sont entièrement déterminés (voir par exemple [88, 120]) :

$$c_0 = \sqrt{\frac{\Lambda}{2}} (V_r - 2V_s + V_a) , \quad U_0(\eta) = \frac{V_r + V_a \exp\left(\frac{V_a - V_r}{\sqrt{2\Lambda}} \eta\right)}{1 + \exp\left(\frac{V_a - V_r}{\sqrt{2\Lambda}} \eta\right)}$$

Colli-Franzone *et al.* ont montré dans [23, 25] que l'on peut déterminer un repère mobile ξ, τ ,

$$(35) \quad \xi = x , \quad \tau = \varepsilon^{-1} (t - \Psi(x)) J(x, \nabla \Psi(x)) ,$$

tel que l'on ait au point x , au premier ordre en ε .

$$(36) \quad V_m(x, t) = U_0(\tau) ,$$

La fonction $J > 0$, *a priori* inconnue, et dépendant à la fois du point x et de la façon dont le front d'onde atteint ce point, est alors déterminée par une analyse de perturbation singulière, c'est à dire en identifiant les termes de même ordre en ε dans (32) (33) après avoir effectué le changement de variable $(x, t) \mapsto (\xi, \tau)$.

Ce procédé permet de déterminer l'équation satisfaite par le temps d'activation $\Psi(x)$ à l'ordre 0 et à l'ordre 1 en ε (voir [23]). Relativement à l'équation initiale, l'équation eikonale à l'ordre 0 en ε est donnée par :

$$(37) \quad C_1 (\nabla \Psi \cdot q(\nabla \Psi))^{1/2} = 1 ,$$

et à l'ordre 1 en ε par :

$$(38) \quad -C_2 \operatorname{div} (q(\nabla \Psi)) + C_1 (\nabla \Psi \cdot q(\nabla \Psi))^{1/2} = 1 ,$$

où les constantes C_1 et C_2 sont définies par,

$$C_1 = \frac{c_0}{C_m} \sqrt{\frac{gNa}{A_m}} , \quad C_2 = \frac{1}{A_m C_m} ,$$

et où la fonction vectorielle q est définie pour $\xi \in \mathbb{R}^3$ par :

$$(39) \quad q(\xi) = (\beta_i^2(\xi) G_e + \beta_e^2(\xi) G_i) \xi$$

$$(40) \quad \beta_{i,e}(\xi) = \frac{\xi^T G_{i,e} \xi}{\xi^T G \xi} .$$

Ces équations sont complétées par une condition initiale, c'est à dire la donnée d'une partie du coeur H_0 excitée à l'instant $t=0$,

$$\Psi(x) = 0, \quad x \in H_0 .$$

et d'une condition limite sur le bord ∂H du coeur.

REMARQUE 2.1 (Conditions limites pour le modèle eikonal). *La condition limite à considérer sur le bord du coeur pour compléter le modèle eikonal n'est pas évidente.*

Colli-Franzone et al. ont proposés dans [25] la condition

$$G_i \nabla \Psi \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial H ,$$

où $\mathbf{n}_{\partial H}$ désigne la normale unitaire sortante sur le bord de ∂H .

Il est à préciser que cette condition limite n'est pas déduite des conditions limites physiologiques (13) (15) au bord du coeur discutées en section 2.3.

Elles sont issues des conditions limites (51) (53) discutées plus loin en 3.2. Ces dernières conditions limites ont une pertinence physiologique discutable mais sont mathématiquement plus pratiques. A notre connaissance il n'existe pas de formulations des conditions limites du modèle eikonal associées aux conditions limites physiologiques (13) (15).

2.2. Oblique dipôle layer. Le potentiel de surface est principalement affecté par les variations rapides du potentiel transmembranaire dans le coeur, c'est à dire par le passage de l'onde de dépolarisation. Le modèle eikonal permet justement le calcul de ces variations rapides et suggère avec (35) (36) l'approximation

$$V_m(x, t) = U_0 (\varepsilon^{-1} (t - \Psi(x)) J(x, \nabla \Psi(x))) .$$

Lorsqu' $\varepsilon \mapsto 0$, on peut approcher V_m par un saut de potentiel d'amplitude $V_a - V_r$ sur le front d'onde :

$$V_m(x, t) = V_r + (V_a - V_r) \mathcal{H}(t - \Psi(x)) ,$$

où \mathcal{H} désigne la fonction de Heaviside.

Le potentiel extra-cellulaire ϕ_e est alors avec (31) solution au sens des distributions de :

$$(41) \quad \operatorname{div}(G \nabla \phi_e) = -(V_a - V_r) \operatorname{div}(G_i \nabla \mathcal{H}(t - \Psi(x))) .$$

Supposant que le front d'onde $S(t)$ soit une surface régulière et orientable il est établi dans [23] par perturbation singulière qu'à l'ordre 0 en ε que ϕ_e est solution de

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(G \nabla \phi_e) &= 0 \quad \text{sur} \quad H - S(t) \\ \{\phi_e\}_{S(t)} &= (V_a - V_r) \beta_i(\mathbf{n}) \quad , \quad \{G \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}\}_{S(t)} = \operatorname{div}_{|S(t)}(q(\mathbf{n})) \quad , \end{aligned}$$

où \mathbf{n} est le vecteur unitaire normal à $S(t)$ et pointant vers la région au repos, où q, β_i sont donnés en (39) (42) et où $\{f\}_{S(t)}$ désigne le saut

de la fonction f à travers le front d'onde $S(t)$ entre la région au repos et la région excitée.

Ces équations permettent de formuler une représentation macroscopique du potentiel ϕ_e à partir des sources de courant sur le front d'onde seul.

Dans le cas le plus simple où le coeur est supposé contenir tout l'espace, $H = \mathbb{R}^3$, ϕ_e est donné (voir [25]) par la représentation intégrale faisant intervenir la solution fondamentale s sur \mathbb{R}^{\neq} associée à l'opérateur $\text{div}G\nabla$,

$$(42) \quad \phi_e(x, t) = (V_r - V_a)(U_n(x, t) + U_a(x, t))$$

$$(43) \quad U_n(x, t) = \int_{S(t)} m_n(\xi) \frac{G\mathbf{n}}{\|G\mathbf{n}\|}(\xi) \cdot \nabla_\xi s(x, \xi) d\xi$$

$$(44) \quad U_a(x, t) = \int_{S(t)} m_a(\xi) \mathbf{a}(\xi) \cdot \nabla_\xi s(x, \xi) d\xi .$$

Cette représentation permet de d'interpréter ϕ_e comme généré par la superposition de deux couches de dipôles spatialement distribués sur le front d'onde $S(t)$:

- une couche de dipôle *conormale*, $U_n(x, t)$ est le champ de potentiel induit par une couche de dipôles sur $S(t)$ dirigés selon la conormale au front d'onde $G\mathbf{n}$ et d'intensité de moment dipolaire surfacique m_n ,
- une couche de dipôle *axiale*, $U_a(x, t)$ est le champ de potentiel induit par une couche de dipôles sur $S(t)$ dirigés selon $\mathbf{a}(\xi)$ – la direction de la fibre musculaire en ξ – et d'intensité de moment dipolaire surfacique m_a .

Les intensités de moment dipolaire m_n , m_a sont reliées aux conductivités longitudinale et transverse dans les milieux intra et extra-cellulaires.

REMARQUE 2.2. *Dans le cas où le coeur est considéré comme une sous partie du thorax, des représentations intégrales exprimant le potentiel de surface sont données dans [25, 23, 32].*

Ces représentations sont fondées sur des relations de couplage entre le coeur et le thorax (conditions (51) (53) discutées en section 3.2) mathématiquement plus faciles à manipuler que les relations d'interface coeur/thorax adoptées dans le cadre de cette these discutées en section 3.1. A notre connaissance il n'existe pas de telles représentations intégrales pour le potentiel extra-cardiaque pour les relations d'interface (13) (15) en 3.1.

3. Modèles couplés coeur/thorax pour le potentiel extra-cardiaque

Les modèles dipolaires en général ont l'avantage de donner un outil simple de compréhension phénoménologique de l'ECG. Le modèle *d'oblique dipol layer* marque une étape dans ce cadre en fournissant une représentation

des sources de courants cardiaques simple (superposition de deux couches de dipôles) tout en reposant sur une modélisation élaborée de l'activité électrique cardiaque (le modèle bidomaine) prenant en compte les effets de l'anisotropie.

Ce modèle présente de plus des avantages certains en termes calculatoires. Le modèle eikonal ne demande que la résolution d'une équation en espace alors que le modèle bidomaine complet nécessite une résolution en temps et on fait ainsi l'économie d'une variable avec le modèle eikonal. En outre la raideur du front de l'onde de dépolarisation exige l'utilisation de maillages fins pour le modèle bidomaine, ce n'est pas nécessaire pour le modèle eikonal.

D'autre part, le potentiel ϕ_e étant explicitement donné par une représentation intégrale, on ne le calcule qu'en un nombre souhaité de points sans avoir à reconstituer complètement le champ de potentiel.

Ce modèle présente cependant des limitations importantes. D'une part comme il ne prend en compte que l'onde de dépolarisation il ne permet pas de calculer l'onde T (voir figure 2) associée à la repolarisation ventriculaire.

D'autre part le modèle eikonal n'a pas de justifications théoriques dans le cas où l'onde de dépolarisation n'a pas une structure géométrique simple, quoique des simulations numériques ont montré l'applicabilité en pratique de ce modèle à des cas complexes (fronts d'onde de dépolarisation multiples par exemple). Plus généralement il ne permet pas de traiter le cas d'ondes ré-entrantes, ondes spirales notamment, qui sont supposées être à l'origine de pathologies graves du rythme cardiaque telles que la tachycardie et la fibrillation.

Enfin (voir les remarques 2.1 et 2.2) ni le modèle eikonal ni le modèle d'oblique dipol layer ne couplent l'activité électrique du coeur à celle du thorax par les relations de couplage physiologiques (13) (15).

Une seconde approche (plus coûteuse) pour prendre en compte à la fois de la totalité du potentiel d'action (dépolarisation et repolarisation) et de phénomènes de propagation plus complexes (ondes ré-entrantes), ainsi que de leur influence sur le potentiel de surface, consiste à résoudre entièrement le modèle bidomaine (16) (21) en considérant le coeur comme isolé, afin d'en déduire une carte du potentiel extra-cellulaire ϕ_e sur l'épicarde. On peut alors calculer le potentiel de surface soit en réinterprétant la carte de ϕ_e sur l'épicarde en terme de source de courants dipolaires et en calculant le potentiel extra-cardiaque induit par ces dipôles [55, 66], soit en modélisant le thorax comme un conducteur passif et en calculant le potentiel thoracique ϕ_T induit par la condition limite au bord du coeur $\phi_T = \phi_e$.

Le problème avec cette approche est qu'en fin de calcul on ne récupère pas la continuité du flux de courant à travers la surface du coeur. Plus généralement le problème posé est celui de l'influence du

thorax sur l'activité électrique cardiaque, influence qui est négligée dans les précédents modèles évoqués ici.

Cette influence du thorax sur l'activité électrique du coeur a été mise en évidence expérimentalement. MacLeod *et al.* [85] ont enregistré l'activité électrique sur l'épicaarde d'un coeur de chien sous perfusion placé dans un récipient de la forme d'un torse humain et rempli d'un électrolyte. En faisant varier la conductivité de cet électrolyte selon un facteur 2 ils ont constaté une différence de l'amplitude du potentiel épicaardique de l'ordre de 50%. Introduisant des ballons remplis d'air, modélisant une paire de poumons, dans le récipient ils constatèrent de nouveau une variation de l'amplitude du potentiel épicaardique de l'ordre de 10 à 20 %. D'autres expériences [53, 2] présentent des observations similaires ainsi que les simulations numériques de Lines *et al.* [77, 78].

3.1. Modèle de thorax, relations de couplage. Pour prendre en considération l'influence réciproque du thorax sur le coeur on couple le modèle bidomaine (16) (21) avec un modèle du comportement électrique du thorax.

Le thorax est assimilé à un conducteur passif de conductivité variable (selon les organes qui le composent) et potentiellement anisotrope. On introduit le tenseur de conductivité thoracique G_T . On suppose que ce conducteur est à l'état quasistatique de sorte que le courant volumique \mathbf{J}_T dans le thorax est relié au potentiel thoracique ϕ_T par la loi d'Ohm,

$$\mathbf{J}_T = -G_T \nabla \phi_T .$$

Ce courant étant de divergence nulle (exprimant une non création de charge), ϕ_T est simplement donné par l'équation de Laplace dans le domaine T occupé par le thorax,

$$(45) \quad \operatorname{div} (G_T \nabla \phi_T) = 0 \quad \text{dans } T ,$$

complété par une condition de flux nul sur le bord extérieur du thorax $\partial\Omega = \partial T - \partial H$:

$$(46) \quad G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega ,$$

(où $\mathbf{n}_{\partial H}$ désigne la normale unitaire sortante sur ∂H) et par des relations de couplage avec le potentiel extra-cellulaire dans le coeur discutées en 2.3,

$$(47) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur } \partial H$$

$$(48) \quad G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} \quad \text{sur } \partial H ,$$

exprimant le fait que l'interaction entre le coeur et le thorax se fait par le milieu extra-cellulaire uniquement.

Le modèle bidomaine complet coeur+thorax peut être décomposé en deux sous problèmes.

On a d'abord l'équation (16) d'évolution sur V_m ,

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = -\operatorname{div} (G_e \nabla \phi_e) ,$$

dont la résolution nécessite à chaque instant la résolution d'un problème en espace que l'on appellera *problème bidomaine en espace*.

Le problème bidomaine en espace consiste, V_m étant une donnée fixée, en la détermination des potentiels ϕ_e et ϕ_T vérifiant dans H et T les équations elliptiques

$$(49) \quad \operatorname{div} ((G_i + G_e) \nabla \phi_e) = -\operatorname{div} (G_i \nabla V_m)$$

$$(50) \quad \operatorname{div} (G_T \nabla \phi_T) = 0 ,$$

avec les relations de couplage (47) (48) sur ∂H et la condition limite (46) sur $\partial T - \partial H$ et tel que ϕ_e vérifie en outre la condition limite (20) sur ∂H

$$G_i \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = -G_i \nabla V_m \cdot \mathbf{n}_{\partial H} ,$$

dont on rappelle qu'elle exprime le fait qu'aucun courant ne sort du milieu intra-cellulaire vers le thorax (voir section 2.3).

3.2. Autres relations de couplage coeur/thorax. Une des difficultés pour la résolution du problème bidomaine en espace tient au fait que la relation de couplage (48) n'est pas compatible avec l'équation (49) (dans le sens où elle n'implique pas l'annulation des termes de bord sur ∂H dans une formulation variationnelle de (49) (50)).

Une autre classe de relations de couplage est utilisée dans la littérature [25, 54, 76, 78] pour assurer le couplage coeur/thorax :

$$(51) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur } \partial H$$

$$(52) \quad (G_i \nabla \phi_i + G_e \nabla \phi_e) \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H}$$

$$(53) \quad G_i \nabla V_m \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = 0$$

Il est facile de voir qu'avec ces relations de couplage et la condition limite (46) le problème bidomaine en espace possède une formulation variationnelle simple sur le domaine $\Omega = H \cup \partial H \cup T$

$$\forall \Psi \in H^1(\Omega) : \int_{\Omega} \nabla \Psi \cdot \tilde{G} \nabla \Phi \, dx = - \int_H \nabla \Psi \cdot G_i \nabla V_m \, dx$$

où Φ est l'inconnue dont les restrictions à H et T sont ϕ_e et ϕ_T respectivement et où \tilde{G} est le tenseur, discontinu sur ∂H , dont les restrictions à H et T sont $G_i + G_e$ et G_T respectivement.

Ce problème a une solution faible dans $H^1(\Omega)$ à une constante additive près.

La relation (52) peut s'interpréter en terme de continuité de flux de courant à travers ∂H . Si \mathbf{J}_i , \mathbf{J}_e , \mathbf{J}_T désignent les courants volumiques intra-cellulaire, extra-cellulaire et thoracique respectivement (à l'échelle macroscopique) alors (52) se réécrit,

$$(\mathbf{J}_i + \mathbf{J}_e) \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = \mathbf{J}_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H} ,$$

et correspond à une conservation du courant sur l'interface coeur/thorax.

La justification physiologique de la relation de couplage (53) n'est par contre pas évidente.

Dans la suite on adoptera les relations de couplages (18) (20) qui nous paraissent physiologiquement plus justifiées que les relations (51) (53).

Deuxième partie

**Analyse et simulation numérique
du modèle monodomaine pour le
coeur isolé par des schémas
volumes finis classiques sur des
maillages admissibles**

Introduction à la partie II

Cette partie traite de l'approximation d'une version simplifiée du modèle bidomaine : le modèle monodomaine introduit en 2.5. On rappelle que la dérivation de ce modèle repose sur l'hypothèse – non vérifiée expérimentalement – d'un même rapport d'anisotropie entre les milieux intra et extra-cellulaires.

Le modèle monodomaine s'énonce comme une équation de réaction diffusion sur le potentiel transmembranaire u couplée avec un système d'EDO :

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{\partial u}{\partial t} &= \varepsilon^2 \operatorname{div}(\sigma \nabla u) + f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} &= g(u, v) .\end{aligned}$$

Quoique ce modèle soit très simplifié, il conserve une difficulté majeure pour le traitement numérique du modèle général bidomaine : la coexistence d'une dynamique lente et d'une dynamique rapide. Ces deux dynamiques sont exprimées par le paramètre $\varepsilon \ll 1$.

Ce petit paramètre fait de u une variable rapide par rapport à v subissant de brusques changements en temps et en espace : u a un comportement de type front d'onde. Au niveau des approximations numériques, la raideur de ce front d'onde est génératrice d'instabilités numériques.

Afin de contrôler ces instabilités on utilise une discrétisation du modèle monodomaine par des schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles. On notera en abrégé schémas *CFV* (Classical Finite Volumes) pour désigner les schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles.

Ce type de schémas est très utilisé dans des contextes variés, on renvoie à [43] pour une revue. Les propriétés mathématiques des schémas CFV (stabilité, convergence, estimations d'erreur) ont également été largement étudiées. Des résultats très généraux de convergence pour des équations du type convection-diffusion sont établies dans [59, 87, 50] pour des termes de diffusion isotropes ; ces résultats ont été testés numériquement sur des maillages triangulaires en dimension 2 dans [61]. Des résultats similaires ont également été démontrés pour des équations paraboliques dont le terme de diffusion est non linéaire, dégénéré et isotrope dans [46].

Dans [60], Herbin propose une extension de la définition des maillages

admissibles permettant de discrétiser par des schémas CFV des termes de diffusion anisotropes, la convergence de ces schémas pour une équation parabolique linéaire y est également démontrée. Ces schémas sont ici appliqués pour la résolution du modèle monodomaine, *i.e.* pour des systèmes d'équations paraboliques de réaction-diffusion.

Les schémas CFV sont introduits au chapitre 5. Ce chapitre est tiré d'un article,

Stability and convergence of a finite volumes method
for two systems of reaction-diffusion equations in
electro-cardiology,

accepté pour publication dans : “Non Linear Analysis : real World Application”.

L'idée sous-jacente à cet article est d'adapter une propriété de stabilité des solutions du problème continu au solutions discrètes. Cette propriété est celle des *rectangles invariants*. Pour des termes de réaction et pour des conditions limites “convenables”, les solutions du problème continu restent piégées dans des rectangles invariants. La technique des rectangles invariants permet de déterminer des bornes L^∞ *a priori* sur les solutions du problème continu.

Ce comportement des solutions du modèle monodomaine est dû à une simple propriété de monotonie de l'opérateur $\text{div}(\sigma \nabla \cdot)$. Cette propriété de monotonie est conservée par l'opérateur $\text{div}(\sigma \nabla \cdot)$ discrétisé par un schéma volumes finis admissible. La stabilité des schémas semi discrétisés en espace est établie par cette technique et des conditions de stabilité pour des schémas discrétisés en temps Euler explicite ou Euler semi implicite sont dérivées. Cette propriété de stabilité est également suffisante pour assurer la convergence des schémas (théorème 5.1).

Une section supplémentaire a été ajoutée à cet article qui traite de la stabilité des “gradients” des solutions discrètes.

Le chapitre 6 est consacré à la mise en oeuvre de ces schémas numériques en dimensions 1, 2 et 3. On s'attache notamment dans ce chapitre à la restitution par les solutions numériques de comportements physiologiques attendus : propagation d'onde type “traveling wave” en dimension 1, d'ondes circulaires ou d'ondes spirales en dimension 2. Un essai qualitatif de la propagation du potentiel d'action cardiaque sur un maillage du coeur complet issu de mesures médicales (IRM) est également présenté.

Le chapitre 7 présente une étude théorique de propriétés élémentaires des solutions du modèle monodomaine utilisée lors de leur approximation numérique au chapitre 5 : existence, unicité et régularité. Pour cette étude on se place dans le cadre plus large des équations semi linéaires dont fait partie le modèle monodomaine.

CHAPITRE 5

Analyse de la stabilité et de la convergence de schémas volumes finis classiques pour le modèle monodomaine

Stability and Convergence of a Finite Volume Method for Two Systems of Reaction-Diffusion Equations in Electro-Cardiology¹

Yves Coudière², Charles Pierre

Abstract. The monodomain equations model the propagation of the action potential in the human heart : a very sharp pulse propagating at a high speed, which computation require fine unstructured 3D meshes. It is a non linear parabolic PDE of reaction diffusion type, coupled to one or several ODE, with multiple time-scales.

Numerical difficulties, such as unstructured meshes and stability are addressed here through the use of a finite volumes method. Stability conditions are given for two time-stepping methods, and two example sets of ODEs, convergence is proved and error estimates are computed.

1. Introduction

Computer models of the electrical activity in the myocardium are increasingly popular : the heart's activity generates an electromagnetic field in the torso, and produces a surface potential map which measure is the well-known electrocardiogram (ECG). It gives a non-invasive representation of the cardiac electrical function.

This paper focuses on the study of a 3D finite volumes numerical method used to compute the electrical activity of the myocardium on unstructured meshes, and specifically gives conditions on the time-step to ensure a L^∞ stability property, for an explicit and a semi-implicit time-stepping method. Consequently, convergence results are proved.

The electrical activity on the torso was first demonstrated to be directly connected to the heart beat more than 100 years ago [115]. It was first suggested to be well represented by a dipole. Afterward, more complex models based on dipole representation have also been used among which the famous oblique dipole layer [27]. This is the top-down approach, providing heuristic models.

1. Accepted for publication in Non Linear Analysis : real World Application

2. Laboratoire de Mathématiques Jean Leray, université de Nantes, CNRS - UMR 6629, France.

Conversely, in the 50's Hodgkin and Huxley [65] explained how the electrical activity of some nerve cells can be modeled from a microscopic description of ionic currents through the membrane. Due to the sophistication of experimental techniques, there are currently many such models, see [70] for reviews.

Recent studies in electrocardiology assume the anisotropic cardiac tissue to be represented at a macroscopic level by the so-called “bidomain” model, despite the discrete structure of the tissue. We refer to [30] for a mathematical derivation of the bidomain equations, and to [57, 70] for reviews on the bidomain equations. A simpler version called the “monodomain” model is obtained, assuming an additional condition on the anisotropy of the tissue. Although the “bidomain” one is far more complex, both models are reaction-diffusion systems [110, 10] of the general form

$$(54) \quad \partial_t w = Aw + F(w),$$

where $Aw = \nabla \cdot (\sigma(x)\nabla w)$ and $\sigma(x)$ is a positive definite symmetric matrix. Only the monodomain model is addressed here.

Any microscopic description of the cell membrane can be inserted into the monodomain equations, providing a large variety of macroscopic models, ranging from 2 to about 100 equations. Although the approach would be the same for complex ones, this paper only treats the case of two simplified 2 variables models, namely the well-known FitzHugh-Nagumo one [49] and the one from Aliev-Panfilov [96]. The latter is very well suited to the myocardial cell, and often used in practical computer models [90, 106, 107].

Computer models of the heart based on these equations (mono or bidomain, 2 or more ionic currents) currently are very popular in numerical electrophysiology. Because there may be many different time scales in the reaction terms, the solutions exhibit sharp propagating wave-fronts. For this reasons, only the recent improvement of computing capabilities allow 3D computations to be achieved. Moreover, until very recently, they were restricted to differences methods on structured grids and simple geometries [90, 98, 77]. A few researchers recently started to study computations on 3D unstructured meshes, coupled to an explicit, semi-implicit or fully-implicit time-stepping method [78, 8]. The analysis of a Galerkin semidiscrete space approximation was conducted by S. Sanfelici [104]. To our knowledge, there has been no attempt at studying the effects of the time-stepping method on the stability of the approximation. As a matter of fact the problem of stability in time of fully discretized approximations is as difficult as the problem for global stability for the continuous solution of reaction-diffusion systems.

The main issue of this paper is to study the theoretical stability criterion for the explicit and semi-implicit Euler methods ; and to derive error estimates for the approximate solutions.

Our idea is based on the proof of existence of global solutions to reaction-diffusion systems as presented in [110] : solutions for $t \in [0, T)$ extend to any $t > 0$ due to the existence of strictly contracting regions Σ for the flow $F(w)$. It is known [110] that such regions are invariant sets for regular enough solutions of the system (54). Here, we prove in theorems 4.1, 4.2 and 4.3 that under suitable assumptions on the time-step, the regions Σ are still invariants sets for the discrete solution, proving as a consequence L^∞ bounds on the discrete solution. The convergence is proved and error estimates established in theorem 5.1.

Among the numerical methods suited to 3D computations on unstructured meshes, we choose a finite volumes method introduced and analyzed in [43], well suited to general unstructured meshes and especially to mesh refinement, needed here to capture sharp wave-fronts. Moreover, it provides a sort of maximum principle, that may not be achieved for most finite element formulations but is the key ingredient of our proof.

The next section details the mathematical model, and recall some needed results of existence and stability for solutions for reaction-diffusion systems, essentially based on [110, 10, 58]. Section 3 briefly explains the finite volumes technique for space discretization, and section 4 and 5 respectively concerns the stability and convergence results and proofs.

2. The System of Partial Differential Equations

2.1. The Macroscopic Monodomain Model

in Electro-Cardiology. At a microscopic scale, the surface membrane of the myocardial cells delimits an intra and an extra-cellular medium, both containing ionic species. The model accounts for the dynamics of the trans-membrane ionic currents I_{ion} and difference of potential u , per surface unit. The membrane is considered to have a capacitive behaviour, so that the total current through the membrane is

$$(55) \quad C \frac{du}{dt} + I_{ion} = I,$$

where C is the capacitance per surface unit of the membrane. Furthermore, the cells are self-organized into myofibers in order to form the complete myocardium.

At a macroscopic scale, due to a homogenization process [30], the trans-membrane potential u is defined on the whole heart Ω considered as the super-imposition of the intra and extra-cellular medium. From the microstructure of the muscle fibers is derived at each point $x \in \Omega$ the positive definite tensor of conductivity $\sigma(x) = \text{diag}(c_l, c_t, c_t)$ in the

local orthonormal basis (l, n_1, n_2) , where l is a unit vector tangent to the fiber at x . With the conductivity, the volumetric current can be expressed in terms of u , and equation (55) becomes

$$(56) \quad \rho C \frac{du}{dt} + \rho I_{ion} = \nabla \cdot (\sigma \nabla u),$$

where $\rho \gg 1$ is the ratio of membrane surface per unit of volume.

The fibers are tangent to the boundary $\partial\Omega$ of the heart. As a result the normal direction to the boundary at point $x \in \partial\Omega$ is an eigen-direction for $\sigma(x)$ and the conductivity tensor satisfies the following boundary condition :

$$(57) \quad \forall x \in \partial\Omega, \quad \sigma(x) \cdot \mathbf{n}(x) = \lambda(x) \mathbf{n}(x) \quad (\lambda(x) > 0),$$

where \mathbf{n} is the unit outward vector field on $\partial\Omega$.

First modeled by Hodgkin and Huxley in [65], the ionic current I_{ion} decomposes into the contribution of several ionic channels X_i :

$$(58) \quad I_{ion} = I_{X_1} + I_{X_2} + \dots + I_{X_p}.$$

The states of the channels (open-closed) are described by gating variables $v = (v_1, \dots, v_p)$ which are controlled by ODEs,

$$(59) \quad \frac{dv_i}{dt} = \varepsilon g_i(u, v_i),$$

where the parameter $\varepsilon \ll 1$ means that the recovery variables have slow dynamics compared to the potential u . The ionic current through the channel X_i depends on u and v ,

$$(60) \quad I_{X_i} = -f_i(u, v).$$

Based on the original version, many such models have been constructed [6] according to moreless complex experimental studies of the cells membrane. Simplified versions of these models have been proposed, the simplest of which is the well known FitzHugh - Nagumo one [49, 89]. It writes

$$(61) \quad I_{ion} = -f(u, v) \equiv u(u-1)(u-a) + v, \quad g(u, v) = ku - v,$$

where $0 < a < 1$ and $k > 0$ are given parameters. It will be referred to as the *FHN model*. For, it is adapted from the original model of Hodgkin-Huxley [65], it suits the behaviour of a nerve axon. For the myocardial cells, a simplified model was proposed by Aliev and Panfilov [96] and has been widely used in 3D simulations of the human ventricles [90, 106]. It writes

$$(62) \quad I_{ion} = -f(u, v) \equiv ku(u-1)(u-a) + uv, \quad g(u, v) = ku(1+a-u) - v,$$

where $k > 0$ and $0 < a < 1$ are still given parameters. It will be referred to as the *AP model*.

For sake of simplicity, only the case of the *AP* and *FHN* models are addressed, although the extension of our results to more complex ones shall be straightforward.

Equations (56), (58), (59), (60) rewrites in a dimensionless framework and for one gating variable v ,

$$(63) \quad \varepsilon u_t = \varepsilon^2 \nabla \cdot (\sigma \nabla u) + f(u, v)$$

$$(64) \quad v_t = g(u, v),$$

where the functions $f, g : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$ are given by (61) for the *FHN* model and by (62) for the *AP* model.

The potential u shall satisfy a Neumann boundary condition :

$$(65) \quad \forall x \in \partial\Omega, \quad \sigma(x) \nabla u \cdot \mathbf{n}(x) = 0,$$

meaning that no current flows out of the heart. No additional boundary condition is needed concerning v , since it is ruled point wise by an ODE. Of course, an initial data is provided :

$$(66) \quad \forall x \in \Omega, \quad u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x).$$

2.2. Existence, Uniqueness and Regularity of Solutions.

General results for the Cauchy problem (63)-(66) are recalled here. Such systems of PDE have been widely studied [58, 110, 10]. Only basic non-exhaustive and non-optimal results are recalled, that occur under reasonable assumptions expected from the physiological data. Furthermore, a framework for the proof of existence of solutions for all $t > 0$ is drawn, that the numerical analysis will follow.

THEOREM 2.1 (Local Existence and Uniqueness). *The equations (63)-(66) are considered on a domain $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2, 3$) with a C^2 regular boundary $\partial\Omega$. The conductivity tensor σ is assumed C^1 regular on $\overline{\Omega}$ and is uniformly elliptic on Ω :*

$$\exists \alpha > 0, \quad \forall x \in \overline{\Omega}, \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^d, \quad \xi^T \sigma(x) \xi \geq \alpha \xi^T \xi.$$

The function f and g are assumed locally Lipschitz.

If the initial data satisfy $u_0 \in H^2(\Omega)$, u_0 verifying the boundary condition (65); and $v_0 \in L^\infty(\Omega)$, then the system (63)-(66) has a unique solution $w(x, t) = (u(x, t), v(x, t))$ on $\Omega \times [0, T)$ for some $T > 0$, in the following (weak) sense :

- *the mapping $t \mapsto w(t) \in L^2(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ is continuous on $[0, T)$ with $w(0) = (u_0, v_0)$,*
- *the mapping $t \mapsto w(t) \in L^2(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ is Frechet differentiable on $(0, T)$ with derivative $t \mapsto dw/dt(t) \in L^2(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$,*
- *for $t \in (0, T)$, we have $u(\cdot, t) \in H^2(\Omega)$, $f(w(\cdot, t)) \in L^2(\Omega)$ and $g(w(\cdot, t)) \in L^\infty(\Omega)$,*
- *for $t \in (0, T)$, equations (63), (64) and (65) respectively hold in $L^2(\Omega)$, $L^\infty(\Omega)$ and $L^2(\partial\Omega)$.*

- Moreover with the regularity assumed on the initial data, the mapping $t \mapsto w(t) \in L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ is continuous on $[0, T)$.

At last, note that $T = +\infty$ if the reaction terms f, g are globally Lipschitz on \mathbb{R}^2 .

LEMMA 2.1 (Regularity). *With the additional assumptions,*

- the derivatives of σ are ν -Hölder continuous on Ω , for some $\nu > 0$ (ie $\sigma \in C^{1+\nu}(\Omega)$),
- the reaction terms f and g are C^2 regular.
- the initial data is such that $v_0 \in C^\nu(\Omega)$ for some $\nu > 0$,

the solution $w(x, t)$ is continuously differentiable in the variable t on $\bar{\Omega} \times (0, T)$ and $u(\cdot, t) \in C^2(\bar{\Omega})$ for $t \in (0, T)$. So, (63)-(66) hold in a classical (strong) sense.

2.3. Stability of Solutions and Invariant Regions. The solutions of theorem 2.1 exists only for $0 < t < T$, where T depends both on the initial data and on f and g . But of course, only existence for all time $t > 0$ makes sense in the physiological phenomena. For our solution to be relevant with the physiological framework it is moreover needed to have uniform L^∞ bounds on u and v . This is the main difficulty, referred to as *stability*. It can be studied in two ways.

First, assuming a polynomial growth at infinity for f and g , Sobolev embeddings [80] are used to uniformly bound u and v in Sobolev spaces and then find solutions for all time $t \geq 0$, see [58, 112]. Such techniques can be applied to solutions with weaker regularity as in lemma 2.1. However L^∞ bounds usually are unreachable although physiologically relevant.

The second way to study the stability is to construct *invariant regions* as developed in [110, 10]. An *invariant region* for the Cauchy problem (63)-(66) is a closed subset $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ such that a solution of (63)-(66) having its initial data inside Σ 's interior remains inside Σ . Such a solution is uniformly bounded in L^∞ and moreover, since the restriction of f and g to Σ are Lipschitz continuous, it has an infinite lifetime $T = +\infty$.

The second method is detailed here because it provides uniform L^∞ bounds and is really perfectly suited to the numerical analysis below. It requires

- a good behaviour of the non-linear terms f and g , so that invariant sets exist, see figure 1,
- a strong maximum principle for the operator $u \mapsto \nabla \cdot (\sigma \nabla u)$,
- regular solutions in order to apply the maximum principle.

Invariant regions for (63)-(66) are built by considering invariant regions of \mathbb{R}^2 for the reactive flow $(u, v) \in \mathbb{R}^2 \mapsto (f(u, v), g(u, v)) \in \mathbb{R}^2$. For the heat equation $\partial_t u = \nabla(\sigma \nabla u)$, intervals $[u_-, u_+]$ are invariant regions. As a consequence, invariant sets Σ are searched in the following

form :

(67)

$$\Sigma = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2, u_- \leq u \leq u_+, v_- \leq v \leq v_+\} = [u_-, u_+] \times [v_-, v_+].$$

DÉFINITION 2.1 (Rectangular Invariant Set). *The rectangular subset of \mathbb{R}^2 , $\Sigma = [u_-, u_+] \times [v_-, v_+]$ is an invariant set for f and g if*

$$\forall (u, v) \in \Sigma, \quad \left\{ \begin{array}{l} u = u_-, v_- \leq v \leq v_+ \Rightarrow f(u, v) > 0, \\ u = u_+, v_- \leq v \leq v_+ \Rightarrow f(u, v) < 0, \\ v = v_-, u_- \leq u \leq u_+ \Rightarrow g(u, v) > 0, \\ v = v_+, u_- \leq u \leq u_+ \Rightarrow g(u, v) < 0. \end{array} \right.$$

For an invariant rectangular region Σ (def. 2.1) to be invariant for (63)-(66), a *strong* point wise maximum principle is needed here. Remark that a simplification occurs in the scalar case (with one equation) where a Stampacchia-troncature technique can be used (see [11]).

LEMMA 2.2 (Strong Maximum Principle). *Let Ω be an open bounded subset of \mathbb{R}^d whose boundary $\partial\Omega$ has C^2 regularity. Let $u \in C^2(\bar{\Omega})$ satisfy the boundary condition (65) for a tensor $\sigma \in C^1(\bar{\Omega})$ satisfying the boundary condition (57).*

If u has a maximum (resp. minimum) for $x \in \bar{\Omega}$ then $\nabla \cdot (\sigma \nabla u)(x) \leq 0$ (resp. $\nabla \cdot (\sigma \nabla u)(x) \geq 0$).

With lemma 2.2 invariant regions according to definition 2.1 are invariant regions for regular solutions of the PDE.

THEOREM 2.2 (Invariant set for the PDE). *Consider the system of equations (63)-(66) with the assumptions of lemma 2.1. Moreover, assume that the conductivity tensor σ verifies the boundary condition (57).*

If Σ is a rectangular invariant set for f and g , according to definition 2.1, then it is an invariant region for (63)-(65) :

$$\forall x \in \bar{\Omega}, w_0(x) \in \text{int}(\Sigma) \Rightarrow \forall t > 0, \forall x \in \bar{\Omega}, w(x, t) \in \Sigma.$$

and thus such a solution w has an infinite lifetime $T = +\infty$.

REMARK 2.1. *For $\sigma = \lambda Id$, a proof has been given by J. Smoller in [110] when assuming that the boundary values of the solution $(u, v)|_{\partial\Omega}$, which are unknown here, remains inside Σ ; and by A. Shcherbakov in [109] for a homogeneous Neumann boundary condition in the case of the FHN model (61). Lemma 2.2 and theorem 2.2 extend these results to the general case (63)-(65) for an anisotropic conductivity tensor satisfying (57).*

Examples of invariant regions for the FHN or AP models (61), (62) are displayed on figure 1. Note that these invariant regions may be built as big as wishes, so that any regular solution of (63)-(65) remains uniformly bounded for all time $t \geq 0$.

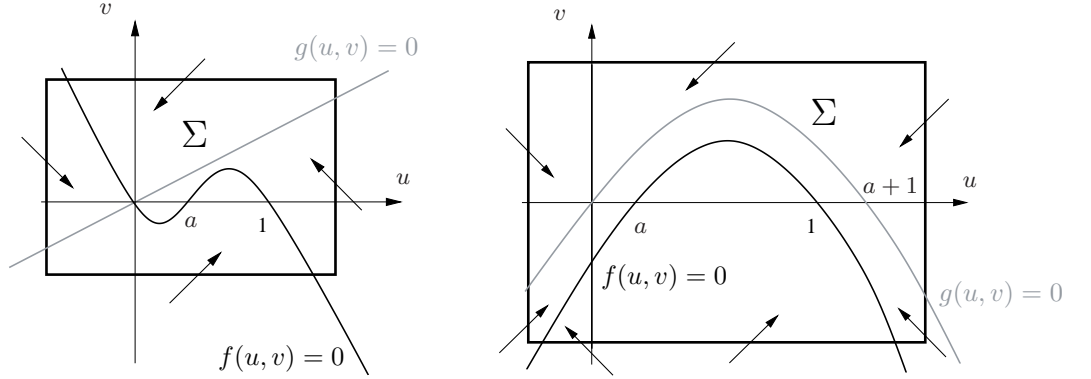


FIGURE 1. Invariant regions Σ for *FHN* (left) and *AP* (right) models

PROOF OF THE LEMMA 2.2. At an interior point $x \in \Omega$ it is obvious. Assume that u has a maximum for $x \in \partial\Omega$. With condition (57) one can construct an orthonormal basis $\mathcal{B} = (\xi_1, \dots, \xi_d)$ such that $\sigma(x) = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$ in \mathcal{B} (with $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, \dots, d$) and such that ξ_1 is normal to $\partial\Omega$ at x . Condition (65) together with (57) gives $\partial_{\xi_1} u(x) = 0$. The family (ξ_2, \dots, ξ_d) generates the tangent hypersurface of $\partial\Omega$ at point x . Since u is $C^2(\partial\Omega)$ and its restriction to $\partial\Omega$ also has a local maximum at x , we have $\partial_{\xi_i} u(x) = 0$ for $i = 2, \dots, d$. Consequently, $u \in C^2(\bar{\Omega})$ has a maximum in x implies that $\partial_{\xi_i}^2 u(x) \leq 0$ ($i = 1, \dots, d$). Now since $\sigma \in C^1(\bar{\Omega})$ one has $\nabla \cdot (\sigma \nabla u)(x) = \lambda_1 \partial_{\xi_1}^2 u(x) + \dots + \lambda_d \partial_{\xi_d}^2 u(x) \leq 0$. \square

PROOF OF THE THEOREM 2.2. With the assumptions of lemma 2.1, let $w = (u, v)$ be a solution of (63)-(65) with initial value $w(0, \cdot)$ such that $w(0, x) \in \text{int}(\Sigma)$ for all $x \in \bar{\Omega}$. We recall that u is $C^2(\bar{\Omega})$ with respect to x and that w is C^1 with respect to t on $\bar{\Omega} \times (0, T)$.

Imagine that $w(x, t)$ reaches the boundary $\partial\Sigma$ of Σ at time t_0 and that $w(x, t) \in \Sigma$ for all $t \leq t_0$. Since $w(t) : [0, T) \mapsto L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ is continuous, $t_0 > 0$. Let $x_0 \in \bar{\Omega}$ be such that $w(x_0, t_0) \in \partial\Sigma$.

We first assume that $w(x_0, t_0)$ is on the right side of $\partial\Sigma : u(x_0, t_0) = u_+$ and $v_- \leq v(x_0, t_0) \leq v_+$. On one hand, definition 2.1 implies that $f(w(x_0, t_0)) < 0$; and on the other hand $u(\cdot, t_0)$ satisfies the conditions of the lemma 2.2 and $u(x_0, t_0) = \max_{\bar{\Omega}} u(\cdot, t_0)$. As a consequence, $\nabla \cdot (\sigma \nabla u)(x_0, t_0) \leq 0$. It proves that $\partial_t u(x_0, t_0) < 0$. The function $\partial_t u$ being continuous on $\bar{\Omega} \times (0, T)$, there exists a neighbourhood U of (x_0, t_0) in $\bar{\Omega} \times (t_0, T)$ such that $\partial_t u < 0$ on U , and therefore $u(x, t) < \max_{\bar{\Omega}} u(\cdot, t_0) = u_+$ on U .

Now imagine that $w(x, t)$ is on the top side of $\Sigma : v(x_0, t_0) = v_+$ and $u_- \leq u(x_0, t_0) \leq u_+$, then since $g < 0$ on that top side, $\partial_t v(x_0, t_0) < 0$

too and so there exists a neighbourhood U of (x_0, t_0) in $\bar{\Omega} \times (t_0, T)$ such that $v(x, t) < v_+$ on U .

Altogether w cannot get out of Σ even at a corner point where the two precedent reasons both hold.

To end, w remaining uniformly bounded, the reaction terms f and g can be considered as uniformly Lipschitz continuous and with the last remark of theorem 2.1 w has an infinite lifetime $T = +\infty$. \square

3. The Finite Volumes Approximation

3.1. Meshes, Spaces and Notations. We shall approximate the solutions of system (63)-(65) with a finite volumes method according to the framework of [43], on admissible meshes adapted to the conductivity tensor σ . An admissible mesh of Ω (a bounded open subset of \mathbb{R}^d whose boundary is piecewise C^1) adapted to σ is given by :

- (1) a set \mathcal{T} of polygonal connected open subsets of Ω , called *cells* and denoted by K , such that

$$\bar{\Omega} = \cup_{K \in \mathcal{T}} \bar{K}, \quad \forall K, L \in \mathcal{T}, K \neq L \Rightarrow K \cap L = \emptyset.$$

In the following $m(K)$ will stand for the measure of a cell $K \in \mathcal{T}$. For a cell $K \in \mathcal{T}$ lying on the boundary, the edge $\bar{K} \cap \partial\Omega$ might be a C^1 curve, allowing non polygonal domains Ω . Two distinct cells K and $L \in \mathcal{T}$ are called neighbour cells if $\bar{K} \cap \bar{L}$ has a non zero $(d-1)$ -dimensional measure (*i.e.* non zero surface if $d=3$ or non zero length if $d=2$). On each cell $K \in \mathcal{T}$ a (positive definite) conductivity tensor $\sigma_K \in \mathbb{M}^{d \times d}$ is defined by

$$(68) \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \sigma_K = \frac{1}{m(K)} \int \sigma(x) dx.$$

- (2) A set \mathcal{S} of interfaces, denoted by e that are of two types :
- either there exists two neighbour cells $K, L \in \mathcal{T}$ such that $e = \bar{K} \cap \bar{L}$, e is an internal interface and we set $e = K|L$;
 - or there exists one cell $K \in \mathcal{T}$ such that $\bar{K} \cap \partial\Omega$ has a non zero $(d-1)$ -dimensional measure and such that $e = \bar{K} \cap \partial\Omega$, e is an external interface.

The set of internal interfaces is denoted by \mathcal{S}^* and the set of external interfaces by $\delta\mathcal{S}$, and so $\mathcal{S} = \mathcal{S}^* \cup \delta\mathcal{S}$. The $(d-1)$ -dimensional measure for $e \in \mathcal{S}$ is $m(e)$ and it is non zero. For $e \in \mathcal{S}$ and $K \in \mathcal{T}$ such that $e \subset \partial K$ we denote by $\mathbf{n}_{K,e}$ the unit vector normal to e and pointing outward of K .

- (3) Two sets of points $\mathcal{X} = (x_K)_{K \in \mathcal{T}}$, $\mathcal{Y} = (y_e)_{e \in \mathcal{S}}$, called cells and interfaces centers and such that $x_K \in K$, $y_e \in e$. We furthermore assume that for each cell $K \in \mathcal{T}$ and each interface

$e \in \mathcal{S}$ such that $e \subset \partial K$,

$$(69) \quad y_e - x_K \text{ is co-linear to } \sigma_K \mathbf{n}_{K,e}.$$

We denote by $d_{K,e}$ the euclidean distance $|y_e - x_K|$ and by $\lambda_{K,e}$ the (positive) proportionality coefficient between $\sigma_K \mathbf{n}_{K,e}$ and the unit vector $(y_e - x_K)/d_{K,e}$:

$$(70) \quad \sigma_K \mathbf{n}_{K,e} = \lambda_{K,e} \frac{y_e - x_K}{d_{K,e}}, \quad \text{and } \lambda_{K,e} > 0.$$

Additionally, the boundary ∂K of any cell $K \in \mathcal{T}$ can be splitted into internal and external interfaces, and we denote by $\delta K, \delta K^*$, the subsets of \mathcal{S} such that

$$\bigcup_{e \in \delta K} e = \partial K, \quad \bigcup_{e \in \delta K^*} e = \partial K \cap \Omega.$$

We also define the size of the mesh as the maximum of the cells' diameters,

$$(71) \quad \text{size}(\mathcal{T}) = \max_{K \in \mathcal{T}} \text{diam}(K).$$

As a consequence, a mesh is described by the collection $(\mathcal{T}, \mathcal{S}, \mathcal{X}, \mathcal{Y})$, but will be referred to as \mathcal{T} .

Examples of such meshes are given in [43]. In the isotropic case they are 2D meshes of triangles or 3D meshes of tetrahedra in which the centers x_K are the centers of the circumscribed circles or spheres of the cells K , and more generally Voronoï meshes.

On an admissible mesh \mathcal{T} , the finite volumes approximation for the solution of (63)-(64) is a couple of functions $w_{\mathcal{T}} = (u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}})$ piecewise constant on the cells $K \in \mathcal{T}$. As a consequence, we define

$$(72) \quad L^2(\mathcal{T}) = \left\{ u_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \chi_K, (u_K)_{K \in \mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{N_{\mathcal{T}}} \right\} \subset L^2(\Omega),$$

where $N_{\mathcal{T}}$ is the cardinal of \mathcal{T} , and $\chi_K(x) = 1$ for x in K and 0 elsewhere. The space $L^2(\mathcal{T})$ is naturally handled with the inner product induced by $L^2(\Omega)$ and the associated norm :

$$(73) \quad (u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}})_{L^2} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K v_K m(K), \quad \|u_{\mathcal{T}}\|_{L^2}^2 = \sum_{K \in \mathcal{T}} |u_K|^2 m(K).$$

This euclidean structure is extended to $L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$. For $w = (u, v)$ and $\hat{w} = (\hat{u}, \hat{v})$ we have

$$(74) \quad (w, \hat{w})_{L^2} = (u, \hat{u})_{L^2} + (v, \hat{v})_{L^2}, \quad \|w\|_{L^2}^2 = \|u\|_{L^2}^2 + \|v\|_{L^2}^2.$$

3.2. Space Discretization. In order to construct the finite volumes approximation of system (63)-(64), the balance equation is written on any cell K :

$$(75) \quad \varepsilon \frac{d}{dt} \int_K u dx = \varepsilon^2 \int_{\partial K} \sigma \nabla u \cdot \mathbf{n}_K ds + \int_K f(u, v) dx,$$

$$(76) \quad \frac{d}{dt} \int_K v dx = \int_K g(u, v) dx.$$

Suppose that each value u_K, v_K of the discrete solution approximates the mean value on K of the exact solution (u, v) , then the discrete solution shall satisfy the following semi-discrete equation :

$$(77) \quad \varepsilon \frac{du_K}{dt}(t) = \frac{\varepsilon^2}{\mathfrak{m}(K)} \sum_{e \in \delta K} \phi_{K,e}(u_{\mathcal{T}}) \mathfrak{m}(e) + f_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}),$$

$$(78) \quad \frac{dv_K}{dt}(t) = g_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}).$$

The terms $f_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}})$ and $g_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}})$ shall approximate $\frac{1}{\mathfrak{m}(K)} \int_K f(u, v) dx$ and

$\frac{1}{\mathfrak{m}(K)} \int_K g(u, v) dx$ and are taken as follows :

$$(79) \quad f_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}) = f(u_K, v_K), \quad g_K(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}) = g(u_K, v_K).$$

The term $\phi_{K,e}(u_{\mathcal{T}})$ approximates the mean flux along $e \in \mathcal{S}$ outward of K , specifically $\frac{1}{\mathfrak{m}(e)} \int_e (\sigma \nabla u) \cdot \mathbf{n}_K ds$. On the external interfaces the boundary condition (65) on u is taken into account by fixing $\phi_{K,e} = 0$. On the internal interfaces we approximate the flux as follows :

$$\frac{1}{\mathfrak{m}(e)} \int_e (\sigma \nabla u) \cdot \mathbf{n}_K ds \simeq \nabla u(y_e) \cdot (\sigma_K \mathbf{n}_{K,e}) = \lambda_{K,e} \nabla u(y_e) \cdot \frac{y_e - x_K}{d_{K,e}}.$$

An approximation of the derivative $\nabla u(y_e) \cdot \frac{y_e - x_K}{d_{K,e}}$ of u at point y_e is established by adding auxiliary unknowns $(u_e)_{e \in \mathcal{S}}$ at each point $(y_e)_{e \in \mathcal{S}}$:

$$\nabla u(y_e) \cdot \frac{y_e - x_K}{d_{K,e}} \simeq \frac{u_e - u_K}{d_{K,e}}.$$

An additional requirement is that the numerical fluxes satisfy the conservativity property,

$$(80) \quad \forall e = K|L \in \mathcal{S}^*, \quad \phi_{K,e} = -\phi_{L,e}.$$

This property enables us to determine the additional unknowns u_e and to compute the numerical fluxes on the internal interfaces :

$$(81) \quad \forall e = K|L \in \mathcal{S}^*, \quad \phi_{K,e} = \tau_e (u_L - u_K),$$

where

$$(82) \quad \tau_e = \frac{\lambda_{K,e} \lambda_{L,e}}{\lambda_{K,e} d_{L,e} + \lambda_{L,e} d_{K,e}} \mathfrak{m}(e) > 0.$$

The resulting approximation of the fluxes is consistent, as shown in [43].

consequently, the semi-discrete finite volumes formulation is :

$$(83) \quad \varepsilon \frac{du_K}{dt}(t) = \frac{\varepsilon^2}{\mathfrak{m}(K)} \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e (u_L - u_K) + f(u_K, v_K),$$

$$(84) \quad \frac{dv_K}{dt}(t) = g(u_K, v_K).$$

We recall that in (83)-(84) the boundary condition (65) is taken into account by fixing $\phi_{K,e} = 0$ on the external interfaces.

The most natural initial data is given for all $K \in \mathcal{T}$ by $w_K(0) = w_0(x_K)$, or $w_K(0) = \frac{1}{\mathfrak{m}(K)} \int_K w_0(x) dx$.

The discrete elliptic operator $A_{\mathcal{T}}$ defined on $L^2(\mathcal{T})$ by

$$(85) \quad A_{\mathcal{T}} : u_{\mathcal{T}} \in L^2(\mathcal{T}) \mapsto z_{\mathcal{T}} \in L^2(\mathcal{T}), \quad z_K = \frac{1}{\mathfrak{m}(K)} \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e (u_L - u_K)$$

approximates the continuous elliptic operator $u \mapsto \nabla \cdot (\sigma \nabla u)$.

At last, the semi-discrete system of ODEs simply writes

$$(86) \quad \varepsilon \frac{du_{\mathcal{T}}}{dt}(t) = \varepsilon^2 A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}} + f(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}),$$

$$(87) \quad \frac{dv_{\mathcal{T}}}{dt}(t) = g(u_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{T}}).$$

The operator $A_{\mathcal{T}}$ is symmetric on $L^2(\mathcal{T})$ and verifies :

$$(88) \quad (A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}, u_{\mathcal{T}})_{L^2(\Omega)} = - \sum_{e=K|L \in \mathcal{S}^*} \tau_e |u_L - u_K|^2.$$

Therefore $A_{\mathcal{T}}$ is non-negative and its kernel is the subspace of the constant functions on Ω , and define the following semi-norm on $L^2(\mathcal{T})$,

$$(89) \quad |u_{\mathcal{T}}|_{1,\mathcal{T}}^2 = -(A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}, u_{\mathcal{T}})_{L^2} = \sum_{e=K|L \in \mathcal{S}^*} \tau_e |u_L - u_K|^2.$$

With this semi-norm the space of the finite volumes functions will be referred to as $H^1(\mathcal{T})$. Unlike in the case of a finite element Galerkin formulation, the space $H^1(\mathcal{T})$ is not a subspace of $H^1(\Omega)$ but only a discrete equivalent.

3.3. Time-Stepping Methods. Given an admissible mesh as defined in section 3.1, we choose a time step $\Delta t > 0$ and consider the

forward Euler method (90)-(91) and the backward Euler method (92)-(93).

$$(90) \quad \varepsilon \frac{u_{\mathcal{T}}^{n+1} - u_{\mathcal{T}}^n}{\Delta t} = \varepsilon^2 A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^n + f(u_{\mathcal{T}}^n, v_{\mathcal{T}}^n),$$

$$(91) \quad \frac{v_{\mathcal{T}}^{n+1} - v_{\mathcal{T}}^n}{\Delta t} = g(u_{\mathcal{T}}^n, v_{\mathcal{T}}^n).$$

$$(92) \quad \varepsilon \frac{u_{\mathcal{T}}^{n+1} - u_{\mathcal{T}}^n}{\Delta t} = \varepsilon^2 A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^{n+1} + f(u_{\mathcal{T}}^n, v_{\mathcal{T}}^n),$$

$$(93) \quad \frac{v_{\mathcal{T}}^{n+1} - v_{\mathcal{T}}^n}{\Delta t} = g(u_{\mathcal{T}}^n, v_{\mathcal{T}}^n).$$

4. Stability Analysis

As explained in section 2.3, any regular solution initially in a contracting rectangle Σ (def. 2.1) exists for all time $t \geq 0$ and remains trapped in Σ . We shall prove in this section that

- (1) the semi-discrete solutions of the ODEs (86)-(87) initially in Σ exist for all $t > 0$ and remain trapped in Σ as well, *without any additional regularity assumption on the mesh*;
- (2) the discrete solutions given by (90)-(91) or (92)-(93) initially in Σ are well-defined for all $n \geq 0$ and remain trapped in Σ as well, under classical conditions on the time step Δt .

Item (1) justifies the choice of a finite volumes method, and proves that numerical instability are only caused by the time-stepping method. The Δt conditions in item (2) splits into constraints due to the discrete elliptic operator $A_{\mathcal{T}}$ and the non-linear source terms f_K, g_K .

The balance between these constraints is ruled by the ratio of the mesh size $\text{size}(\mathcal{T})$ to the time-scale factor ε , showing up the main question of the discretization : how should the mesh and the time step be chosen with respect to the value of ε and the desired accuracy ?

We recall that invariant regions can be built as big as one wishes (see figure 1) so that any solution of (63)-(65) associated with a bounded initial data can be approximated with numerical stability.

4.1. Stability for the Semi-Discrete Problem. Given any initial data $w_{\mathcal{T}}^0 \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$, the system of ODEs (86)-(87) has a unique solution $w \in C^1([0, T]; L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T}))$, for some $T > 0$, because f and g are locally Lipschitz on \mathbb{R}^2 .

THEOREM 4.1. *Let $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ be a rectangular invariant set (def. 2.1). Then Σ is an invariant region for the semi discrete system (86)-(87) :*

$$\forall K \in \mathcal{T}, w_K^0 \in \Sigma \Rightarrow \forall t > 0, \forall K \in \mathcal{T}, w_K(t) \in \Sigma.$$

and w has an infinite lifetime $T = +\infty$

The proof of the theorem is supported by the following lemma which is a discrete analogue of lemma 2.2.

LEMMA 4.1. *Let \mathcal{T} be an admissible mesh of Ω adapted to the conductivity tensor σ and $A_{\mathcal{T}}$ be the operator defined by (85).*

If $u_{\mathcal{T}}$ has a maximum (resp. minimum) for $K \in \mathcal{T}$ then $\{A_{\mathcal{T}}u_{\mathcal{T}}\}_K \leq 0$ (resp. $\{A_{\mathcal{T}}u_{\mathcal{T}}\}_K \geq 0$).

PROOF OF THE LEMMA 4.1. If $u_{\mathcal{T}} \in L^2(\mathcal{T})$ has a maximum for $K \in \mathcal{T}$ then for any cell $L \in \mathcal{T}$ neighbouring K one has $u_K \geq u_L$. As a result $u_L - u_K$ is non-positive and so $\{A_{\mathcal{T}}u_{\mathcal{T}}\}_K \leq 0$ \square

PROOF OF THE THEOREM 4.1. Let Σ be an invariant rectangle and $w^0 \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$ satisfy $w_K^0 \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$. Consider $T > 0$ and the solution $w \in C^1([0, T]; L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T}))$ of (86)-(87) with initial data $w_{\mathcal{T}}^0$.

Assume now that w reaches $\partial\Sigma$ at time $t_0 \geq 0$ and that $w_K(t) \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$ and all $t \in [0, t_0]$. Let $K \in \mathcal{T}$ be such that $w_K(t_0) \in \partial\Sigma$. First assume that $w_K(t_0)$ is on the right side of $\partial\Sigma$: $u_K(t_0) = u_+$ and $v_- \leq v_K(t_0) \leq v_+$. Then, on the one hand definition 2.1 implies $f(w_K(t_0)) < 0$, and on the other hand $\max_{L \in \mathcal{T}} u_L(t_0) = u_+ = u_K(t_0)$ so that property $\{A_{\mathcal{T}}u_{\mathcal{T}}(t_0)\}_K \leq 0$ (lemma 4.1). As a result we have $du_K/dt(t_0) < 0$ and so $u_K(t) < u_+$ for $t \in (t_0, t_0 + \delta)$ for some $\delta > 0$. Now if $w_K(t_0)$ is on the top side of Σ , $v_K(t_0) = v_+$ and $u_- \leq u_K(t_0) \leq u_+$, since $g < 0$ on that top side then $\partial_t v_K(t_0) < 0$ and so $v_K(t) < v_+$ for $t \in (t_0, t_0 + \delta)$.

Al together, w cannot get out of Σ , even at a corner point where the two precedent reasons hold.

To end, since w remain uniformly bounded it has an infinite lifetime $T = +\infty$. \square

4.2. Stability for the Semi-Implicit Euler Method. We recall that the operator $A_{\mathcal{T}}$ is non-positive, so that $\text{Id} - \varepsilon\Delta t A_{\mathcal{T}}$ is symmetric and positive-definite for any $\Delta t > 0$. As a consequence, given $(u_{\mathcal{T}}^n, v_{\mathcal{T}}^n)$, equation (92) has a unique solution; and for any $w_{\mathcal{T}}^0$, equations (92)-(93) define a unique sequence $(w_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$.

The following lemma gives a condition on Δt for $w_{\mathcal{T}}^n$ to remain in Σ if $w_{\mathcal{T}}^0 \in \Sigma$.

THEOREM 4.2. *Let Σ be a rectangular invariant set (def 2.1). If the time step Δt verifies*

$$(94) \quad \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left| \inf_{\Sigma} \partial_u f \right| \leq 1, \quad \Delta t \left| \min_{\Sigma} \partial_v g \right| \leq 1,$$

then Σ is an invariant region for the solution $(w_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ of (92)-(93) :

$$\forall K \in \mathcal{T}, w_K^0 \in \Sigma \Rightarrow \forall n \in \mathbb{N}, \forall K \in \mathcal{T}, w_K^n \in \Sigma.$$

REMARK 4.1. *Condition (94) can be specified with $F(u) = -u(u - a)(u - 1)$:*

– for the FHN model (61), we have

$$|\min_{\Sigma} \partial_u f| = \max(|F'(u_-)|, |F'(u_+)|), \quad |\min_{\Sigma} \partial_v g| = 1,$$

– for the AP model (62), we have

$$|\min_{\Sigma} \partial_u f| = \max(|F'(u_-) - v_+|, |F'(u_+) - v_+|), \quad |\min_{\Sigma} \partial_v g| = 1.$$

This yields explicit computations of the time-step in applied cases.

PROOF OF THE LEMMA 4.2. Equations (92)-(93) can be rewritten as

$$\begin{aligned} (\text{Id} - \varepsilon \Delta t A_{\mathcal{T}}) u_{\mathcal{T}}^{n+1} &= u_{\mathcal{T}}^n + \Delta t f(w_{\mathcal{T}}^n) / \varepsilon, \\ v_{\mathcal{T}}^{n+1} &= v_{\mathcal{T}}^n + \Delta t g(w_{\mathcal{T}}^n), \end{aligned}$$

for all $n \in \mathbb{N}$, which has a unique solution (see above).

Let us consider the following function defined on \mathbb{R}^2 :

$$\phi(w) = (\phi_1(w), \phi_2(w)) = (u + \Delta t f(w) / \varepsilon, v + \Delta t g(w)).$$

Under condition (94) one has $\partial_u \phi_1 \geq 0$ and so $\sup_{\Sigma} \phi_1 = \phi_1(u_+, v) = u_+ + \Delta t f(u_+, v) / \varepsilon$ for some v , $v_- \leq v \leq v_+$. But definition 2.1 ensures that $f(u_+, v) < 0$ and then $\sup_{\Sigma} \phi_1 \leq u_+$. Similarly, $\inf_{\Sigma} \phi_1 \geq u_-$ and $v_- \leq \inf_{\Sigma} \phi_2 \leq \sup_{\Sigma} \phi_2 \leq v_+$. As a consequence, $\phi(\Sigma) \subset \Sigma$.

Now let $w_{\mathcal{T}}^0 \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$ satisfy $w_K^0 \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$. Since $\phi(\Sigma) \subset \Sigma$ we have $(\{(\text{Id} - \varepsilon \Delta t A_{\mathcal{T}}) u_{\mathcal{T}}^1\}_K, v_K^1) \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$. If $K \in \mathcal{T}$ is such that $u_K^1 = \max_{L \in \mathcal{T}} u_L^1$, then $\{A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^1\}_K \leq 0$ (this is lemma 4.1) and then $\{(\text{Id} - \varepsilon \Delta t A_{\mathcal{T}}) u_{\mathcal{T}}^1\}_K \leq u_+$ implies that $u_K^1 = \max_{L \in \mathcal{T}} u_L^1 \leq u_+$. Similarly, $\inf_{L \in \mathcal{T}} u_L^1 \geq u_-$ and so $w_K^1 \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$ \square

4.3. Stability for the Explicit Euler Method. Given any $w_{\mathcal{T}}^0 \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$, the discrete system (90)-(91) define explicitly a unique sequence $(w_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$.

The following lemma gives a condition on Δt for $w_{\mathcal{T}}^n$ to remain in Σ if $w_{\mathcal{T}}^0 \in \Sigma$.

THEOREM 4.3. *Let Σ be a rectangular invariant set (def 2.1). If the time step Δt verifies*

$$(95) \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \Delta t \frac{\varepsilon}{\text{m}(K)} \sum_{e \in \delta K^*} \tau_e + \frac{\Delta t}{\varepsilon} |\inf_{\Sigma} \partial_u f| \leq 1, \quad \Delta t \left| \min_{\Sigma} \partial_v g \right| \leq 1,$$

then Σ is an invariant region for the solution $(w_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ of (90)-(91) :

$$\forall K \in \mathcal{T}, w_K^0 \in \Sigma \Rightarrow \forall n \in \mathbb{N}, \forall K \in \mathcal{T}, w_K^n \in \Sigma.$$

REMARK 4.2. *There is a classical condition of regularity for a family of admissible meshes that is there exist uniform constants $\alpha, \beta > 0$ such that*

$$\forall e = K|L \in \mathcal{S}^*, \quad \alpha \Delta x \leq d_{K,e} + d_{L,e}, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \Delta x \text{m}(\partial K) \leq \beta \text{m}(K),$$

where Δx is the size of the mesh \mathcal{T} . For such a family of admissible meshes, and in the isotropic case $\nabla \cdot (\sigma \nabla u) = D\Delta(u)$, the first stability condition (95) becomes

$$\varepsilon D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{\beta}{\alpha} + \frac{\Delta t}{\varepsilon} |\inf_{\Sigma} \partial_u f| \leq 1.$$

This condition combines the classical stability conditions for both the heat equation $u' = D\Delta(u)$ and the ordinary differential equation $u' = f(u)$.

PROOF OF THE LEMMA 4.3. Equations (90)-(91) can be rewritten as :

$$\begin{aligned} u_{\mathcal{T}}^{n+1} &= (\text{Id} + \varepsilon \Delta t A_{\mathcal{T}}) u_{\mathcal{T}}^n + \frac{\Delta t}{\varepsilon} f(w_{\mathcal{T}}^n), \\ v_{\mathcal{T}}^{n+1} &= v_{\mathcal{T}}^n + \Delta t g(w_{\mathcal{T}}^n). \end{aligned}$$

Let $w_{\mathcal{T}}^0 \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$ satisfy $w_K^0 \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$. For any $K \in \mathcal{T}$,

$$\phi^-(w_K^0) \leq u_K^1 \leq \phi^+(w_K^0),$$

where the two functions ϕ^- and ϕ^+ are defined by

$$\begin{aligned} \phi^-(w) &= u + \frac{\varepsilon \Delta t}{\text{m}(K)} \sum_{e \in \delta K^*} \tau_e (u_- - u) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} f(w), \\ \phi^+(w) &= u + \frac{\varepsilon \Delta t}{\text{m}(K)} \sum_{e \in \delta K^*} \tau_e (u_+ - u) + \frac{\Delta t}{\varepsilon} f(w). \end{aligned}$$

The stability condition (95) implies that $\partial_u \phi^- \geq 0$ and $\partial_u \phi^+ \geq 0$ on Σ , and then,

$$u_- + \Delta t f(u_-, v_K^0) \leq u_K^1 \leq u_+ + \Delta t f(u_+, v_K^0).$$

At last, Σ being an invariant rectangle (def. 2.1), $f(u_-, v_K^0) > 0$ and $f(u_+, v_K^0) < 0$. As a consequence, $u_- \leq u_K^1 \leq u_+$. Similarly we have $v_- \leq v_K^1 \leq v_+$ and at last, $w_K^1 \in \Sigma$ for all $K \in \mathcal{T}$ \square

5. Convergence Analysis

Convergence of the finite volumes approximations and error estimates are proved in this section.

The functions f, g are supposed to be those of the *FHN* or *AP* model, and the other data $\Omega, \sigma, w^0 = (u^0, v^0)$ are supposed to fulfill the assumptions of lemma 2.1 and theorem 2.2, in order for the solution $w(t)$ to exist for all $t > 0$ in a fixed rectangle Σ , depending only on w^0 .

In this case, the solution $w(x, t)$ is $C^2(\overline{\Omega})$ with respect to x and $C^1([0, +\infty))$ with respect to t .

Given an admissible mesh as defined in section 3.1, and $\Delta t > 0$, we denote by $(\overline{w}_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ the sequence defined by (92)-(93) or (90)-(91) and $\overline{w}_K^0 = w^0(x_K)$ for all $K \in \mathcal{T}$.

Under the condition (94) or (95), both w and $\bar{w}_{\mathcal{T}}^n$ remain in Σ .

In order to compare the discrete and the continuous solutions we introduce the sequence $(w_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$ defined by

$$(96) \quad w_K^n = w(x_K, t^n) = (u(x_K, t^n), v(x_K, t^n)).$$

The error $(e_{\mathcal{T}}^n)_{n \in \mathbb{N}}$ writes

$$(97) \quad e_{\mathcal{T}}^n = w_{\mathcal{T}}^n - \bar{w}_{\mathcal{T}}^n \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T}).$$

THEOREM 5.1 (Convergence and Error Estimate). *Suppose that the data fulfill the assumptions of lemma 2.1 and theorem 2.2. Assume furthermore that $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ is an invariant rectangle (def. 2.1) for f and g such that the initial data w^0 is in Σ 's interior.*

We additionally assume that $\partial_t w$ and the second order derivatives in space $\partial_{\xi_i}^2 u$ of u are uniformly bounded on $\bar{\Omega} \times (0, T]$.

Let $w_{\mathcal{T}}^n$ be the approximation of w as defined by (90)-(91) (or in (92)-(93)) with the initial data

$$(98) \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \bar{w}_K^0 = w_0(x_K) = (u_0(x_K), v_0(x_K)).$$

If the stability condition (94) (or (95)) relative to Σ is satisfied, then there exists two constants C and μ , only depending on the data $(\Omega, w^0, f, g$ and $\Sigma)$ such that for $n\Delta t \leq T$ the error is

$$\|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2} \leq C e^{\mu T} (\text{size}(\mathcal{T}) + \Delta t).$$

PROOF OF THE THEOREM 5.1. We shall prove theorem 5.1 for the Euler semi implicit scheme (90)-(91), the proof being similar for the Euler semi explicit scheme (92)-(93). For simplicity we shall also take $\varepsilon = 1$. With the notations previously defined, the balance equation at time t^{n+1} for (63)-(65) on any cell $K \in \mathcal{T}$ reads :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_K u(x, t^{n+1}) dx &= \int_{\partial K \cap \Omega} \sigma \nabla u(x, t^{n+1}) \cdot \mathbf{n}_K ds + \int_K f(w(x, t^{n+1})) dx \\ \frac{d}{dt} \int_K v(x, t^{n+1}) dx &= \int_K g(w(x, t^{n+1})) dx. \end{aligned}$$

together with definition (96) this leads to :

$$(99) \quad \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + T_K^{1,n} = \{A_{\mathcal{T}} u_{\mathcal{T}}^{n+1}\}_K + \frac{1}{\text{m}(K)} \sum_{e \in \delta K^*} F_{e,K}^n + f(w_K^n) + R_K^{1,n}$$

$$(100) \quad \frac{v_K^{n+1} - v_K^n}{\Delta t} + T_K^{2,n} = g(w_K^n) + R_K^{2,n},$$

where :

- $F_{e,K}^n$ stands for the consistence error on the numerical approximation of the flux $\int_e \sigma \nabla u \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ on the edge $e \in \delta K^*$:

$$\int_e \sigma(x) \nabla u(x, t_{n+1}) \cdot \mathbf{n}_K ds = \tau_e (u_L^{n+1} - u_K^{n+1}) + F_{e,K}^n \text{m}(e),$$

F_{eK}^n fulfills the following conservativity property :

$$(101) \quad \forall e = K|L \in \mathcal{S}^*, \quad F_{e,K}^n = -F_{e,L}^n,$$

and since u is assumed to have uniformly bounded second order derivatives on $\bar{\Omega} \times (0, T]$ it is controlled by the size of the mesh (see [43]) :

$$(102) \quad |F_{e,K}^n| \leq C_{w,\sigma} size(\mathcal{T}),$$

(where C_α generically denotes a constant depending on the data α only).

• $T_K^n = (T_K^{1,n}, T_K^{2,n})$ stands for the consistence error on the time integration :

$$\frac{1}{m(K)} \int_K \partial_t w(x, t_{n+1}) dx = \frac{w_K^{n+1} - w_K^n}{\Delta t} + T_K^n$$

which is of order one since $\partial_t w$ is uniformly bounded on $\bar{\Omega} \times (0, T]$:

$$(103) \quad |T_K^n| \leq C_w (size(\mathcal{T}) + \Delta t).$$

We shall consider T_T^n as a finite volumes function $T_T^n \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$.

• $R_K^n = (R_K^{1,n}, R_K^{2,n})$ is the consistence error on the reaction term, for $F = (f, g)$:

$$\frac{1}{m(K)} \int_K F(w(x, t_{n+1})) dx = F(w_K^{n+1}) + R_K^n.$$

Since w remains bounded (inside Σ) and f, g are locally Lipschitz, it is of order one :

$$(104) \quad |R_K^n| \leq C_{w,f,g,\Sigma} size(\mathcal{T}).$$

Again we shall consider R_T^n as a finite volumes function $R_T^n \in L^2(\mathcal{T}) \times L^2(\mathcal{T})$. Now, subtracting (92)- (93) to (99)-(100), the error e_T^n defined in (97) satisfies the following equation :

$$\frac{e_K^{1,n+1} - e_K^{1,n}}{\Delta t} + T_K^{1,n} = \{A_T e_T^{1,n+1}\}_K + \frac{1}{m(K)} \sum_{e \in \delta K^*} F_{e,K}^n m(e) + (f(w_K^n) - f(\bar{w}_K^n)) + R_K^{1,n}$$

(105)

$$\frac{e_K^{2,n+1} - e_K^{2,n}}{\Delta t} + T_K^{2,n} = g(w_K^n) - g(\bar{w}_K^n) + R_K^{2,n},$$

multiplying the first equation by $m(K) e_K^{1,n+1}$ and summing over all cells $K \in \mathcal{T}$ leads to, by making use of the inner product (73), of the discrete H^1 semi-norm (89) and of the formula (88) :

$$(106) \quad \begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} (e_T^{1,n+1}, e_T^{1,n+1} - e_T^{1,n})_{L^2} + |e_T^{1,n+1}|_{1,\mathcal{T}}^2 &= (e_T^{1,n+1}, R_T^{1,n} - T_T^{1,n})_{L^2} \\ &+ (e_T^{1,n+1}, f(w_T^n) - f(\bar{w}_T^n))_{L^2} \\ &+ \sum_{K \in \mathcal{T}} e_K^{1,n+1} \sum_{e \in \delta K^*} F_{e,K}^n m(e) \end{aligned}$$

First of all, since the restriction to Σ of f is Lipschitz continuous, there is a constant $\Lambda_{f,\Sigma}$ such that : $\|f(w_{\mathcal{T}}^n) - f(\bar{w}_{\mathcal{T}}^n)\|_{L^2} \leq \Lambda \|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2}$. Then, by making use of the Schwartz inequality :

$$|(e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}, f(w_{\mathcal{T}}^n) - f(\bar{w}_{\mathcal{T}}^n))_{L^2}| \leq \Lambda \|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2} \|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2},$$

with the Schwartz inequality again :

$$\begin{aligned} |(e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}, e_{\mathcal{T}}^{1,n})_{L^2}| &\leq \|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2} \|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2} |(e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}, R_{\mathcal{T}}^{1,n} - T_{\mathcal{T}}^{1,n})| \\ &\leq \underbrace{(\|R_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2} + \|T_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2})}_{\leq C_{w,\Omega,f,g,\Sigma}(\Delta t + \text{size}(\mathcal{T}))} \|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2}. \end{aligned}$$

The conservativity (101) of $F_{K,e}^n$ reads :

$$\begin{aligned} \left| \sum_{K \in \mathcal{T}} e_K^{1,n+1} \sum_{e \in \delta K^*} F_{e,K}^n m(e) \right| &= \left| \sum_{e=K|L \in \mathcal{S}^*} F_{e,K}^n (e_K^{1,n+1} - e_L^{1,n+1}) m(e) \right| \\ &\leq |e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}|_{1,\mathcal{T}} \underbrace{\left(\sum_{e \in \mathcal{S}^*} |F_e^n|^2 m(e)^2 / \tau_e \right)^{1/2}}_{\leq C_{w \text{ size}(\mathcal{T})} \sum_{e \in \mathcal{S}^*} m(e)^2 / \tau_e}. \end{aligned}$$

the conductivity tensor being uniformly elliptic on Ω , $\sum_{e \in \mathcal{S}^*} m(e)^2 / \tau_e \leq C_{\sigma} m(\Omega)$, where $m(\Omega)$ is the measure of the domain Ω . Altogether with equation (106) these upper bounds lead to :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2}^2 + |e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}|_{1,\mathcal{T}}^2 &\leq \left(\Lambda + \frac{1}{\Delta t} \right) \|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2} \|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2} \\ &\quad + C(\text{size}(\mathcal{T}) + \Delta t) (\|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2} + |e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}|_{1,\mathcal{T}}), \end{aligned}$$

and using Young's inequalities for the three terms on right hand side writes :

$$\|e_{\mathcal{T}}^{1,n+1}\|_{L^2}^2 \leq \frac{(1 + \Lambda \Delta t)^2}{1 - \Delta t} \|e_{\mathcal{T}}^n\|_{L^2}^2 + C(\text{size}(\mathcal{T}) + \Delta t)^2 \Delta t$$

Using the same process on (105) gives the same upper bound on $\|e_{\mathcal{T}}^{2,n+1}\|_{L^2}^2$ and so, if $(n+1)\Delta t \leq T$ one has :

$$\|e_{\mathcal{T}}^{n+1}\|_{L^2}^2 \leq e^{\mu T} (\|e_{\mathcal{T}}^0\|_{L^2}^2 + C(\text{size}(\mathcal{T}) + \Delta t)^2)$$

for some constant μ related with Λ , which ends the proof for theorem 5.1. \square

6. Stabilité des gradients numériques

On s'intéresse dans cette section au contrôle des gradients numériques des approximations volumes finis de (63)-(66).

On commence par énoncer une inégalité d'énergie classique pour les solutions $w = (u, v)$ du problème continu qui permet de contrôler le gradient de u à condition que la donnée initiale $w(\cdot, t = 0)$ soit incluse dans un rectangle invariant Σ .

On transpose ensuite cette propriété dans le cas discret.

6.0.1. *Inégalité d'énergie pour le problème continu.* Supposons que $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ soit un rectangle invariant pour le système (63)-(65).

Soit alors $w = (u, v)$ une solution de ce système pour une donnée initiale w_0 incluse dans le rectangle invariant Σ ,

$$\forall x \in \Omega : w_0(x) \in \Sigma ,$$

alors le théorème de stabilité 2.2 assure que la solution w est bornée (uniformément en temps) dans $L^\infty(\Omega)$.

Cette propriété permet également de contrôler les gradients de u :

PROPOSITION 6.1 (Inégalité d'énergie). *x En se plaçant dans le cadre du lemme de régularité 2.1 et avec les hypothèses ci dessus,*

$$(107) \quad \varepsilon^2 \int_0^T \|\sigma^{1/2} \nabla u\|_{L^2} dt \leq \frac{\varepsilon}{2} \|u_0\|_{L^2}^2 + T C_{\Omega, \Sigma, f} ,$$

où la constante $C_{\Omega, \Sigma, f}$ ne dépend que du domaine Ω , du rectangle invariant Σ ainsi que du terme de réaction f restreint à Σ .

DÉMONSTRATION. Reprenant l'équation parabolique (63) satisfaite par u ,

$$\varepsilon \partial_t u = \varepsilon^2 \nabla \cdot (\sigma \nabla u) + f(u, v) ,$$

en la multipliant par u et intégrant sur le domaine Ω et l'intervalle de temps $[0, T]$,

$$\varepsilon^2 \int_0^T \|\sigma \nabla u \cdot \nabla u\|_{L^2} dt = \frac{\varepsilon}{2} \|u(\cdot, t = 0)\|_{L^2}^2 - \frac{\varepsilon}{2} \|u(\cdot, t = T)\|_{L^2}^2 + \int_0^T \int_{\Omega} f(w(x; t)) u(x; t) dx dt .$$

Considérons Λ la constante de Lipschitz du terme de réaction f restreint au rectangle Σ .

Par définition 2.1 d'un rectangle invariant il existe un point $P \in \Sigma$ tel que $f(P) = 0$, on a alors la majoration suivante :

$$|w(x, t)| = |w(x, t) - w(P)| \leq \Lambda \text{diam}(\Sigma) ,$$

et si $M_\Sigma = \sup \{|u|, (u, v) \in \Sigma\}$ on a :

$$\left| \int_0^T \int_{\Omega} f(w(x; t)) u(x; t) dx dt \right| \leq T \Lambda \text{diam}(\Sigma) M_\Sigma m(\Omega) ,$$

ce qui donne l'inégalité d'énergie (107) avec $C_{\Omega, \Sigma, f} = \Lambda \text{diam}(\Sigma) M_\Sigma m(\Omega)$

□

6.0.2. *Inégalité d'énergie pour le problème discret.* On a introduit en (89) la semi norme $|\cdot|_{1,\mathcal{T}}$ sur l'espace $L^2(\mathcal{T})$ des fonctions volumes finis :

$$\forall u \in L^2(\mathcal{T}), \quad |u|_{1,\mathcal{T}}^2 = -(A_{\mathcal{T}}u, u)_{L^2} = \sum_{e=K|L \in \mathcal{S}^*} \tau_e |u_L - u_K|^2.$$

La définition (82) des coefficients de transmission τ_e sur chaque interface e est telle que $\tau_e(u_L - u_K)$ est une approximation de $\sigma \nabla u \cdot \mathbf{n}_{e,K}$ de sorte que la semi norme $|\cdot|_{1,\mathcal{T}}$ est un équivalent discret de $\|\sigma \nabla u \cdot \nabla u\|_{L^2}$.

Ainsi si $(u^n)_{0 \leq n \Delta t < T}$ est une suite de fonctions volumes finis dans $L^2(\mathcal{T})$, un équivalent discret de $\int_0^T \|\sigma \nabla u \cdot \nabla u\|_{L^2} dt$ est donné par :

$$\sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t |u|_{1,\mathcal{T}}^2.$$

On considère un schéma d'approximation de (63) (66) pour une condition initiale w_0 incluse dans un rectangle invariant Σ , soit par le schéma semi implicite défini par (92) (93) soit par le schéma explicite (90) (91) pour une condition initiale $w^0 \in L^2(\mathcal{T})$ donnée par :

$$w_K^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K w_0(x) dx.$$

THÉORÈME 6.1 (Stabilité des gradients numériques). *On considère sur un maillage admissible \mathcal{T} le schéma d'approximation semi implicite (92) (93) ou explicite (90) (91) pour la solution de (63) (66) associée à la donnée initiale w_0 incluse dans le rectangle invariant Σ .*

On suppose que le schéma vérifie une condition de stabilité relative au rectangle invariant Σ :

- pour le schéma implicite on suppose que (94) est satisfaite,
- pour le schéma explicite on impose la condition (95) et on impose en outre que : pour $0 < \xi < 1$, indépendamment de Δt ,

$$(108) \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \Delta t \frac{\varepsilon}{m(K)} \sum_{e \in \delta K^*} \tau_e < 1 - \xi,$$

Les gradients numériques de l'approximation volumes finis sont contrôlés par l'inégalité d'énergie discrète suivante :

$$(109) \quad \varepsilon^2 (1 - R) \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t |u|_{1,\mathcal{T}}^2 \leq \frac{\varepsilon}{2} \|u_0\|_{L^2}^2 + T C_{\Omega,\Sigma,f},$$

où la constante $C_{\Omega,\Sigma,f}$ ne dépend que du domaine Ω , du rectangle invariant Σ et de la restriction du terme de réaction f à Σ et où la constante $R = 0$ dans le cas semi implicite et $0 < R < 1$ pour un schéma explicite.

DÉMONSTRATION.

Cas du schéma semi implicite (92) (93).

Les approximations volumes finis $(u^n)_{0 \leq n \Delta t < T}$ de la solution continu u sur l'intervalle de temps $[0, T]$ vérifient,

$$\varepsilon (u^{n+1} - u^n) = \Delta t \varepsilon^2 A_{\mathcal{T}} u^{n+1} + \Delta t f(w^n),$$

de sorte que faisant le produit scalaire avec u^{n+1} on obtient, par définition (89) de la semi norme $|\cdot|_{1, \mathcal{T}}$:

$$(110) \quad \varepsilon^2 \Delta t |u^{n+1}|_{1, \mathcal{T}}^2 = -\varepsilon (u^{n+1} - u^n, u^{n+1})_{L^2} + \Delta t (f(w^n), u^{n+1})_{L^2}.$$

Or comme,

$$(u^{n+1} - u^n, u^{n+1})_{L^2} = \frac{1}{2} \|u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \frac{1}{2} \|u^n\|_{L^2}^2 + \frac{1}{2} \|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2,$$

en sommant (110) entre les instants $n = 0$ et $n = N - 1$, où N est le plus petit entier tel que $N \Delta t \geq T$, on obtient :

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t |u|_{1, \mathcal{T}}^2 &= \frac{\varepsilon}{2} \|u^0\|_{L^2}^2 - \frac{\varepsilon}{2} \|u^N\|_{L^2}^2 + \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^{n+1})_{L^2} \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{2} \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2 \\ &\leq \frac{\varepsilon}{2} \|u^0\|_{L^2}^2 + \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^{n+1})_{L^2}. \end{aligned}$$

Introduisant la constante de Lipschitz Λ de la restriction de f à Σ , et prenant en compte que par définition (2.1) de Σ il existe un point $P \in \Sigma$ tel que $f(P) = 0$ on a la majoration :

$$|f(w_K^n)| = |f(w_K^n) - f(P)| \leq \Lambda \text{diam}(\Sigma),$$

due au fait que, le pas de temps Δt vérifiant la condition de stabilité (94) w^n reste dans Σ .

Pour la même raison, si $M_\Sigma = \sup \{|u|, (u, v) \in \Sigma\}$ on a $|u_K^{n+1}| \leq M_\Sigma$ et donc :

$$\sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^{n+1})_{L^2} \leq T \text{m}(\Omega) \Lambda \text{diam}(\Sigma) M_\Sigma,$$

ce qui donne (109) avec $C_{\Omega, \Sigma, f} = \text{m}(\Omega) \Lambda \text{diam}(\Sigma) M_\Sigma$

Cas du schéma explicite (90) (91).

Désormais les approximations volumes finis $(u^n)_{0 \leq n \Delta t < T}$ de la solution continu u sur l'intervalle de temps $[0, T]$ vérifient,

$$\varepsilon (u^{n+1} - u^n) = \Delta t \varepsilon^2 A_{\mathcal{T}} u^n + \Delta t f(w^n),$$

de sorte que faisant le produit scalaire avec u^{n+1} on obtient :

$$(111) \quad \varepsilon^2 \Delta t |u^n|_{1, \mathcal{T}}^2 = -\varepsilon (u^{n+1} - u^n, u^n)_{L^2} + \Delta t (f(w^n), u^n)_{L^2}.$$

Maintenant,

$$(u^{n+1} - u^n, u^n)_{L^2} = \frac{1}{2} \|u^{n+1}\|_{L^2}^2 - \frac{1}{2} \|u^n\|_{L^2}^2 - \frac{1}{2} \|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2,$$

en sommant (110) entre les instants $n = 0$ et $n = N - 1$, où N est le plus petit entier tel que $N\Delta t \geq T$, on obtient :

$$\begin{aligned}
(112) \quad \varepsilon^2 \sum_{0 \leq n\Delta t < T} \Delta t |u|_{1,\mathcal{T}}^2 &= \frac{\varepsilon}{2} \|u^0\|_{L^2}^2 - \frac{\varepsilon}{2} \|u^N\|_{L^2}^2 + \sum_{0 \leq n\Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^n)_{L^2} \\
&\quad + \frac{\varepsilon}{2} \sum_{0 \leq n\Delta t < T} \|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2 \\
&\leq \frac{\varepsilon}{2} \|u^0\|_{L^2}^2 + \sum_{0 \leq n\Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^n)_{L^2} + \frac{\varepsilon}{2} \sum_{0 \leq n\Delta t < T} \|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2 .
\end{aligned}$$

Comme précédemment on majore

$$\sum_{0 \leq n\Delta t < T} \Delta t (f(w^n), u^n)_{L^2} \leq T \, \text{m}(\Omega) \, \Lambda \, \text{diam}(\Sigma) \, M_\Sigma ,$$

du fait que, le pas de temps Δt vérifiant la condition de stabilité 4.3, les approximations volumes finis w^n restent dans le rectangle invariant Σ , et il reste à majorer la série en $\|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2$.

On a

$$u_K^{n+1} - u_K^n = \varepsilon \Delta t (A_{\mathcal{T}} u^n)_K + \frac{\Delta t}{\varepsilon} f(w_K^n)$$

et en utilisant l'inégalité de Young on pour $\alpha > 0$:

$$|u_K^{n+1} - u_K^n|^2 = (1 + \alpha) \varepsilon^2 \Delta t^2 (A_{\mathcal{T}} u^n)_K^2 + (1 + \alpha) \frac{\Delta t^2}{\alpha \varepsilon^2} f(w_K^n)^2 .$$

En utilisant la définition de l'opérateur elliptique discret $A_{\mathcal{T}}$,

$$(A_{\mathcal{T}} u^n)_K = \frac{1}{\text{m}(K)} \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e (u_L^n - u_K^n) ,$$

et l'inégalité de Schwartz, on obtient :

$$(A_{\mathcal{T}} u^n)_K^2 \leq \frac{1}{\text{m}(K)^2} \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e |u_L^n - u_K^n|^2 .$$

Considérons la constante R définie comme :

$$R = \frac{\Delta t \varepsilon (1 + \alpha)}{\text{m}(K)} \sup_{K \in \mathcal{T}} \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e ,$$

la condition de stabilité (108) satisfaite par le pas de temps Δt assure que pour α suffisamment proche de 0 (et indépendant du maillage \mathcal{T} , Δt) $R < 1$, et l'on a la majoration

$$|u_K^{n+1} - u_K^n|^2 \leq \frac{\varepsilon \Delta t}{\text{m}(K)} R \sum_{e=K|L \in \delta K^*} \tau_e |u_L^n - u_K^n|^2 + \frac{\Delta t^2}{\alpha \varepsilon^2} f(w_K^n)^2 ,$$

multipliant cette inégalité par $m(K)$ et sommant sur toutes les cellules on a :

$$\|u^{n+1} - u^n\|_{L^2}^2 \leq 2\varepsilon \Delta t R |u^n|_{1,\mathcal{T}}^2 + \frac{\Delta t^2}{\alpha \varepsilon^2} \underbrace{\|f(w_K^n)\|_{L^2}^2}_{\leq m(\Omega) \wedge \text{diam}(\Sigma)^2},$$

ce qui donne en réinjectant cette inégalité dans (112) :

$$\varepsilon^2 (1 - R) \sum_{0 \leq n \Delta t < T} \Delta t |u|_{1,\mathcal{T}}^2 \leq \frac{\varepsilon}{2} \|u^0\|_{L^2}^2 + T m(\Omega) \wedge \text{diam}(\Sigma) M_\Sigma + T \frac{\Delta t}{2\alpha \varepsilon} m(\Omega) \wedge \text{diam}(\Sigma)^2,$$

avec $0 < R < 1$ dès que α est suffisamment petit. \square

Résultats numériques

On s'attache ici à la résolution numérique du modèle monodomaine (63) (66) à l'aide des schémas volumes finis introduits dans le chapitre 5 et implémentés en FORTRAN 90.

On s'intéressera particulièrement à la simulation de solutions particulières de (63) (66) décrivant la propagation du potentiel d'action cardiaque : propagation d'une onde de dépolarisation suivie d'une onde de repolarisation.

1. Simulations en dimension un

Le modèle monodomaine considéré sur \mathbb{R} tout entier possède la propriété (fondamentale pour la modélisation du potentiel d'action) de posséder des solutions de type *onde solitaire* ou *pulse*. Précisément une solution pour $x \in \mathbb{R}$ de :

$$(113) \quad \varepsilon \partial_t u = \varepsilon^2 d \Delta u + f(u, v) \quad , \quad d > 0$$

$$(114) \quad \partial_t v = g(u, v)$$

est un *pulse* si d'une part elle s'écrit $u(x, t) = U(x - ct)$, $v(x, t) = V(x - ct)$ et si d'autre part $U(\pm\infty) = 0 = V(\pm\infty)$.

Ce type de solution a été largement étudié, [48, 110, 56], pour des termes de réaction de type bistable dont font partie les termes de réaction de type *FHN* (Fitzhugh Nagumo [49, 89]) ou de type *AP* (Aliev Panfilov [96]) utilisés en électrophysiologie et dont on rappelle la forme : pour $k > 0$ et $0 < a < 1/2$,

$$(115)$$

$$FHN : \quad f(u, v) = -u(u - 1)(u - a) - v, \quad g(u, v) = ku - v,$$

$$(116)$$

$$AP : \quad f(u, v) = -ku(u - 1)(u - a) - uv, \quad g(u, v) = ku(1 + a - u) - v.$$

Lorsque $\varepsilon \ll 1$ il a été établi dans [56] que, pour un terme de réaction de type *FHN*, (113) (114) possède deux solutions de type *pulse* pour deux vitesses c distinctes : un *pulse* lent et un *pulse* rapide. La stabilité de ces solutions a également été largement étudiée [67, 116, 117] et lorsque $\varepsilon \ll 1$ le *pulse* rapide est asymptotiquement stable alors que le *pulses* lent est instable.

Le fait que l'on se place dans le cadre $\varepsilon \ll 1$ permet également d'étudier

les solutions de (113) (114) par des techniques de perturbations singulières (voir [10] ou la section 1.4), en particulier pour des termes de réaction f, g de type (115) (116) la solution de (113) (114) associée à la condition initiale $v = 0, u = H$ (fonction de Heaviside) converge exponentiellement en temps et uniformément en espace (à une translation en espace près) vers la solution *pulse* rapide de (113) (114).

On cherchera à simuler pour $\varepsilon \ll 1$ la *pulse* rapide solution de (113) (114). L'existence de ces ondes progressives pour le système (113) (114) est directement liée à la coexistence de deux dynamiques, une dynamique lente sur v et une dynamique rapide sur u , traduite par le paramètre $\varepsilon \ll 1$. Ces dynamiques lente/rapide induisent en particulier la présence de fronts d'ondes raides pour u , voir figure 1, qui nécessitent le recours à des maillages fins, voir section 1.1.

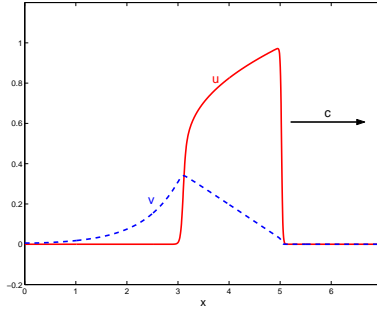


FIGURE 1. *Pulse* rapide solution de (113) (114) pour $\varepsilon = 1/100$.

Pour la simulation de ces *pulses* on considère les équations (113) (114) sur le segment $[0, 1]$ pour des termes de réaction f, g de type *FHN* ou *AP* décrits en (115), (116) et pour une condition de Neumann homogène en 0 et en 1 :

$$(117) \quad \partial_x u(0) = 0 \quad , \quad \partial_x u(1) = 0 .$$

La discrétisation de (113) (117) sur un maillage admissible régulier \mathcal{T} du segment $[0, 1]$ en N cellules de mesure $\Delta x = 1/N$ s'écrit :

$$(118) \quad \varepsilon \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\varepsilon^2 d}{\Delta x^2} A_{\mathcal{T}} u^p + f(u_j^n, v_j^n)$$

$$(119) \quad \frac{v_j^{n+1} - v_j^n}{\Delta t} = g(u_j^n, v_j^n)$$

où $(u^n)_{n \geq 0}$ est une suite de fonctions volumes finis : $u^n \in L^2(\mathcal{T})$ dont la valeur sur la $j^{\text{ème}}$ cellule $[(j-1)\Delta x, j\Delta x]$ est notée u_j^n ; et où $p = n$ pour un schéma explicite en temps et $p = n + 1$ pour un schéma semi implicite.

Identifiant l'espace $L^2(\mathcal{T})$ à \mathbb{R}^N , l'opérateur laplacien discret $A_{\mathcal{T}}$ est

simplement donné par la matrice tridiagonale :

$$A_{\mathcal{T}} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

1.1. Choix du pas d'espace : *propagation failure*. L'existence de solutions pour le système discrétisé (118) (119) du type *onde progressive*, c'est à dire telles que u_j^n et v_j^n s'écrivent sous la forme $\psi(j - cn)$, est intrinsèquement liée au choix du pas d'espace Δx . Chow *et. al.* ont notamment prouvé dans [13] que pour l'équation de Nagumo semi discrète : $\forall j \in \mathbb{Z}$

(120)

$$\partial_t u_j = \frac{d}{\Delta x^2} (u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}) - u_j(u_j - a)(u_j - 1), \quad 0 < a < 1/2$$

(un système infini d'ODE couplées), l'existence d'ondes progressives dans le cas semi discret implique l'existence d'ondes progressives dans le cas discret dès que le pas de temps est suffisamment petit.

L'existence de solution du type onde progressive pour l'équation de Nagumo semi-discrète (120) a été largement étudiée.

Dans le cas continu d'abord, l'équation de Nagumo sur \mathbb{R} :

$$\partial_t u = d \Delta u - u(u - a)(u - 1), \quad 0 < a < 1,$$

possède, à une translation en espace près, une solution bornée type onde progressive $u(x, t) = U(x - ct)$ qui vérifie $U(-\infty) = 1$ et $U(+\infty) = 0$ (voir [10, 88]).

Dans le cas semi discret, Keener a démontré dans [68] qu'en deçà d'une valeur critique α_0 , $d/\Delta x^2 < \alpha_0$, l'équation de Nagumo semi discrète (120) ne peut pas avoir de solution de type ondes progressives. Cette absence d'onde est due :

– d'une part à une propriété de monotonie de l'équation (120), si \underline{u} et \bar{u} sont deux solutions de (120) alors :

(121)

$$\forall j \in \mathbb{Z}, \quad \underline{u}_j(0) \leq \bar{u}_j(0) \quad \Rightarrow \quad \forall j \in \mathbb{Z}, \forall t \geq 0 : \quad \underline{u}_j(t) \leq \bar{u}_j(t),$$

– d'autre part à l'existence pour $d/\Delta x^2 \simeq 0$ de solutions stationnaires $(u_j)_{j \in \mathbb{Z}}$ pour (120) que l'on peut construire arbitrairement comme, pour chaque entier $j \in \mathbb{Z}$:

$$u_j \in [0, a) \quad \text{ou} \quad u_j \in (a, 1].$$

L'existence de ces solutions stationnaires ajoutée au principe de monotonie (121) bloque littéralement la propagation d'une onde progressive : on parle alors de régime de *propagation failure*.

Parallèlement Zinner a démontré dans [122, 121] qu'au delà d'une valeur critique α_1 , $d/\Delta x^2 > \alpha_1$, (120) possède des solutions de type ondes progressives qui sont en outre asymptotiquement stables.

Enfin dans le cas discret la stabilité des ondes progressives a également été établie par Chow *et. al.* dans [14] modulo une condition de stabilité sur le pas de temps équivalente au lemme 4.3 dans le cas scalaire.

Ainsi, dans le cas du système (118) (119), l'existence d'ondes progressives nécessite une condition restrictive sur le pas d'espace du type :

$$\Delta x < \varepsilon \sqrt{\frac{d}{\alpha_1}},$$

qui nécessite de recourir à des maillages suffisamment fins ou $\Delta x = O(\varepsilon)$. Cette condition sera particulièrement rédhitoire en dimension 2 et 3 où le recours à des maillages comprenant un grand nombre de points est essentiel pour éviter le phénomène de *propagation failure*.

1.2. Choix du pas de temps : contrainte de stabilité. Le choix du pas de temps Δt est dicté par les conditions de stabilité (95) (94). Une fois fixé un espace invariant Σ (définition (2.1)) et la constante associée C ,

$$C = \left| \inf_{\Sigma} \partial_u f(u, v) \right|,$$

ces contraintes se réécrivent ici comme :

intégration en temps	Contrainte de stabilité
semi implicite	$\Delta t C < \varepsilon$
explicite	$\Delta t \left(2d \frac{\varepsilon^2}{\Delta x^2} + C \right) < \varepsilon$

TABLE 1. Contraintes de stabilité en dimension 1.

Contrairement au cas de l'équation de la chaleur, $\partial_t u = \Delta u$, où un schéma Euler implicite est inconditionnellement stable, la présence du terme de réaction induit ici une contrainte forte sur Δt dans la mesure où $\varepsilon \ll 1$.

Toujours comparativement à l'équation de la chaleur, les phénomènes d'instabilités numériques dues au terme de diffusion sont ici modérés par le pré-facteur ε^2 .

Ainsi, pour des maillages fins où $\Delta x = O(\varepsilon)$ (tels qu'imposés par la condition de non *propagation failure*), la contrainte de stabilité sur Δt sera du même ordre pour les schémas implicite ou explicite.

Comme dans le même temps un schéma semi implicite nécessite la résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps, le coût en temps CPU sera donc moindre pour un schéma explicite que pour un

schéma implicite sur des maillages usuels (i.e. tels que $\Delta x = O(\varepsilon)$) (figure 2).

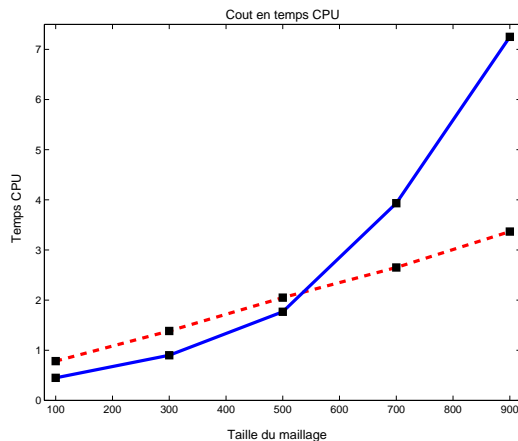


FIGURE 2. Coût en temps CPU comparés entre un schéma explicite (traits pleins) et semi implicite (pointillés) pour un choix de $\varepsilon = 1/200$.

On précise que pour le calcul illustré par la figure 2, l'inversion du système linéaire est assurée par une décomposition LU . Dans ce cas particulier où la matrice à inverser est tridiagonale, ce procédé coûte $5N$ opérations par inversion ce qui est comparable aux techniques itératives les plus performantes.

Cependant, contrairement au cas explicite, on peut recourir à une technique de pas de temps adaptatif pour réduire le coût du schéma explicite : la contrainte de stabilité imposée au schéma implicite n'est valable qu'en présence de zones raides dans le domaine de calcul (fronts de dépolarisation, de repolarisation). Lorsque le domaine est entièrement excitée ou entièrement au repos, un pas de temps plus grand peut être utilisé. Le recours à ce type de technique permet donc de diminuer considérablement le coût en temps de calcul des schémas implicites.

1.3. Étude de la convergence. Les résultats de la section 1.2 plaident pour le recours à un schéma explicite pour ce qu'il est moins coûteux en temps. Ce comparatif doit cependant être considéré à précision égale et on montre ici qu'un schéma explicite est en outre plus précis. Sur une suite de maillages de taille croissante on simule la solution de (113) (117) associée à la condition initiale $v_0 = 0$ et $u_0 = \mathbb{1}_{[0,0.1]}$ qui évolue vers la *pulse* rapide solution de (113) (114) sur \mathbb{R} . Le pas de temps Δt est donné par la condition de stabilité de la table 1 pour le schéma explicite et pour le schéma semi implicite par $\Delta t = \min(\Delta x, \varepsilon/C)$.

On calcule l'erreur relative en norme L^2 entre la solution calculée et une solution de référence, d'après le théorème 5.1 cette erreur converge vers 0 et est de l'ordre de Δx au moins.

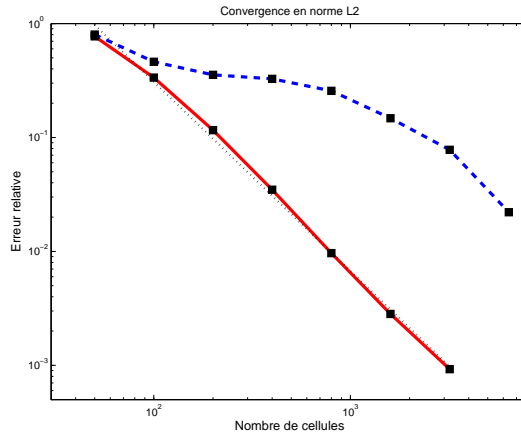


FIGURE 3. Erreur relative en norme L^2 sur une suite de maillages raffinés, pour un schéma explicite (trait plein) et pour un schéma implicite (tirets) ; la droite en pointillé est de pente -1.66 .

Les résultats de la figure 3 illustrent que la convergence est plus rapide pour un schéma explicite, l'ordre de la convergence est évalué à $5/3$. Cette différence s'explique dans le cas de la dimension 1 par le fait que l'approximation de la dérivée seconde par une formule de différence finie $(u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1})/\Delta x^2$ est d'ordre $O(\Delta x^2)$ et que pour un schéma explicite on a aussi $\Delta t = O(\Delta x^2)$; alors qu'en implicite on a seulement $\Delta t = O(\Delta x)$.

Cependant la convergence en norme L^2 pour un schéma explicite reste d'ordre supérieur à 1 également en dimension 2, tel qu'illustré par la figure 9.

Physiologiquement deux paramètres revêtent une importance particulière, la vitesse de propagation de l'onde de dépolarisation et l'*APD* (Action Potential Duration) définie comme le temps durant lequel une cellule dépolarisée reste excitée (figure 4).

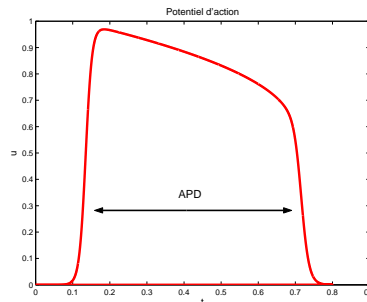


FIGURE 4. Définition de l'*APD* (Action Potential Duration).

Précisément on définit la fin de l'excitation comme l'instant où la dépolarisation tombe en dessous de 20% de son amplitude maximale.

On observe de nouveau le gain de précision du schéma explicite par rapport au schéma implicite. Notamment la convergence vers la vitesse de propagation est d'ordre 2 en explicite et d'ordre 1 en implicite.

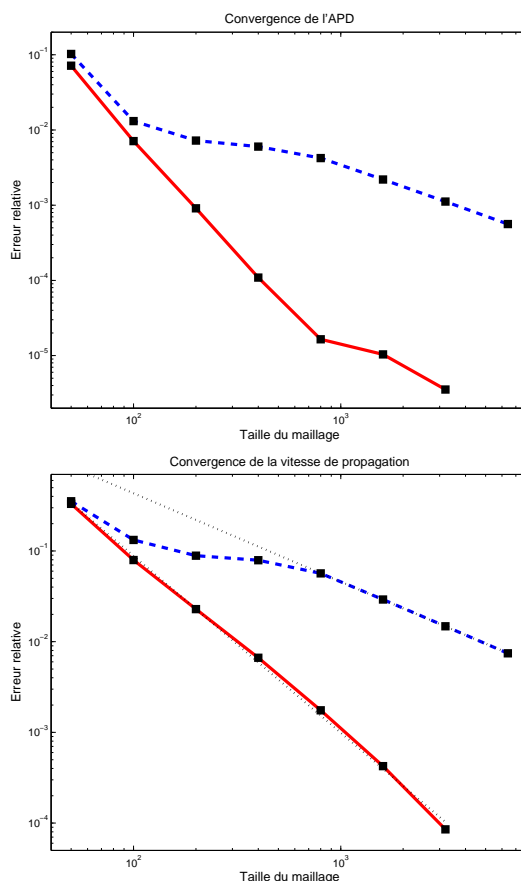


FIGURE 5. Comparaison de la convergence sur des mailles raffinés de la vitesse de propagation et de l'APD pour des schémas explicites (traits pleins) et semi implicite (tirets); à droite les lignes en pointillées figurent les droites de pente -1.95 et -0.98.

1.4. Évaluation de la vitesse et de l'APD. Deux caractéristiques de la solution *pulse* rapide de (113) (114) sont particulièrement intéressantes physiologiquement : la vitesse de propagation du *pulse* et l'APD.

On donne ici une évaluation asymptotique de ces grandeurs lorsque $\varepsilon \mapsto 0$ pour les modèles *FHN* et *AP*. On utilise pour ce faire une technique de perturbations singulières telle que développée dans [9, 10] par Britton dans un cadre très général.

On commence par la synthèses de ces asymptotiques :

pour le modèle AP ,

$$c \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{k d}{2}} (1 - 2a) \quad , \quad \begin{cases} APD \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (1 - a^2)/4a & \text{si } 0 < a \leq 0.2 \\ APD \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} -2(2a^2 + a - 1)/9a & \text{si } 0.2 \leq a < 0.5 \end{cases} \quad ,$$

et pour le modèle FHN ,

$$c \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{d}{2}} (1 - 2a) \quad , \quad APD \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^{F((2-a)/3)} \frac{dv}{k h(v) - v} \quad ,$$

où F est la cubique $F(x) = -x(1-x)(a-x)$ et où $h(v)$ est la fonction réciproque de F pour $v \in [0, F((2-a)/3)]$.

Il est à remarquer qu'il est particulièrement facile de déterminer les paramètres a et k du modèle AP pour avoir la vitesse de propagation et l' APD souhaités, le paramètre a détermine l' APD et le paramètre k la vitesse.

L'obtention de ces asymptotiques reposent sur le développement de la solution *pulse* rapide u, v de (113) (114) en puissance croissante de ε :

$$u = u_0 + u_1\varepsilon + u_2\varepsilon^2 + \dots \quad , \quad v = v_0 + v_1\varepsilon + v_2\varepsilon^2 + \dots \quad .$$

Pour un tel développement on cherche ensuite les équations satisfaites par u et v au premier ordre en ε . Comme illustré par la figure 1, u possède des fronts d'ondes raides et d'autant plus raides que $\varepsilon \ll 1$; ceci permet de découper \mathbb{R} en 5 régions mobiles, comme sur la figure 6. Dans les régions des fronts d'ondes (régions II et IV), on adopte une

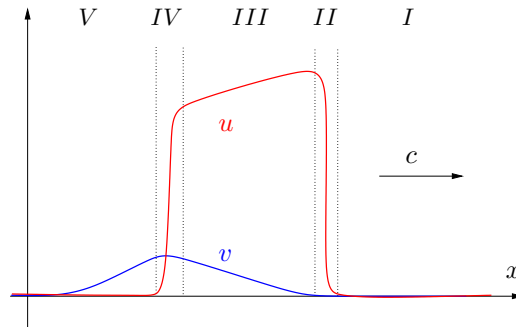


FIGURE 6. Développement asymptotique du *pulse* rapide sur \mathbb{R} .

échelle rapide $\tau = t/\varepsilon$ et $\xi = x/\varepsilon$; on a alors au premier ordre :

$$v_0 = \text{Constante} \quad , \quad \partial_\tau u_0 = d \Delta u_0 + f(u_0, v_0) \quad .$$

Cette équation sur u se réécrit comme une équation bistable générale,

$$u_0 = d \Delta u_0 - \Lambda(u_0 - A)(u_0 - B)(u_0 - C) \quad , \quad A < B < C \quad ,$$

qui possède une solution de type onde progressive de vitesse c (voir [88, 120]),

$$c = \sqrt{\frac{\Lambda d}{2}}(A - 2B + C) .$$

Dans les régions I , III , V par contre, on conserve les variables lentes x et t et l'on a au premier ordre :

$$(122) \quad f(u_0, v_0) = 0 \quad \text{et} \quad \partial_t v_0 = g(u_0, v_0) .$$

Il s'agit alors de procéder au recollement des solutions sur chacune des 5 régions. En particulier dans la région II par recollement avec la région I on a $v_0 = 0$, ce qui donne l'approximation de la vitesse de propagation du pulse.

Dans la région IV le front d'onde arrière doit se propager avec la même vitesse que le front d'onde avant ce qui détermine uniquement la valeur de $v_0 = v^{IV}$ dans cette région.

Enfin l'évaluation de l'*APD* provient de l'intégration de (122) dans la région III entre les valeurs de v_0 dans les régions II et IV : $v_0 = 0$ et $v_0 = v^{IV}$,

$$APD = \int_0^{v^{IV}} \frac{dv}{g(u, v)}, \quad f(u, v) = 0 ,$$

la seconde équation définissant implicitement v comme une fonction de u sur l'intervalle $[0, v^{IV}]$.

2. Simulations en dimension deux

La dynamique des solutions de (63) (66) en dimension 2 est tout à fait complexe. En plus des ondes progressives (*pulses*) des solutions de type ondes spirales apparaissent, ce type de solution été largement étudié (voir par exemple [119, 5, 8]), et permet la simulation de pathologies de la conduction du potentiel d'action dans le myocarde (ondes ré-entrantes) telles que la fibrillation.

On présente d'abord en 2.1 l'analyse de l'application des schémas volumes finis classiques à un cas test de propagation du potentiel d'action sur une géométrie circulaire, puis on donne en 2.2 un exemple de genèse d'ondes spirales.

2.1. Propagation du potentiel d'action sur une géométrie circulaire. On considère les équations (63) (66) sur le disque unité, pour une condition initiale (u_0, v_0) où $v_0 = 0$ et où u_0 est la fonction caractéristique du disque de centre 0 et de rayon 0.1 (figure 7).

Les fibres sont formées des cercles centrés en 0 de sorte que le problème est à géométrie radiale ; on s'attachera en particulier à l'obtention de fronts d'ondes de dépolarisation circulaires.

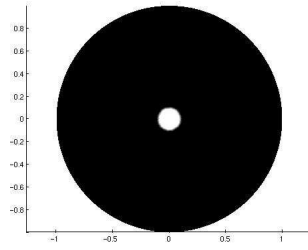


FIGURE 7. Initiation de l'excitation.

On considère une discrétisation de ce problème sur un maillage triangulaire du disque unité. Au vu de l'examen du cas de la dimension 1 on utilisera un schéma d'intégration en temps Euler explicite.

2.1.1. *Cas isotrope.* Dans le cas isotrope on complète la définition des maillages du disque unité en définissant les centres des cellules triangulaires (définis en section 3) comme placés au centre du cercle circonscrit à ces cellules, et les centres des interfaces comme leurs milieux.

On étudie alors la convergence du schéma volumes finis sur une suite de maillages de plus en plus fins, approximativement de 700 à 90000 cellules, le maillage le plus fin fournissant la solution de référence (figure 8).

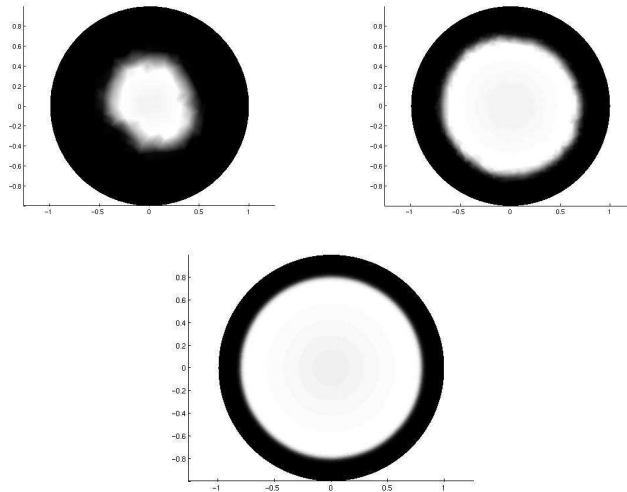


FIGURE 8. Comparaison de la propagation du potentiel d'action simulé sur des maillages de finesse croissante : à gauche 700 cellules, au centre 3000 cellules à droite maillage de référence à 88000 cellules.

Comme dans le cas de la dimension 1, le premier effet de la discrétisation en espace est de ralentir la propagation de l'onde de dépolarisation. En

outre il apparaît que le recours à des maillages trop grossiers affecte sensiblement la géométrie du front d'onde qui doit être circulaire.

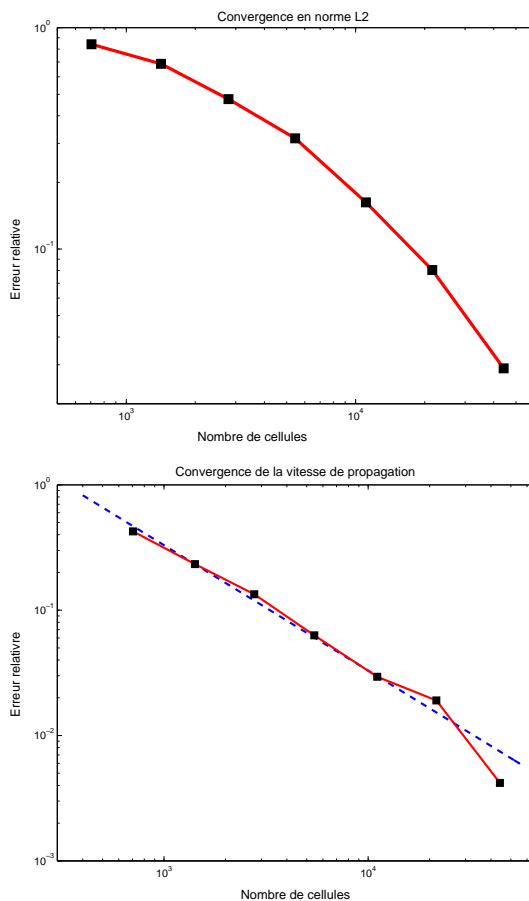


FIGURE 9. Convergence en norme L^2 (à gauche) et convergence de la vitesse de propagation (à droite) sur une suite de maillages raffinés ; la droite en pointillée à droite est de pente -0.95 .

Cette constatation *de visu* sur la vitesse de propagation est confortée par une analyse de la convergence de la vitesse de propagation (figure 9) ; cette convergence est d'ordre évalué égal à 1 par rapport au nombre de cellules du maillage, soit d'ordre $1/2$ par rapport à la taille du maillage (le diamètre des cellules).

La convergence en norme L^2 (figure 9) est d'ordre au moins 1.5 par rapport au nombre de cellules, cependant il faudrait recourir à des maillages encore plus fins pour évaluer correctement l'ordre de cette convergence.

2.1.2. *Cas anisotrope.* On considère maintenant les équations (63) (66) dans le cas d'une conductivité électrique anisotrope, i.e. $\sigma \neq \lambda I_d$. On considère un tenseur de conductivité non constant, défini relativement aux directions des fibres du tissu de conduction données par les cercles

centrés en 0 : au point x le tenseur $\sigma(x)$ est égal à la matrice diagonale $\sigma(x) = \text{diag}(\lambda_l, \lambda_t)$ dans une base formée de deux vecteurs unitaires, l'un tangent et l'autre normal à la fibre au point x . Les coefficients λ_l et λ_t sont les conductivités longitudinales et transverses à la fibre, ils sont supposés constants et pris dans un rapport d'anisotropie de 1/5 : $\lambda_l = 5\lambda_t$.

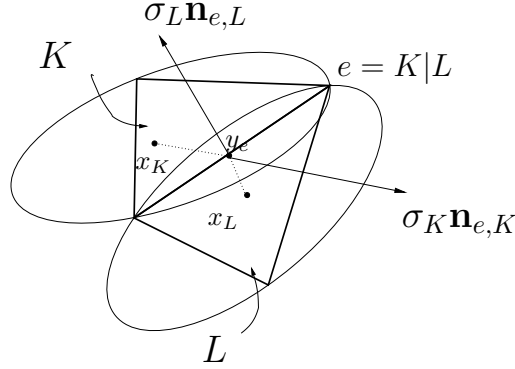


FIGURE 10. Définition des centres des cellules et des interfaces du maillage dans le cas anisotrope : la cellule K est inscrite dans un cercle pour la métrique σ_K^{-1} de centre x_K .

Sur un maillage triangulaire \mathcal{T} du cercle unité on définit sur chaque cellules $K \in \mathcal{T}$ le tenseur de conductivité discret σ_K , par exemple comme étant égal au tenseur $\sigma(x)$ évalué au centre de gravité de K . Pour compléter la définition du maillage \mathcal{T} on doit encore définir les centres x_K des cellules $K \in \mathcal{T}$ et les centres y_e des interfaces $e \in \mathcal{S}$ du maillage. On rappelle que ces centres doivent être placés de telle façon que, pour une interface $e \in \mathcal{S}$ séparant deux cellules K et L , $e = K|L$, on doit avoir d'une part que $x_K \vec{y}_e$ et $\sigma_K \mathbf{n}$ sont colinéaires et d'autre part que $x_L \vec{y}_e$ et $\sigma_L \mathbf{n}$ sont également colinéaires ; \mathbf{n} désignant un vecteur normal à l'interface e .

On définit le centre y_e de l'interface e comme étant son milieu et le centre de la cellule K comme étant le centre du cercle circonscrit à K pour la métrique associée au tenseur σ_K^{-1} (voir figure 10), ce cercle est une ellipse dans le plan euclidien.

Les simulations numériques réalisées sur ce type de maillage (figure 11) montrent un très net effet de maillage sur la géométrie du front d'onde. Ces effets sont particulièrement marqués sur les maillages les moins fins, leur suppression nécessite soit l'utilisation de maillages très fins, soit le recours à des maillages adaptés au tenseur d'anisotropie σ , c'est à dire tels que la cellule K soit proche d'un triangle équilatéral pour la métrique σ_K^{-1} .

Par ailleurs l'effet de ralentissement de la vitesse de propagation sur les maillages les moins fins est également particulièrement marqué,

sur la figure 11, quand pour le maillage à 11000 cellules le domaine est pratiquement entièrement repolarisé, sur le maillage de 1500 cellules l'onde de dépolarisation n'a pas encore atteint le bord du domaine.

Enfin le coût en temps de calcul est largement plus élevé dans le cas anisotrope que dans le cas isotrope. Cette augmentation du coût en temps est due au comportement de la constante de stabilité C relative au maillage et intervenant dans la condition de stabilité (95) définie comme :

$$C = \sup_{K \in \mathcal{T}} \frac{\varepsilon}{m(K)} \sum_{e \in \delta K^*} \tau_e .$$

Cette constante n'a pas un comportement linéaire lorsque l'on augmente un des paramètres de conduction en laissant l'autre fixe, elle croît subitement pour certaines valeurs. Ce comportement (voir figure 12) s'explique par le fait que l'on ne contrôle pas le placement des centres x_K et y_e , et que pour certaines valeurs du rapport d'anisotropie deux cellules voisines K et L sont proches pour les métriques σ_K^{-1} et σ_L^{-1} respectivement de triangles rectangles adossés par leurs hypoténuses, ce qui entraîne $\tau_e \mapsto +\infty$.

Ce caractère incontrôlable de la constante de stabilité C sur des maillages donnés incitent à utiliser des maillages adaptés au tenseur de conductivité. En dimension 2 la construction de tels maillages est notamment décrite dans [12] et rendue possible par l'utilisation de certains mailleurs (par exemple le logiciel BAMG¹).

Cependant le recours à ce genre de mailleurs n'est pas envisageable sur des cas réalistes de coeur en trois dimension pour lesquels le tenseur de conductivité est donné par des mesures physiques de la direction des fibres. D'autre part si le modèle mondomaine prend en compte un unique tenseur de conductivité, le modèle bidomaine (plus réaliste) en utilise deux sur un même domaine, cette technique d'adaptation de maillage ne permettant de gérer qu'un seul tenseur de conductivité ne convient pas pour la résolution numérique du modèle bidomaine.

2.2. Simulation d'ondes spirales. Certaines pathologies du rythme cardiaque sont associées à des troubles de la propagation du potentiel d'action dans le myocarde. En particulier une classe d'arythmies dites *ré-entrantes* sont associées à la propagation d'une onde ré-entrante dans le muscle cardiaque (voir par exemple [70]).

Les principales arythmies ré-entrantes sont la *tachycardie* et la *fibrillation* qui peuvent être de nature atriales (ayant lieu dans les oreillettes) ou ventriculaires ; dans ce dernier cas elles sont fatales.

La tachycardie est expliquée par l'existence d'une onde ré-entrante spiralant sur la surface de l'oreillette ou dans le muscle ventriculaire. L'origine de la fibrillation ventriculaire n'est pas encore clairement

1. Bi Dimensional Anisotropic Mesh Generator, INRIA,
<http://www-rocq.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg/eng.htm>.

établie. Une hypothèse serait l'existence de plusieurs ondes ré-entrantes spiralant dans le muscle ventriculaire.

L'importance de la compréhension de la génèse et de la dynamique des ondes ré-entrantes a motivé de nombreux travaux de modélisation, parmi lesquels [119, 94, 97, 5, 95, 8].

L'hypothèse selon laquelle la fibrillation ventriculaire serait causée par plusieurs ondes ré-entrantes et l'origine de la présence de ces ondes ré-entrantes a notamment été étudiée par Keener et Panfilov dans [94, 97, 95] qui ont montré numériquement comment une onde spirale simple pouvait dégénérer en un grand nombre d'ondes spirales (*spiral breakup*) évoluant de façon chaotique.

L'évolution sur un long terme d'ondes spirales simples et stables, ainsi que la topologie du parcours de leur centre a été étudiée dans [119, 8].

On simule ici la propagation d'ondes spirales dans un milieu homogène et isotrope. On utilise le modèle monodomaine (63) (66) pour un modèle de courant ionique du type *AP* (62).

Pour générer une onde spirale on utilise une propriété des tissus musculaires qui est de ne pas pouvoir être excité de nouveau sitôt après leur dépolarisation. On stimule ainsi une zone située immédiatement à l'arrière de l'onde de dépolarisation (figure 13). Cette zone stimulée donne naissance à une onde qui ne peut pas se propager dans toutes les directions dans la mesure où à l'arrière de l'onde de dépolarisation les tissus sont réfractaires à l'excitation. Cette propagation dissymétrique de l'onde ainsi stimulée implique sa mise en rotation.

Une fois mise en rotation l'onde s'installe dans un régime stable et spirale sans quitter le domaine (figure 14).

3. Simulation en dimension trois

On simule la propagation du potentiel d'action sur un modèle réaliste de coeur dont la géométrie est définie par le maillage tétraédrique illustré en figure 15 ; ce maillage a été conçu à partir de données issues de l'imagerie médicale par Pagès *et al.* dans [93].

3.1. Définition du maillage. Afin de compléter la définition du maillage \mathcal{T} du coeur défini en section 3.1 il convient de définir les centres $(x_K)_{K \in \mathcal{T}}$ des cellules $K \in \mathcal{T}$ ainsi que les centres $(y_e)_{e \in \mathcal{S}}$ des interfaces $e \in \mathcal{S}$.

Cette définition est problématique en dimension 3. Pour s'en rendre compte considérons deux cellules (tétraédrales) voisines $K, L \in \mathcal{T}$ séparées par l'interface (triangulaire) $e = K|L$. Si les tenseurs de conductivité sur K et L sont donnés par σ_K et σ_L , les centres x_K, x_L et y_e de K, L et e doivent être tels que $x_K - y_e$ est colinéaire à $\sigma_K \mathbf{n}$ et $x_L - y_e$ est colinéaire à $\sigma_L \mathbf{n}$, où \mathbf{n} est un vecteur normal à l'interface e . Définissons x_K (*resp.* x_L) le centre de la cellule K (*resp.* L) comme le centre de la sphère circonscrite à K (*resp.* L) relativement à la métrique

induite par σ_K^{-1} (*resp.* σ_L^{-1}); cette sphère est un ellipsoïde dans l'espace euclidien. Alors, pour que $x_K - y_e$ soit colinéaire à $\sigma_K \mathbf{n}$, y_e doit être égal au centre $y_{e,K}$ du cercle circonscrit à e pour la métrique associée à σ_K^{-1} . Mais de la même façon y_e doit être égal au centre $y_{e,L}$ du cercle circonscrit à e pour la métrique associée à σ_L^{-1} . Or en général, excepté dans le cas de tenseurs isotropes, $y_{e,K} \neq y_{e,L}$.

Dans le cas anisotrope une possibilité est de définir les centres des interfaces comme $y_e = (y_{e,K} + y_{e,L})/2$. En faisant ainsi on commet une erreur sur la direction dans laquelle on doit évaluer les flux sur l'interface e ; cependant dans le cas où les tenseurs de conductivités sont de régularité suffisante (de classe C^1), cette erreur reste du même ordre que l'erreur de consistance sur l'approximation des flux numériques par la formule (81).

Dans le cas particulier où le tenseur de conductivité est isotrope, mais non constant ni continu, il est alors possible de définir rigoureusement les centres des cellules (*resp.* des interfaces) comme les centres des sphères (*resp.* des cercles) circonscrites à ces cellules (*resp.* interfaces) pour la métrique euclidienne.

3.2. Résultats numériques. Dans le maillage de coeur illustré en figure 15 plusieurs zones physiologiquement différenciées sont identifiées : le noeud sinusal, les oreillettes, les ventricules, un anneau isolant séparant les oreillettes des ventricules et un faisceau de conduction rapide. Le faisceau rapide est composée du noeud atrio ventriculaire, assurant la liaison électrique entre les oreillettes et les ventricules, ainsi que le faisceau de Hiss et les fibres de Purkinje qui conduisent le potentiel d'action depuis le noeud atrio ventriculaire vers la partie inférieure des cavités ventriculaires le long du septum.

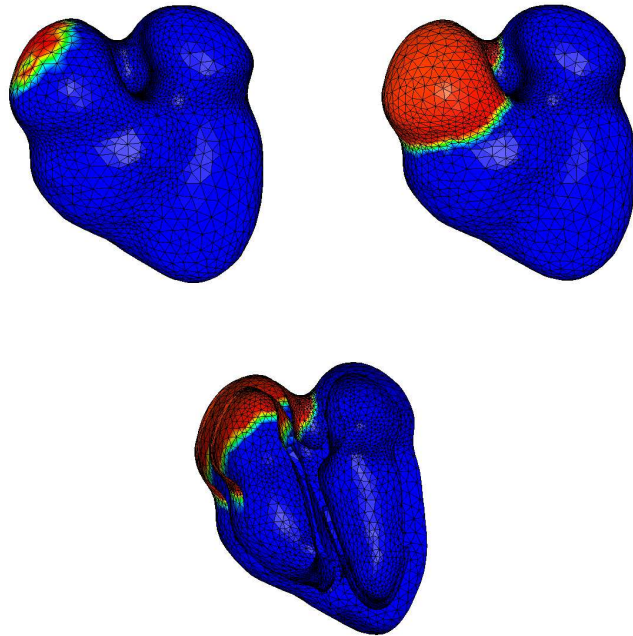
On considérera le muscle cardiaque comme un milieu isotrope mais non homogène, les conductivités électriques étant différentes selon les zones physiologiques mentionnées ci dessus (voir table 2)

	conductivité
noeud sinusal	0.02
oreillettes	1.0
anneau isolant	0.0
faisceau rapide	5.0
ventricules	0.8

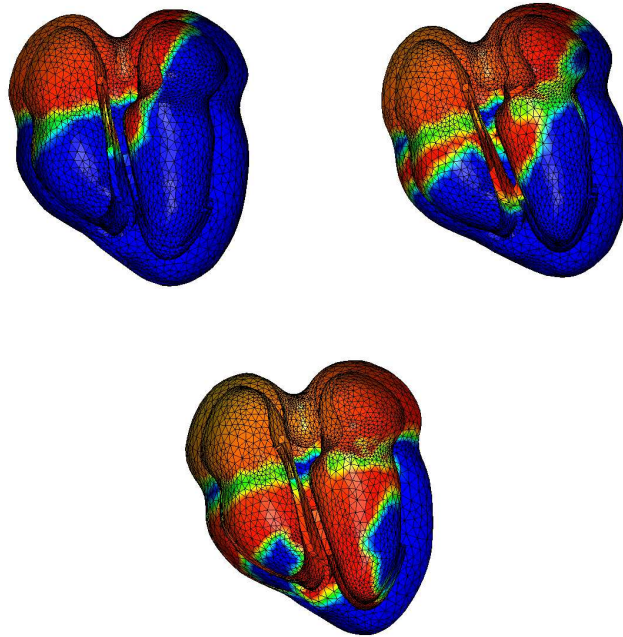
TABLE 2. conductivités électriques dans les différentes régions du coeur.

Ces conductivités (adimensionnées) caractérisent les différences d'ordres de grandeurs de la vitesse de propagation du potentiel d'action à travers les diverses régions du coeur identifiées.

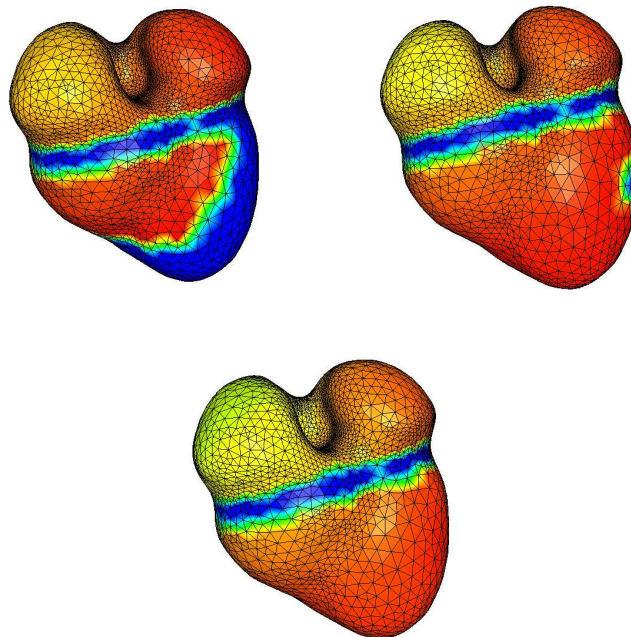
On initie la propagation du potentiel d'action en excitant les cellules du noeud sinusal situé sur la surface de l'oreillette droite. L'onde de dépolarisation se propage alors dans l'oreillette droite.



La région annulaire séparant les oreillettes des ventricules étant isolante l'onde de dépolarisation est bloquée au bas des oreillettes jusqu'à atteindre le noeud atrio ventriculaire, l'onde de dépolarisation se propage alors en empruntant le faisceau rapide jusqu'au bas des cavités ventriculaires.



Depuis la périphérie du faisceau rapide et depuis la partie inférieure de la cavité ventriculaire l'onde se propage dans l'ensemble des muscles ventriculaires.



4. Conclusion

Les résultats théoriques concernant les schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles introduits dans le chapitre 5 ont été vérifiés dans la pratique. Notamment les critères de stabilité (94) (95) sont effectifs et le critère de stabilité (95) est optimal. Les résultats de convergence en norme L^2 du théorème 5.1 sont également vérifiés par la pratique ainsi que la convergence vers la vitesse de propagation de l'onde de dépolarisation et de l'*APD* qui sont deux paramètres d'importance physiologique capitale.

Il apparaît cependant que la gestion de l'anisotropie n'est pas aisée par ce type de schémas. En dimension 2 le recours à des maillages adaptés à l'anisotropie est nécessaire afin de contrôler la contrainte de stabilité sur le pas de temps. En dimension 3 seule une construction approchée des centres des cellules et des interfaces est disponible ce qui induit une erreur de consistance supplémentaire sur l'approximation des flux. D'autre part le recours à des maillages adaptés est peu compatible avec la nécessité de recourir à des maillages réalistes issus de mesures physiques (en particulier de la direction des fibres musculaires) par nature difficiles à modifier.

Enfin il semble peu naturel d'utiliser ce type de schémas dès lors que l'on doit traiter simultanément plusieurs tenseurs d'anisotropie sur un même maillage, comme c'est le cas pour le modèle plus réaliste *bido-main* de l'activité électrique cardiaque.

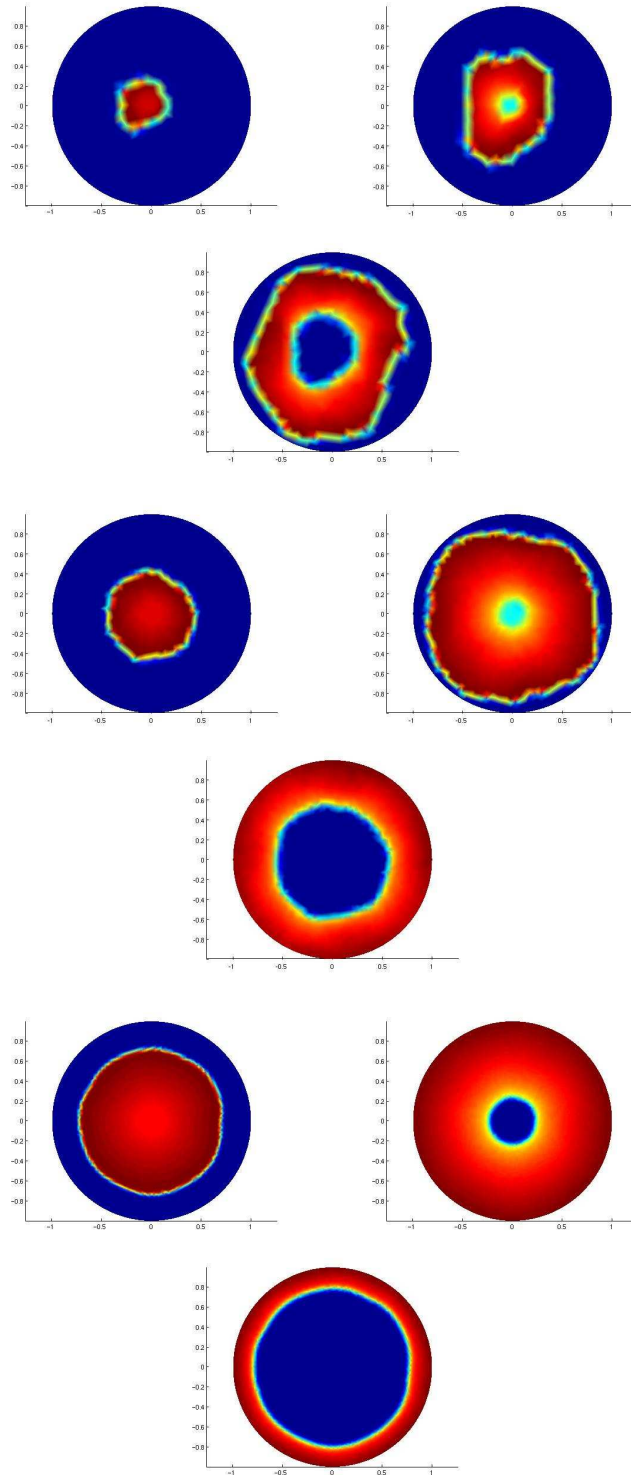


FIGURE 11. Propagation du potentiel d'action (de gauche à droite) dans le cas anisotrope, sur des mail-
lages de 1500 cellules (en haut), de 3000 cellules et de
11000 cellules (en bas).

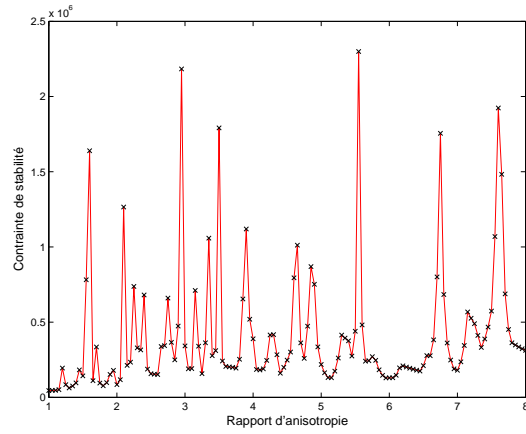


FIGURE 12. Comportement de la constante de stabilité C sur un maillage fixe pour $\lambda_t = 1$ et lorsque le paramètre de conductivité longitudinal λ_l variant de 1 et 6.

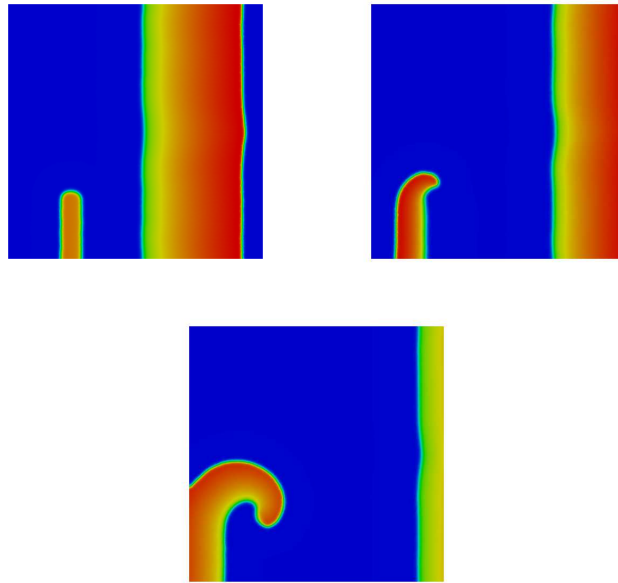


FIGURE 13. Initiation de la propagation d'une onde spirale

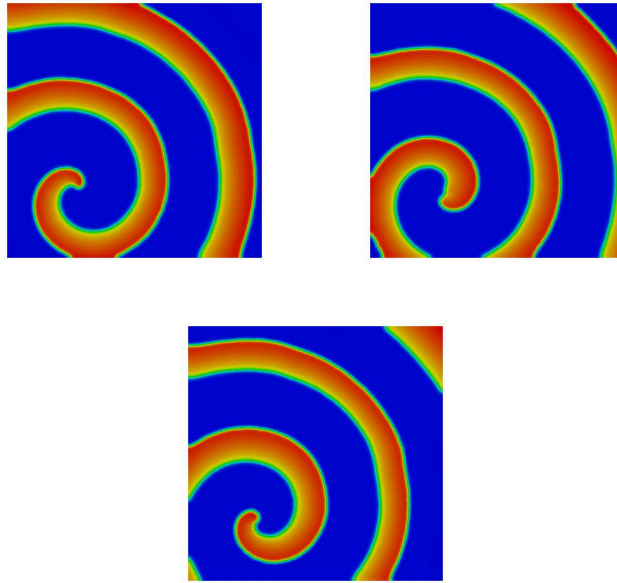


FIGURE 14. Onde spirale stabilisée

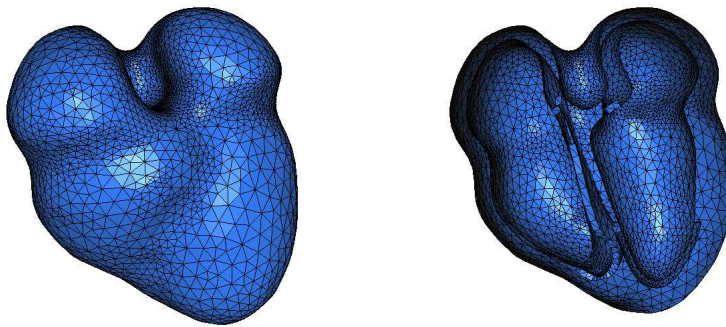


FIGURE 15. Maillage tridimensionnel du coeur.

Equations paraboliques semi linéaires

1. Introduction

L'objectif de ce chapitre est d'étudier les propriétés de base des solutions du modèle monodomaine (63) (66) : existence, unicité et régularité.

On étudiera ces propriétés en se plaçant dans le cadre de la théorie des équations semi linéaires et des *semi groupes*, le but n'étant pas l'étude même de ces concepts, on se contentera d'énoncer les résultats de la théorie classique des *semi groupes analytiques* en vue de les exploiter pratiquement.

1.1. Positionnement du problème. Sur un espace de Banach X , qui sera en pratique un espace de fonctions, on considère le problème de Cauchy :

$$(123) \quad \frac{du}{dt} + Au = F(u) \quad , \quad u(0) = u_0 \in X \quad ,$$

où $A : D(A) \subset X \mapsto X$ est un opérateur linéaire non borné sur X (voir par exemple [100, 11]) et où le terme non linéaire $F(u)$ est défini à partir d'une fonction numérique F . Par exemple pour $X = L^2(\Omega)$, $F : x \in \mathbb{C} \mapsto x^3$ on veut résoudre $du/dt + Au = F(u) = u^3$.

On fera l'hypothèse que, en tant que fonction numérique, F est localement Lipschitzienne.

Une difficulté majeure pour la résolution de (123) est qu'en général la fonction F n'est pas définie sur X tout entier. Par exemple pour $X = L^2(0, 1)$ et $F : x \in \mathbb{C} \mapsto x^3$, pour $u \in L^2(0, 1)$ on n'a pas en général $F(u) = u^3 \in L^2(0, 1)$.

1.2. Equation sans second membre. Un préalable à la résolution de (123) est l'étude du système linéaire homogène associé,

$$(124) \quad \frac{du}{dt} + Au = 0 \quad , \quad u(0) = u_0 \in X \quad .$$

On abordera ce problème dans le cadre de la théorie des *semi groupes* (voir par exemple [101, 58, 42, 81]) :

DÉFINITION 1.1 (Semi groupes, générateur infinitésimal). *Une famille d'opérateurs linéaires bornés $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ sur un espace de Banach X forme un semi groupe analytique si :*

- $S(0) = I$ (l'identité sur X),

- $\forall s, t \geq 0, S(s)S(t) = S(s+t),$
- $\forall u \in X, \text{ l'application } t \in [0, +\infty) \mapsto S(t)u \in X \text{ est continue.}$
- $\text{l'application } t \in (0, +\infty) \mapsto S(t)u \text{ est réelle analytique pour tout } u \in X$

A un semi groupe analytique $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ est associé un opérateur non borné $L : D(L) \subset X \mapsto X$ (voir [102, 101]) que l'on nomme le générateur infinitésimal de $\{S(t)\}_{t \geq 0}$ et définit par :

(125)

$$D(L) = \left\{ u \in X, \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h}(S(t)u - u) \text{ existe} \right\}, \quad Lu = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{1}{h}(S(t)u - u).$$

Les générateurs infinitésiaux des semi groupes analytiques sont caractérisés par le théorème de Hille Yosida Philips (voir [101, 58]) en partie énoncé en 2.2.

Si $-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi groupe analytique $\{S(t)\}_{t \geq 0}$, alors le problème de Cauchy

$$(126) \quad \frac{d}{dt}u + Au = 0 \quad , \quad u(0) = u_0 \in X,$$

se résout alors simplement et a une unique solution définie pour tout temps $t \geq 0$:

$$u(t) = S(t)u_0,$$

dans le sens où $u : [0, T) \mapsto X$ est une solution de (126) si u est continue sur $[0, T)$ et vérifie $u(0) = u_0$, u est dérivable sur $(0, T)$ (au sens de la dérivé de Frechet sur X), $u(t) \in D(A)$ pour $t \in [0, T)$ et sur $(0, T)$ on a l'égalité $\frac{du}{dt}(u) + Au(t) = 0$.

1.3. Equation avec second membre. Supposons que l'opérateur non borné $-A : D(A) \subset X \mapsto X$ soit le générateur infinitésimal d'un semi groupe analytique que l'on note dès à présent $\{e^{-At}\}_{t \geq 0}$.

On peut résoudre simplement le problème (123) en faisant des hypothèses fortes sur le terme non linéaire F .

Par exemple (voir [110]), on a le résultat suivant :

THÉORÈME 1.1. *Avec les hypothèses ci dessus, si le terme de réaction F vérifie :*

- F est défini sur X tout entier,
- $F : X \mapsto X$ est localement Lipschitzienne,

alors (123) a une solution unique $t \in [0, T) \mapsto u(t) \in X$ quelle que soit la condition initiale u_0 , définie sur un intervalle de temps $[0, T)$, $T = T(u_0) > 0$.

Ces hypothèses ne cadrent cependant pas avec le problème (63) (66) pour des termes de réaction de type Fitzhugh Nagumo (61) (62), qui sont simplement localement Lipschitz en tant que fonction numérique définies sur \mathbb{C}^2 , et qui ne permettent pas de définir $F : u \in X \mapsto F(u) \in X$ sur X tout entier.

L'idée pour contourner cette difficulté est de construire des espaces *intermédiaires* entre X et $D(A)$ – ayant de bonnes propriétés vis à vis de A – sur lesquels le terme non linéaire $u \mapsto F(u)$ soit bien défini et de résoudre (123) pour une condition initiale dans ces espaces.

Par exemple, si Ω est un ouvert de \mathbb{R}^d on a l'injection continue (injection de Sobolev) :

$$W^{\alpha,p}(\Omega) \subset L^\infty(\Omega) ,$$

lorsque $d/p < \alpha$. Ainsi si $F : x \in \mathbb{C} \mapsto F(x) \in \mathbb{C}$ est localement Lipschitzienne, F peut s'étendre à une fonction $F : u \in W^{\alpha,p}(\Omega) \mapsto F(u) \in L^p(\Omega)$ également localement Lipschitzienne.

Le cadre pour cela est la théorie des *opérateurs sectoriels* et des *espaces fractionnaires* qui leurs sont associés, tels que développée dans [58, 81].

On présentera dans les deux sections suivantes 2 et 3 les concepts *d'opérateurs sectoriels* et des *espaces fractionnaires* qui leurs sont associés, en vue de les appliquer au modèle monodomaine pour établir l'existence locale en temps et l'unicité de ses solutions en 4 et d'étudier leur régularité en 5.

2. Opérateurs sectoriels

On se donne un espace de Banach complexe X sur lequel la norme sera notée $\| \cdot \|_X$ et sur l'espace $\mathcal{L}(X)$ des opérateurs bornés sur X on notera pareillement la norme associée :

$$\forall B \in \mathcal{L}(X) : \|B\|_X = \sup_{u \in X, \|u\|_X=1} \|Bu\|_X .$$

Pour un opérateur non borné $A : D(A) \subset X \mapsto X$, que l'on suppose dense et fermé, on notera $\rho(A)$ l'ensemble résolvant de A , défini comme le sous ensemble $\rho(A) \subset \mathbb{C}$ de tous les $\lambda \in \mathbb{C}$ tels que $\lambda I - A : D(A) \mapsto X$ soit un opérateur bijectif dont l'inverse $(\lambda I - A)^{-1} \in \mathcal{L}(X)$ est borné.

On notera aussi $\sigma(A) = \mathbb{C} - \rho(A)$ le spectre de A .

DÉFINITION 2.1 (Opérateurs sectoriels). *Un opérateur non borné $A : D(A) \mapsto X$ sera dit sectoriel si A est dense et fermé et s'il existe un secteur $S_{\omega,\theta} \subset \mathbb{C}$ dans le plan complexe de point de base $\omega \in \mathbb{R}$ et de demi angle d'ouverture $\theta < \frac{\pi}{2}$,*

$$S_{\omega,\theta} = \{ \lambda \in \mathbb{C} : |\arg(\lambda - \omega)| < \theta \} \cup \{ \omega \} ,$$

tel que :

$$\mathbb{C} - S_{\omega,\theta} \subset \rho(A) \\ \forall \lambda \in \mathbb{C} - S_{\omega,\theta} , \quad \|(\lambda I - A)^{-1}\|_X \leq \frac{M}{|\lambda - \omega|}$$

On utilisera le fait qu'un opérateur autoadjoint sur un espace de Hilbert est un opérateur sectoriel.

On utilisera également le fait que si A_1 et A_2 sont des opérateurs sectoriels sur les espaces de Banach X_1 et X_2 , alors l'opérateur produit $A_1 \times A_2$ sur l'espace produit $X_1 \times X_2$ est sectoriel (avec $A_1 \times A_2(u_1, u_2) = (A_1 u_1, A_2 u_2)$ pour $u_i \in D(A_i)$, $i = 1, 2$).

REMARQUE 2.1. On rappelle qu'avec les hypothèses :

- $X = L^2(\Omega)$ pour un ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ de frontière $\partial\Omega$ C^2 -régulière,
- si le tenseur de conductivité $\sigma : \bar{\Omega} \mapsto \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ est de régularité C^1 , est en chaque point symétrique défini positif et s'il existe deux réels $\alpha, \beta > 0$ tels que pour tout $x \in \Omega$ on ait

$$\forall \xi, \xi' \in \mathbb{R}^d : \quad {}^T \xi \sigma(x) \xi \geq \alpha |\xi|^2, \quad |{}^T \xi \sigma(x) \xi'| \leq \beta |\xi| |\xi'|,$$

alors l'opérateur de diffusion $A = -\operatorname{div}(\sigma \nabla \cdot)$ pour une condition limite Neumann homogène (65) : $D(A) = \{u \in H^2(\Omega), \quad \sigma \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$ est un opérateur autoadjoint.

Les opérateurs sectoriels correspondent aux générateurs infinitésimaux des semi groupes analytiques (théorème de Hille Yosida Philips voir [101, 58, 81]), on en retiendra les propriétés suivantes :

THÉORÈME 2.1. Si $A : D(A) \mapsto X$ est un opérateur sectoriel, alors $-A$ est le générateur infinitésimal d'un semi groupe analytique $(e^{-At})_{t \geq 0}$ qui vérifie :

$$(127) \quad \|e^{-At}\|_X \leq M e^{-\omega t} \quad \text{et} \quad \|A e^{-At}\|_X \leq \frac{M}{t} e^{-\omega t},$$

où $\omega \in \mathbb{R}$ est le point de base du secteur $S_{\omega, \theta}$ associé à A dans la définition 2.1.

De plus si $u \in D(A)$ alors on a :

$$(128) \quad \|e^{-At}u - u\|_X \leq M t \|Au\|_X.$$

Ce théorème permet de résoudre l'équation linéaire homogène (124) pour un opérateur sectoriel, il permet également de résoudre l'équation linéaire non homogène :

$$(129) \quad \frac{d}{dt}u + Au = f(t) \quad , \quad u(0) = u_0 \in X,$$

dont les solutions sont définies comme suit :

DÉFINITION 2.2 (Solutions pour l'équation (129)). Une solution pour (129) est une fonction $u : [0, T) \mapsto X$

- continue sur $[0, T)$ et vérifiant $u(0) = u_0$,
- dérivable sur $(0, T)$ au sens de la dérivée de Fréchet sur X ,
- $u(t) \in D(A)$ pour tout $t \in (0, T)$ et (129) est vérifiée sur $(0, T)$.

On a le théorème suivant :

THÉORÈME 2.2. Soit $A : D(A) \mapsto X$ un opérateur sectoriel. Si $f : (0, T) \mapsto X$ est Hölder continue sur $(0, T)$ et est continue en 0, alors la fonction

$$F(t) = \int_0^t e^{-A(t-s)} f(s) ds ,$$

est continue sur $[0, T)$, continûment dérivable sur $(0, T)$ et vérifie $\lim_{t \rightarrow 0^+} F(t) = 0$.

Pour $t \in (0, T)$ on a $F(t) \in D(A)$ et :

$$\frac{dF}{dt}(t) + AF(t) = f(t) .$$

Le problème de Cauchy (129) a une unique solution donnée par :

$$u(t) = e^{-At} u_0 + \int_0^t e^{-A(t-s)} f(s) ds .$$

Ce théorème met en évidence les spécificités de la résolution des EDP par rapport aux EDO, l'EDO sur \mathbb{R}^n $dy/dt + ay = f(t)$ est en effet résoluble sous des hypothèses bien moins strictes sur f , par exemple L^1_{loc} .

REMARQUE 2.2 (Cas autoadjoint). La définition générale de l'exponentielle $\exp(-At)$ pour A sectoriel est assez délicate. Par contre dans le cas où A est autoadjoint cette expression est grandement simplifiée en utilisant le théorème spectral. Par exemple dans le cas où $A = -\operatorname{div}(\sigma \nabla \cdot)$ avec les hypothèses de la remarque 2.1 sur un domaine borné alors il existe une base hilbertienne $(\phi_n)_{n \geq 0}$ de X formée de vecteurs propres pour A et associée aux valeurs propres $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} +\infty$. A et e^{-At} sont alors donnés par :

$$\forall u \in D(A) = \left\{ u \in X, \sum_{n \geq 0} \lambda_n^2 |(u, \phi_n)|^2 < +\infty \right\} : Au = \sum_{n \geq 0} \lambda_n (u, \phi_n) \phi_n ,$$

$$\forall u \in X : e^{-At} u = \sum_{n \geq 0} e^{-\lambda_n t} (u, \phi_n) \phi_n .$$

3. Espaces fractionnaires

Soit A un opérateur sectoriel. On suppose que dans la définition 2.1 de A on puisse prendre $\omega > 0$, ce que l'on notera $\operatorname{Re}(\sigma(A)) > 0$. Alors l'inégalité (127) motive la définition suivante :

DÉFINITION 3.1 (Puissances d'un opérateur sectoriel). Pour un opérateur A vérifiant $\operatorname{Re}(\sigma(A)) > 0$ on pose pour $\alpha > 0$:

$$(130) \quad A^{-\alpha} = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^{+\infty} t^{\alpha-1} e^{-At} dt ,$$

où Γ désigne la fonction Gamma.

L'opérateur $A^{-\alpha}$ ainsi défini est borné et injectif.

On définit ainsi pour $\alpha > 0$ l'opérateur non borné $A^\alpha = (A^{-\alpha})^{-1}$ ayant pour domaine l'image de $A^{-\alpha}$, en particulier $A^1 = A$, on notera $A^0 = I$.

Avec cette définition on définit les espaces fractionnaire X^α associés à un opérateur sectoriel A :

DÉFINITION 3.2 (Espaces Fractionnaires). *Soit $A : D(A) \mapsto X$ un opérateur sectoriel. Il existe alors un réel $a > 0$ tel que l'opérateur (sectoriel) $A_1 = A + aI$ vérifie $\text{Re}(\sigma(A_1)) > 0$. On définit alors pour $\alpha \geq 0$:*

$$(131) \quad X^\alpha = D(A_1^\alpha) \quad \text{et} \quad \|u\|_{X^\alpha} = \|A_1^\alpha u\|_X \quad \text{sur } X^\alpha .$$

Cette définition est cohérente dans le sens où un choix différent pour A_1 définirait le même espace X^α et une norme $\|\cdot\|_{X^\alpha}$ équivalente. Dans le cas $\alpha = 1$ la norme sur $X^1 = D(A)$ correspond à la norme du graphe.

On a en particulier $X^0 = X$ et $X^1 = D(A)$ pour la norme du graphe sur $D(A)$.

De manière générale, pour tout $\alpha \geq 0$, X^α est un espace de Banach et si $\alpha \geq \beta \geq 0$:

$$X^\alpha \subset X^\beta ,$$

et l'injection est continue et dense.

Sur les espaces fractionnaires X^α les propriétés (127) (128) de l'exponentielle de A s'étendent : pour $\alpha \geq 0$, il existe une constante positive $M_\alpha < +\infty$ telle que

$$(132) \quad \|A_1^\alpha e^{-At}\|_X \leq M_\alpha t^{-\alpha} e^{at} ,$$

et pour $0 < \alpha \leq 1$,

$$(133) \quad \forall u \in X^\alpha , \quad \|e^{-At}u - u\|_X \leq \frac{M_{1-\alpha}}{\alpha} t^\alpha e^{at} \|u\|_{X^\alpha} ,$$

où a est tel que $A_1 = A + aI$ vérifie $\text{Re}(\sigma(A_1)) > 0$.

REMARQUE 3.1 (Cas autoadjoint). *De nouveau la définition des espaces fractionnaires est grandement simplifiée dans le cas autoadjoint en utilisant le théorème spectral. Reprenant l'exemple $A = -\text{div}(\sigma \nabla \cdot)$ avec les hypothèses et notations de la remarque 2.2. Alors X^α et A^α sont donnés par :*

$$\forall u \in X^\alpha = \left\{ u \in X, \sum_{n \geq 0} \lambda_n^{2\alpha} |(u, \phi_n)|^2 < +\infty \right\} : \quad A^\alpha u = \sum_{n \geq 0} \lambda_n^\alpha (u, \phi_n) \phi_n ,$$

et la norme $\|\cdot\|_{X^\alpha}$ sur X^α est définie par :

$$\forall u \in X^\alpha , \quad \|u\|_{X^\alpha}^2 = \sum_{n \geq 0} (\lambda_n + 1)^{2\alpha} |(u, \phi_n)|^2$$

Tels que définis, les espaces fractionnaires sont difficiles à caractériser. On utilisera le lemme suivant (voir [58]) :

LEMME 3.1 (Propriété de plongement des espaces fractionnaires). *Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert dont la frontière $\partial\Omega$ est de régularité C^2 . Soit A un opérateur sectoriel sur $X = L^p(\Omega)$, $A : D(A) \subset X \mapsto X$, tel que $X^1 = D(A) \subset W^{2,p}(\Omega)$.*

On a alors les injections continues suivantes pour $0 \leq \alpha < 1$:

$$(134) \quad X^\alpha \subset W^{k,q}(\Omega) \quad \text{pour} \quad k - \frac{d}{q} < 2\alpha - \frac{d}{p} \quad \text{et} \quad q \geq p,$$

$$(135) \quad X^\alpha \subset C^\nu(\Omega) \quad \text{pour} \quad 0 \leq \nu < 2\alpha - \frac{d}{p}.$$

Une conséquence particulièrement importante de l'injection (135) est que, sous les hypothèses du lemme, pour α suffisamment proche de 1 (à condition de travailler dans des espaces $L^p(\Omega)$ pour p suffisamment grand) on a l'inclusion continue $X^\alpha \subset L^\infty(\Omega)$; dans le cas $p = 2$ auquel on se restreindra ici cette injection sera réalisable pour $d = 1, 2$ ou 3. Etant donné $0 \leq \alpha < 1$ tel que $X^\alpha \subset L^\infty(\Omega)$ et étant donné une fonction numérique $F : \mathbb{C} \mapsto \mathbb{C}$ localement Lipschitzienne, alors cette fonction F s'étend en une fonction $F : X^\alpha \mapsto X$ également localement Lipschitzienne. Cette argument sera crucial pour démontrer l'existence de solutions au problème

4. Résolution du modèle monodomaine

On reprend le problème (63) (66) du modèle monodomaine,

$$(136) \quad \begin{cases} \frac{du}{dt} + Au = f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} = g(u, v) \end{cases}, \quad w(0) = w_0,$$

sur un ouvert $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ de frontière $\partial\Omega$ C^2 -régulière en dimension $d = 1, 2$ ou 3.

On recherche l'inconnue $w = (u, v)$ dans l'espace de Banach produit¹ $X \times B$ où $X = L^2(\Omega)$ et où B sera indifféremment l'espace $L^\infty(\Omega)$ des fonctions mesurables bornée ou l'espace $C^\nu(\Omega)$ des fonctions ν -Hölder continues sur Ω (pour $0 < \nu < 2 - d/2$ et $\nu < 1$); le second cas étant nécessaire pour l'étude de la régularité en espace des solutions en 5.

Dans la suite de ce chapitre on se place dans les conditions suivantes : A désigne l'opérateur diffusif $A = -\operatorname{div}(\sigma \nabla \cdot)$ pour une condition Neumann homogène au bord :

$$D(A) = \{u \in H^2(\Omega), \quad \sigma \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega\},$$

et vérifiant les hypothèses de la remarque 2.1 de sorte que A est autoadjoint positif et en particulier sectoriel.

1. L'espace produit $X \times B$ sera muni de la norme $\|w\|_{X \times B} = \max(\|u\|_X, \|v\|_B)$

Les termes de réaction f, g sont donnés à partir de la fonction numérique F ,

$$F : (x, y) \in \mathbb{C}^2 \mapsto F(x, y) = (f(x, y), g(x, y)) \in \mathbb{C}^2 ,$$

sur laquelle on fait l'hypothèse suivante selon le choix de l'espace B :

- si $B = L^\infty(\Omega)$, on suppose que F est localement Lipschitzienne de sorte que F s'étend en une fonction $F : L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega) \mapsto L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ également localement Lipschitzienne.

On choisit alors $0 < \alpha < 1$ donné par le lemme 3.1 tel que $X^\alpha \subset L^\infty(\Omega)$, la fonction numérique F , s'étend alors à une fonction,

$$F : (u, v) \in X^\alpha \times L^\infty(\Omega) \mapsto F(u, v) \in X \times L^\infty(\Omega) ,$$

localement Lipschitzienne ;

- si $B = C^\nu(\Omega)$ ($0 < \nu < 1$ et $\nu < 2 - d/2$), on suppose que F est de régularité C^2 de sorte que F s'étend en une fonction $F : C^\nu(\Omega) \times C^\nu(\Omega) \mapsto C^\nu(\Omega) \times C^\nu(\Omega)$ qui est localement Lipschitzienne.

On choisit alors $0 < \alpha < 1$ donné par le lemme 3.1 tel que $X^\alpha \subset C^\nu(\Omega)$, la fonction numérique F s'étend alors à une fonction,

$$F : (u, v) \in X^\alpha \times C^\nu(\Omega) \mapsto F(u, v) \in X \times C^\nu(\Omega) ,$$

localement Lipschitzienne.

On cherche alors une solution de (136) pour une donnée initiale $w_0 \in X^\alpha \times B$. Le théorème 2.2 motive la définition suivante pour les solutions de (136) :

DÉFINITION 4.1 (Solutions pour le problème de Cauchy (136)). *On dira qu'une fonction $w : [0, T) \mapsto X \times B$ est une solution du problème de Cauchy (136) lorsque :*

- $w : [0, T) \mapsto X \times B$ est continue et $w(0) = w_0$,
- $w : (0, T) \mapsto X \times B$ est dérivable au sens de Fréchet,
- $t \in (0, T) \mapsto F \circ w(t) \in X \times B$ est localement Hölder continue et est continue en 0,
- $\forall t \in (0, T)$, $u(t) \in D(A)$ et (136) est vérifiée.

Le théorème 2.2 assure que si w est une solution de (136) alors w vérifie la formulation intégrale de variation de la constante :

$$(137) \quad \begin{aligned} u(t) &= e^{-At}u_0 + \int_0^t e^{-A(t-s)} f \circ w(s) ds \\ v(t) &= v_0 + \int_0^t g \circ w(s) ds \end{aligned} ,$$

Réciproquement :

LEMME 4.1 (Variation de la constante). *Soit α , $0 \leq \alpha < 1$, tel que $F : X^\alpha \times B \mapsto X \times B$ est localement Lipschitzienne.*

Si une fonction continue

$$w : [0, T) \mapsto X^\alpha \times B ,$$

vérifie la formule intégrale (137) sur $(0, T)$, alors $w : (0, T) \mapsto X^\alpha \times B$ est localement Hölder continue et donc, par théorème 2.2, w est une solution de (136).

DÉMONSTRATION. D'après 2.2 il suffit de montrer que sous les hypothèses du lemme la fonction $t \mapsto F \circ w(t) \in X \times B$ est localement Hölder continue sur $(0, T)$, et comme $F : X^\alpha \times B \mapsto X \times B$ est localement Lipschitz, il suffit de montrer que $t \mapsto w(t) \in X^\alpha \times B$ est localement Hölder continue.

Par continuité de $g \circ w$ on a au voisinage de $t_0 \in (0, T)$:

$$\|v(t_0 + h) - v(t_0)\|_B \leq \int_{t_0}^{t_0+h} \|g \circ w(s)\|_B ds \leq M h .$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned} u(t_0 + h) - u(t_0) &= (e^{-Ah} - I) e^{-At_0} u_0 + \int_{t_0}^{t_0+h} e^{-A(t_0+h-s)} f \circ w(s) ds \\ &\quad + \int_0^{t_0} (e^{-Ah} - I) e^{-A(t_0-s)} f \circ w(s) ds , \end{aligned}$$

comme $e^{-At_0} u_0 \in D(A)$ on a $A_1^\alpha e^{-At_0} u_0 \in X^{1-\alpha}$ et avec (133),

$$\|(e^{-Ah} - I) e^{-At_0} u_0\|_{X^\alpha} = \|(e^{-Ah} - I) A_1^\alpha e^{-At_0} u_0\|_X \leq M h^{1-\alpha} \|A_1 e^{-At_0} u_0\|_X ,$$

et par continuité de w et de f on a avec (132) au voisinage de t_0 ,

$$\left\| \int_{t_0}^{t_0+h} e^{-A(t_0+h-s)} f \circ w(s) ds \right\|_{X^\alpha} \leq \int_{t_0}^{t_0+h} \|A_1^\alpha e^{-A(t_0+h-s)}\|_X \|f \circ w(s)\|_X ds \leq M h^{1-\alpha} ,$$

enfin pour $0 < \delta < 1 - \alpha$, comme $e^{-A(t-s)} f \circ w(s) \in D(A)$ on a $A_1^\alpha e^{-A(t-s)} f \circ w(s) \in X^{1-\alpha} \subset X^\delta$ et en utilisant (133) puis (132) :

$$\begin{aligned} \|(e^{-Ah} - I) e^{-A(t_0-s)} f \circ w(s)\|_{X^\alpha} &= \|(e^{-Ah} - I) A_1^\alpha e^{-A(t_0-s)} f \circ w(s)\|_X \\ &\leq M h^\delta \|A_1^{\alpha+\delta} e^{-A(t_0-s)} f \circ w(s)\|_X \\ &\leq M h^\delta (t_0 - s)^{-(\alpha+\delta)} e^{at} \|f \circ w(s)\|_X , \end{aligned}$$

par choix de δ , $\alpha + \delta < 1$ et la dernière inégalité assure que $w : t \in (0, T) \mapsto X^\alpha \times B$ est localement Hölder continue. \square

Ce lemme va nous permettre d'établir le résultat suivant :

THÉORÈME 4.1 (Existence locale et unicité des solutions). *Soit α tel que $F : X^\alpha \times B \mapsto X \times B$ soit localement Lipschitzienne et soit $w_0 = (u_0, v_0)$ tel que $u_0 \in X^\alpha$.*

Alors il existe une unique solution w de (136), $w : [0, T) \mapsto X \times B$, pour la condition initiale $w(0) = (u_0, v_0)$, où $T > 0$ ne dépend que de w_0 .

REMARQUE 4.1 (Effet régularisant de l'opérateur A). *On montre en réalité un résultat plus fort que celui énoncé : la solution w du théorème vérifie en outre $w : [0, T] \mapsto X^\alpha \times B$ est continue et localement Hölder continue sur $(0, T)$.*

En utilisant le lemme de plongement 3.1 on a $u \in C([0, T], C^\nu(\Omega)) \cap C_{loc}^\nu((0, T), C^\nu(\Omega))$ pour $0 \leq \nu < 2\alpha - d/2$ et $u_0 \in X^\alpha$. De même $u \in C([0, T], H^1(\Omega)) \cap C_{loc}^\nu((0, T), H^1(\Omega))$ pour $u_0 \in X^{1/2+\varepsilon}$.

REMARQUE 4.2 (Existence globale). *Le problème de l'existence de solution pour tous temps ($T = +\infty$) n'a pas de réponse générale et dépend des termes de réaction.*

On peut cependant dire que si une solution $w : [0, T] \mapsto X \times B$ vérifie $F(w) : [0, T] \mapsto X \times B$ est bornée alors T n'est pas maximal et w peut être prolongée en une solution sur $[0, T')$, $T' > T$.

Par conséquent si une solution reste a priori bornée en norme L^∞ alors elle existe pour tous temps. Une autre conséquence est que si $F : X^\alpha \times B \mapsto X \times B$ est Lipschitzienne alors $T = +\infty$ (voir [58]).

DÉMONSTRATION. On fixe $u_0 \in X^\alpha$ et $v_0 \in B$, on considère $V \subset X^\alpha \times B$ une boule de centre $w_0 = (u_0, v_0)$ et de rayon δ ,

$$V = \{w \in X^\alpha \times B, \quad \|w - w_0\|_{X^\alpha \times B} \leq \delta\},$$

sur laquelle F est Λ -Lipschitz :

$$\forall w, w' \in V, \quad \|F(w) - F(w')\|_{X \times B} \leq \Lambda \|w - w'\|_{X^\alpha \times B}.$$

Soit M la constante intervenant dans (132), $\|A_1^\alpha e^{-At}\|_X \leq M t^{-\alpha} e^{at}$.

Comme $u_0 \in X^\alpha$ on a $A_1^\alpha u_0 \in X$ et $\|(e^{-At} - I)u_0\|_{X^\alpha} = \|(e^{-At} - I)A_1^\alpha u_0\|_X \rightarrow 0$ quand $t \rightarrow 0^+$.

Soit $N = \|F(w_0)\|_{X \times B}$, on fixe alors T tel que :

$$\begin{aligned} \|(e^{-Ah} - I)u_0\|_{X^\alpha} &\leq \frac{\delta}{2} \quad \text{pour } 0 \leq h \leq T, \\ M(N + \Lambda\delta) \int_0^T s^{-\alpha} e^{as} ds &\leq \frac{\delta}{2} \quad \text{et} \quad (N + \Lambda\delta)T \leq \delta \end{aligned}$$

Soit S l'ensemble des fonctions $w : [0, T] \mapsto X^\alpha \times B$ continues et à valeurs dans $V : \|w(t) - w(0)\|_{X^\alpha \times B} \leq \delta$ pour $0 \leq t \leq T$. On munit S de la métrique associée à la borne sup,

$$\|w\|_\infty = \sup_{t \in [0, T]} \|w(t)\|_{X^\alpha \times B},$$

Pour laquelle S est un espace métrique complet. On définit sur S l'application $G : w \in S \mapsto (G_1(w), G_2(w))$ avec pour $0 \leq t \leq T$,

$$G_1(w)(t) = e^{-At}u_0 + \int_0^t e^{-A(t-s)}f(w(s))ds, \quad G_2(w)(t) = v_0 + \int_0^t g(w(s))ds,$$

la démonstration du lemme 4.1 montre que $G : [0, T] \mapsto X^\alpha \times B$ est localement Hölder continue (donc continue) sur $(0, T)$ et il est facile de

voir que G est aussi continue en 0^+ .

Montrons que $G : S \mapsto S$.

$$\begin{aligned} \|G_1(w)(t) - u_0\|_{X^\alpha} &\leq \|(e^{-At} - I)u_0\|_{X^\alpha} \\ &\quad + \int_0^t \|A_1^\alpha e^{-A(t-s)}\|_X (\|f(w(s)) - f(w_0)\|_X + \|f(w_0)\|_X) ds \\ &\leq \frac{\delta}{2} + M(\lambda\delta + N) \int_0^T t^{-\alpha} e^{at} dt \leq \delta, \end{aligned}$$

et une majoration similaire sur $\|G_2(w) - v_0\|_B$ assure que $G : S \mapsto S$.

Montrons maintenant que G est contractante. Pour $w, w' \in S$:

$$\begin{aligned} \|G_1(w)(t) - G_1(w')(t)\|_{X^\alpha} &\leq \int_0^t \|A_1^\alpha e^{-A(t-s)}\|_X \|f(w(s)) - f(w'(s))\|_X ds \\ &\leq \Lambda \int_0^T t^{-\alpha} e^{at} dt \|w - w'\|_{X^\alpha \times B} \leq \frac{1}{2} \|w - w'\|_{X^\alpha \times B}, \end{aligned}$$

et on a la même majoration sur $\|G_2(w)(t) - G_2(w')(t)\|_B$.

Appliquant le théorème du point fixe, G a un unique point fixe dans S qui est solution de (136) d'après le lemme 4.1.

□

5. Régularité des solutions

On reprend dans cette section les hypothèses de la section précédente, on se propose d'étudier la régularité des solutions données par le théorème 4.1.

5.1. Régularité en temps. On reprend ici les hypothèses du théorème 4.1 et on considère la solution $w = (u, v)$ associée à la donnée initiale $(u_0, v_0) \in X^\alpha \times B$ avec $0 \leq \alpha < 1$ et suffisamment grand pour que l'on ait $X^\alpha \subset L^\infty(\Omega)$.

On peut tout d'abord constater que, puisque $v : (0, T) \mapsto B \subset L^\infty(\Omega)$ est dérivable alors v en tant que fonction numérique est dérivable en temps : $(x, t) \mapsto v(x, t)$ est dérivable en t sur $\Omega \times (0, T)$.

L'effet régularisant de A se traduit par le fait que pour $u_0 \in X^\alpha$ on a $u(t) \in D(A)$ pour $t > 0$. Dans le cas de l'équation linéaire homogène (124) cela se traduit par le fait que pour tout $u_0 \in X$ et $0 \leq \alpha < 1$ on a $u(t) = e^{-At}u_0 : (0, T) \mapsto X^\alpha$ est dérivable au sens de la dérivée de Fréchet sur X^α et que $\frac{du}{dt}(t) = -Ae^{-At}u_0 : (0, T) \mapsto X^\alpha$ est continue et localement Hölder continue. Pour α suffisamment proche de 1 (tel que $X^\alpha \subset C^\nu(\Omega)$) cela assure que u est dans ce cas continûment dérivable en t en tant que fonction numérique sur $\bar{\Omega} \times (0, T)$.

Ce résultat reste vrai dans le cas de l'équation avec second membre (129) :

LEMME 5.1. Soit A un opérateur sectoriel sur X .
Soit f une fonction continue $f : [0, T) \mapsto X$ vérifiant pour un certain $\gamma > 0$:

$$\|f(t) - f(s)\|_X \leq K(s)(t - s)^\gamma$$

pour $0 < s < t < T$ et pour une fonction $K(\cdot)$ continue sur $(0, T)$ vérifiant $\int_0^T K(t)dt < +\infty$.

Alors la solution $u(t)$ de (129) pour la condition initiale $u_0 = 0$ donnée par le théorème 2.2 :

$$u(t) = \int_0^t e^{-A(t-s)} f(s) ds ,$$

vérifie que pour tout $0 \leq \beta < \gamma$

$$t \in (0, T) \mapsto u(t) \in X^\beta$$

est continûment dérivable et que sa dérivée

$$t \in (0, T) \mapsto \frac{du}{dt}(t) \in X^\beta$$

est localement Hölder continue.

Ce lemme permet d'établir la régularité en temps des solutions de (123) :

THÉORÈME 5.1. Soit A un opérateur sectoriel sur X et soit $0 \leq \alpha < 1$ tel que $f : X^\alpha \mapsto X$ soit localement Lipschitzienne.

Alors la solution $u : [0, T) \mapsto X$ associée à la condition initiale $u_0 \in X^\alpha$ vérifie :

$\forall \gamma < 1$,

$$t \in (0, T) \mapsto u(t) \in X^\gamma$$

est continûment dérivable et que sa dérivée

$$t \in (0, T) \mapsto \frac{du}{dt}(t) \in X^\gamma$$

est localement Hölder continue.

En utilisant le lemme de plongement 3.1, ce théorème prouve que la solution w du modèle monodomaine (136) vérifie

– si $F : \mathbb{C}^2 \mapsto \mathbb{C}^2$ est localement Lipschitzienne et pour $w_0 \in X^\alpha \times L^\infty(\Omega)$ avec $\alpha < 2 - d/2$:

$(x, t) \mapsto w(x, t)$ est continûment dérivable en t sur $\Omega \times (0, T)$,

– si $F : \mathbb{C}^2 \mapsto \mathbb{C}^2$ est C^2 et pour $w_0 \in X^\alpha \times C^\varepsilon(\Omega)$ avec $\alpha < 2 - d/2$ et $\varepsilon > 0$ quelconque :

$w(x, t)$ est continûment dérivable en t sur $\bar{\Omega} \times (0, T)$. De plus on

a $\frac{dw}{dt}(t) \in C^\delta(\Omega)$ pour $0 < t < T$ et pour un certain $\delta > 0$.

5.2. Régularité en espace. La régularité en espace des solutions du modèle monodomaine est une simple conséquence de leur régularité en temps combinée avec le théorème de la régularité elliptique (voir par exemple [52]).

On posera dans cette section que $B = C^\varepsilon(\Omega)$ pour un certain $\varepsilon \in (0, 1)$.

PROPOSITION 5.1. *On suppose que le terme de réaction $F : \mathbb{C}^2 \mapsto \mathbb{C}^2$ du modèle monodomaine est de régularité C^2 , la frontière $\partial\Omega$ du domaine de régularité $C^{2+\varepsilon}$ et le tenseur de conductivité de régularité $C^{1+\varepsilon}$ pour un certain $\varepsilon > 0$.*

Soit $0 < \alpha < 1$ tel que $X^\alpha \subset C^\nu(\omega)$ pour un certain $\nu \in (0, 1)$.

Alors la solution du modèle monodomaine $w = (u, v) : [0, T) \mapsto X \times B$ vérifie

$$\forall t > 0 : \quad x \mapsto u(x, t) \in C^2(\bar{\Omega}) .$$

DÉMONSTRATION. Soit $w : [0, T) \mapsto X \times C^\varepsilon(\Omega)$ la solution de (136) du corollaire. D'après le théorème 5.1 on a continuité de $t \in (0, T) \mapsto dw/dt \in X^\gamma \times C^\varepsilon(\Omega)$ et pour γ suffisamment proche de 1 on a par lemme de plongement 3.1 l'injection continue $X^\gamma \subset C^\nu(\Omega)$ et donc pour un certain $\delta > 0$:

$$t \in (0, T) \mapsto \frac{dw}{dt} \in [C^\delta(\Omega)]^2$$

est continue. On en déduit que pour $t \in (0, T)$ on a :

$$Au(t) = -\frac{du}{dt}(t) + F(u(t), v(t)) \in C^\beta(\Omega) ,$$

pour $\beta > 0$ et par conséquent on a $u(t) \in C^{2+\nu}(\Omega) \subset C^2(\bar{\Omega})$. □

Troisième partie

Analyse et simulation numérique
du modèle bidomaine du coeur
couplé avec le thorax par une
méthode de *volumes finis en*
dualité discrète

Introduction à la partie III

L'objectif de cette troisième partie est la mise au point et la mise en oeuvre d'une méthode de résolution numérique pour le modèle bidomaine couplé coeur+thorax.

Les difficultés numériques liées à cette résolution sont :

- (1) Dynamiques lente/rapide. La propagation du potentiel d'action cardiaque fait intervenir des processus ayant lieu sur des échelles de temps tout à fait différentes. Les dynamiques rapides induisent de brusques changements en temps et en espace sur le potentiel qui lui confèrent un comportement du type *front d'onde*. A proprement parler il ne s'agit pas de la propagation d'une discontinuité, le potentiel est en effet régulier car déterminé par une équation parabolique régularisante. Du point de vue numérique cependant, le front d'onde du potentiel d'action apparaît effectivement comme une discontinuité. Ces dynamiques lente/rapide posent des problèmes de stabilité et nécessitent le recours à des maillages suffisamment raffinés afin de capter les petites échelles.
- (2) L'anisotropie des milieux. Chacun des milieux intra et extracellulaires (considérés comme superposés dans le volume occupé par le coeur) est fortement anisotrope. Cette anisotropie est variable en espace et suit la rotation des fibres musculaires. Le taux d'anisotropie est de plus différent selon qu'on se place dans le milieu intra ou dans le milieu extra cellulaire. Par conséquent il est nécessaire de considérer sur un même maillage deux tenseurs d'anisotropie différents.
- (3) Les maillages. Les maillages proviennent de données expérimentales. Ils décrivent non seulement la géométrie des volumes occupés par le coeur et par le thorax mais aussi l'orientation des fibres musculaires dans le coeur. Ces maillages – non structurés et éventuellement distordus – sont donc difficiles à transformer (pour améliorer leur qualité, notamment vis à vis de l'anisotropie) : une contrainte fondamentale sur la méthode à utiliser est qu'elle puisse s'adapter à des maillages très généraux.
- (4) Le couplage coeur/thorax. L'activité électrique du coeur est couplée à celle du thorax par des relations de couplage sur l'interface coeur/ thorax. Ces relations expriment des continuités

de flux de courant et de potentiels au passage du coeur au thorax. Il s'agit, selon les données physiologiques du chapitre 4, d'un couplage de type fort : les caractéristiques physiques de la conduction dans le thorax influant le comportement électrique du coeur. Il convient d'utiliser une méthode qui traite effectivement ce couplage en tant que couplage fort.

Mathématiquement ces relations de couplage font que le modèle couplé coeur+thorax est du type *problème de transmission* mais *non standard* : les relations de couplage étant non compatibles avec l'équation elliptique satisfaite par les potentiels intra et extra-cellulaires. Ce point constitue une réelle difficulté pour le traitement numérique du modèle.

Le premier point de cette liste a entièrement motivé dans la partie 2 l'utilisation de schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles. Pour ces schémas il existe des relations de stabilité effectives dans le cadre d'une version simplifiée du modèle bidomaine (le modèle monodomaine). Ces schémas permettent également de traiter l'anisotropie du milieu. Ce traitement implique cependant de fortes contraintes sur les maillages qui ne seront pas satisfaites en pratique : pour des maillages usuels (voir chapitre 6) le traitement de l'anisotropie n'est pas satisfaisant.

On développe dans cette troisième partie une méthode numérique type volumes finis que l'on appellera *méthode de volumes finis en dualité discrète*. On notera en abrégé méthode *DDFV* pour *Discrete-Duality Finite Volumes*, selon la terminologie introduite par Delcourte, Domelevo et Omnès dans [36] et reprise dans [4]. La méthode DDFV permet de satisfaire aux contraintes énoncées ci dessus.

Cette technique s'inscrit dans le cadre des volumes finis. Dans la mesure où les méthodes volumes finis reposent sur des formulations en terme de flux elles nous paraissent bien adaptées au traitement des relations de couplage entre le coeur et le thorax.

Afin d'introduire les principes de la méthode DDFV on se fixe pour cadre l'approximation de l'équation de Poisson,

$$(138) \quad \operatorname{div}(G\nabla\phi) = f ,$$

sur un domaine Ω borné de \mathbb{R}^d , pour un second membre f et un tenseur G (variable en espace) donnés.

Les méthodes volumes finis s'attachent au calcul de valeurs moyennes. Sur un élément géométrique S , en utilisant la formule de la divergence

$$(139) \quad \frac{1}{|S|} \int_S \operatorname{div}(G\nabla\phi) \, dx = \frac{1}{|S|} \int_{\partial S} G\nabla\phi \cdot \mathbf{n} \, ds ,$$

(où $|S|$ est la mesure de l'élément S et \mathbf{n} la normale unitaire sortante sur ∂S), le calcul de la valeur moyenne de $\operatorname{div}(G\nabla\phi)$ sur S est transformé en un calcul des flux de $G\nabla\phi$ sur les faces (ou arêtes) de l'élément S .

Sur un maillage du domaine Ω on distingue classiquement deux catégories de méthodes volumes finis pour l'approximation de (138) : les schémas *cell-centered* approchent les valeurs de ϕ sur les cellules (ou volumes de contrôle) du maillage, les schémas *vertex-centered* approchent les valeurs de ϕ sur les sommets du maillage (voir [43]). Dans le premier cas, on approchera la valeur moyenne de $\text{div}(G\nabla\phi)$ sur les cellules du maillage ; dans le second cas sur une seconde classe de cellules, dites *cellules duales*, construites autour de chacun des sommets du maillages.

Dans chacun de ces deux cas, cette approximation est basée sur l'équation (139). Le flux de $G\nabla\phi$ sur une face (ou arête) σ de ∂S est approché à partir des valeurs de ϕ sur chacune des cellules (ou cellules duales) de chaque coté de cette face. On dispose ainsi de deux valeurs de ϕ pour formuler une approximation de $\nabla\phi \cdot \mathbf{n}$ sur σ .

Pour un schéma *cell-centered* on place un centre dans chaque cellule. Les centres des deux cellules situées de chaque coté de σ définissent une direction et une distance à travers σ qui permettent d'approcher $\nabla\phi \cdot G\mathbf{n}$ sur σ par une formule de différence finie. Pour que cette formule soit consistante, il faut que la direction définie par ces deux centres soit cohérente avec la direction $G\mathbf{n}$.

Pour un schéma *vertex-centered*, on impose au préalable, par construction des cellules duales (construction du maillage de Voronoi), aux sommets A et B associés aux cellules duales de chaque coté de σ , d'être orientés selon la direction $G\mathbf{n}$ sur σ . On approche alors également $\nabla\phi \cdot G\mathbf{n}$ par une formule de différence finie à partir des valeurs de ϕ aux sommets A et B .

Cette approximation des flux numériques impose une contrainte forte sur les maillages : contrainte sur la construction des centres des cellules dans un cas, contrainte sur la construction des cellules duales dans l'autre cas. Cette contrainte est difficile à satisfaire dès lors que G n'est pas isotrope, en particulier dans le cas de la dimension 3. Par ailleurs cette contrainte est difficile à satisfaire dès lors que l'on doit traiter simultanément deux tenseurs de conductivité possédant des rapports d'anisotropie différents (d'un facteur 3 à 6).

Une alternative consiste à reconstruire complètement le gradient de ϕ , et non plus seulement sa composante $G\mathbf{n}$: on parle alors de méthode de reconstruction du gradient. Une telle méthode possède l'avantage de ne plus être dépendante du tenseur G ; elle n'impose donc plus de contrainte en rapport avec l'anisotropie sur le maillage. En outre elle permet de discrétiser de manière unifiée des problèmes où interviennent plusieurs tenseurs : cette possibilité est un avantage pour la résolution du modèle bidomaine, voir le point 2 ci-dessus.

Plusieurs méthodes de volumes finis basées sur une reconstruction du gradient ont été développées ces dernières années.

Aavatsmark *et al.* [1] ont développé une méthode de reconstruction du gradient sur des maillages en dimension 2 : cette méthode est du type cell-centered. Un gradient discret est défini en ajoutant des inconnues auxiliaires sur chaque demi arêtes du maillage. Ces inconnues auxiliaires sont ensuite éliminées en utilisant une propriété locale de continuité des flux. Le Potier [74, 75] a amélioré cette méthode en modifiant le procédé d'élimination locale des inconnues auxiliaires, rendant symétrique la discrétisation de l'opérateur elliptique $\text{div}(G\nabla\cdot)$.

Eymard *et al.* [44, 45] ont développé un second type de schémas volumes finis avec reconstruction du gradient. Ce schéma est également cell-centered, un gradient discret est défini sur chaque cellule du maillage. La convergence des approximations discrètes et de leur gradient discret vers la solution exacte et son gradient ont été démontrées et évaluées numériquement dans [45].

La méthode dite des *cellules diamants* reconstruit le gradient discret sur chaque faces (ou arêtes) des cellules. Pour cela il est nécessaire de disposer de plus des deux valeurs de l'inconnue discrète ϕ de chaque coté de cette face : la méthode des cellules diamants dispose pour cela à la fois des valeurs de ϕ sur les cellules et des valeurs de ϕ sur les sommets du maillage. A ce niveau on distingue deux approches.

Méthodes par interpolation. Ces méthodes, développées dans [33, 35], considèrent comme inconnues les valeurs de ϕ sur les cellules uniquement. Des valeurs de ϕ sur les sommets du maillage sont déduites des valeurs de ϕ sur les cellules par une méthode d'interpolation. Le gradient est reconstruit sur chaque face des cellules, par la méthode dite des *cellules diamants*, à partir des valeurs de ϕ sur les cellules et aux sommets du maillage. Cette méthode a également été étudiée pour des problèmes de convection diffusion dans [39, 40].

L'avantage de cette méthode est de formuler de façon unifiée la discrétisation de problèmes en dimension 2 ou 3. Cette méthode a été implémentée en dimensions 2 et 3 pour un modèle monodomaine du coeur seul. Elle permet effectivement une bonne gestion de l'anisotropie sans contraintes sur le maillage.

Un inconvénient majeur de cette méthode est que la discrétisation de l'opérateur $\text{div}(G\nabla\cdot)$ n'est ni symétrique ni négative. L'inversibilité des schémas numériques est ainsi difficile à prouver.

Méthode DDFV. Cette méthode a été développée parallèlement par Hermeline [62, 63] et Domelevo et Omnès [38] sur des maillages en dimension 2. On considère ici comme inconnues les valeurs de ϕ sur les cellules et aux sommets du maillage. La reconstruction du gradient se fait alors également par la méthode des cellules diamants. Pour avoir autant d'inconnues que d'équations, l'équation (138) est désormais intégrée à la fois sur les cellules et sur les cellules duales.

Cette méthode possède des propriétés algébriques similaires aux propriétés des opérateurs divergence et gradient dans le cas continu. Elle

aboutit à la définition d'opérateurs gradient et divergence discret présentant une relation de dualité similaire à la formule de Green. Cette propriété a motivé l'appellation de *Discrete-Duality Finite Volumes method* (méthode DDFV en abrégé) dans [36].

Ces propriétés algébriques assurent en particulier la symétrie et la négativité de la discrétisation de l'opérateur $\text{div}(G\nabla \cdot)$; pour des conditions limites *ad hoc*, elles impliquent donc également l'inversibilité des schémas numériques.

Une extension de la méthode DDFV au cas de la dimension 3 a été formulée et testée numériquement par Hermeline [64]; cette extension ne préserve cependant pas les propriétés de symétrie et de positivité des opérateurs elliptiques discrétisés.

On présente ici une seconde extension de la méthode DDFV au cas de la dimension 3 qui préserve ces propriétés.

On commence au chapitre 8 par définir précisément les maillages DDFV ainsi que les opérateurs gradient et divergence discrets sur ces maillages. Deux propriétés algébriques de ces opérateurs sont étudiées : la relation de dualité entre le gradient et la divergence discrets à travers la formule de Green discrète, ainsi que l'injectivité du gradient discret.

Au chapitre 9 ces notions sont appliquées à la formulation de schémas discrets pour la résolution de problèmes elliptiques : l'équation de Poisson (138) pour une condition limite mixte Neumann/Dirichlet homogène. Deux cas sont abordés, celui où le tenseur G est continu et celui où G présente une discontinuité entre deux sous domaines de Ω (problème de transmission). Pour chacun de ces cas l'inversibilité du schéma est établie ainsi que la symétrie et la négativité de la discrétisation de l'opérateur $\text{div}(G\nabla \cdot)$.

Les résultats du chapitre 9 sont repris au chapitre 10 pour établir un schéma de résolution du modèle bidomaine. Ce schéma intègre notamment les relations de couplage en une équation unifiée permettant de résoudre simultanément l'équation du potentiel sur le coeur et le thorax.

La mise en oeuvre de ce schéma est présentée au chapitre 11 sur des géométries en dimension 2, l'implémentation des schémas en dimension 3 étant en cours. Les schémas DDFV y sont notamment comparés aux schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles. Dans un second temps on applique les schémas à la résolution du modèle couplé coeur+thorax sur une géométrie modélisant une coupe transverse du thorax. On simule successivement le fonctionnement normal du coeur et des comportements pathologiques. Dans chacun de ces cas des ECG sont calculés.

Maillages DDFV

1. Définition des maillages DDFV

On définit ici les maillages DDFV d'un domaine Ω : un ouvert polygonal connexe borné de \mathbb{R}^d en dimension $d = 2, 3$.

Un maillage DDFV \mathcal{M} est la donnée d'un triplet $\mathcal{M} = (\mathcal{C}, \mathcal{S}, \mathcal{V})$, où :

- \mathcal{C} est l'ensemble des *cellules primales*,
- \mathcal{S} est l'ensemble des *interfaces*,
- \mathcal{V} est l'ensemble des *sommets*,

satisfaisant les conditions (i)-(vi) ci-dessous.

A partir du maillage DDFV \mathcal{M} seront définis deux ensembles supplémentaires de cellules :

- l'ensemble des cellules diamants \mathcal{D} relatif à l'ensemble \mathcal{S} des interfaces,
- l'ensemble des cellules duales \mathcal{P} relatif à l'ensemble \mathcal{V} des sommets,

On commence par définir les appellations *cellule* et *interface*.

Cellule. Une cellule est un ouvert connexe non vide et borné de \mathbb{R}^d dont le bord est polygonal si $d = 2$ ou polyédral si $d = 3$.

Interface. Une interface, notée génériquement σ , est un fermé connexe et borné contenu dans un hyperplan affine de \mathbb{R}^d . La mesure en dimension $d - 1$ d'une interface doit être non nulle. En dimension 2 une interface est un segment de droite non réduit à un point. En dimension 3 on demande à une interface d'être polygonale ; en pratique les interfaces seront des triangles ou des quadrilatères.

1.0.1. *Maillage DDFV.* $\mathcal{M} = (\mathcal{C}, \mathcal{S}, \mathcal{V})$ est un maillage DDFV du domaine Ω si les conditions (i)-(vi) ci-dessous sont satisfaites.

(i) L'ensemble \mathcal{C} des cellules primales est tel que

$$(140) \quad \bigcup_{K \in \mathcal{C}} \overline{K} = \overline{\Omega} \quad \text{et} \quad K \cap L = \emptyset \quad \text{si} \quad K \neq L .$$

On dira dans ce sens que les cellules primales forment une “partition” de Ω , quoique ce soit un abus de langage.

Lorsqu'il n'y aura pas d'ambiguïtés, les cellules primales seront aussi appelées simplement “*cellules*”.

(ii) L'ensemble \mathcal{S} des interfaces est tel que

$$\bigcup_{\sigma \in \mathcal{S}} \sigma = \bigcup_{K \in \mathcal{C}} \partial K .$$

(iii) L'ensemble \mathcal{V} des sommets est formé de l'ensemble des sommets de toutes les interfaces $\sigma \in \mathcal{S}$.

On notera systématiquement $|S|$ la mesure d'un objet géométrique S . Pour une cellule primale K , $|K|$ désigne sa mesure dans \mathbb{R}^d . Pour une interface σ , $|\sigma|$ désigne sa mesure en dimension $d - 1$ (sa longueur si $d = 2$ ou son aire si $d = 3$).

(iv) Pour deux cellules primales distinctes $K, L \in \mathcal{C}$, soit la mesure en dimension $d - 1$ $|\overline{K} \cap \overline{L}| = 0$, soit il existe une interface $\sigma \in \mathcal{S}$ telle que $\overline{K} \cap \overline{L} = \sigma$.

Dans le second cas on dira que les deux cellules K et L sont adjacentes et on notera $\sigma = K|L$.

(v) Pour deux interfaces $\sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{S}$ distinctes, la mesure en dimension $d - 1$ de leur intersection est nulle :

$$|\sigma_1 \cap \sigma_2| = 0 .$$

L'ensemble des cellules primales est pointé. C'est à dire qu'à chaque cellule $K \in \mathcal{C}$ on associe son centre $x_K \in K$. On note $(x_K)_{K \in \mathcal{C}}$ l'ensemble des centres des cellules primales. Si K est convexe, son centre peut être son centre de gravité par exemple.

On impose la restriction suivante sur les centres des cellules primales :

(vi) Si K et L sont deux cellules adjacentes, soit $\sigma \in \mathcal{S}$ l'interface telle que $\sigma = K|L$. On suppose que la droite $(x_K x_L)$ coupe l'interface σ :

$$(x_K x_L) \cap \sigma \neq \emptyset .$$

REMARQUE 1.1 (Restriction sur la géométrie des interfaces en dimension 3). *Alors qu'en dimension 2 les interfaces sont toujours des segments de droite, en dimension 3 les interfaces sont en toute généralité des polygones ayant un nombre quelconque de sommets.*

Cependant certaines propriétés algébriques des schémas DDFV sont fonctions de la géométrie des interfaces. En particulier on introduira en 3.2 un opérateur gradient discret relativement à un maillage DDFV \mathcal{M} . Le noyau de cet opérateur dépend de la géométrie des interfaces. Lorsque les interfaces sont triangulaires ou quadrangulaires, le noyau du gradient discret est formé de fonctions constantes, de même qu'en dimension 2 comme l'ont établi Domelevo, Omnès et Hermeline [62, 63, 38]. Cette propriété étant fondamentale pour établir les conditions d'inversibilité des opérateurs elliptiques $\operatorname{div}(G\nabla \cdot)$ discrétisés, on se limitera au cas où les interfaces sont effectivement triangulaires ou quadrangulaires.

REMARQUE 1.2. *La condition (vi) est restrictive sur la généralité des maillages. Il est possible d'étendre les définitions des schémas DDFV au cas où cette condition n'est plus satisfaite. Cependant certaines définitions nous paraissent alors moins légitimes, telle que celle des fonctions volumes finis dérivables en 2.*

On utilisera couramment les définitions suivantes.

Interfaces internes. On dira que l'interface $\sigma \in \mathcal{S}$ est une interface interne s'il existe deux cellules primales adjacentes $K, L \in \mathcal{C}$ telles que $\sigma = K|L$. Une telle interface est donc non incluse dans le bord du domaine. On note \mathcal{S}_{int} le sous ensemble de \mathcal{S} formé des interfaces internes.

Interfaces au bord. On appelle interface au bord toute interface $\sigma \in \mathcal{S}$ telle que $\sigma \subset \partial\Omega$. L'ensemble $\delta\mathcal{S}$ des interfaces au bord est le complémentaire de \mathcal{S}_{int} et de plus :

$$\bigcup_{\sigma \in \delta\mathcal{S}} \sigma = \partial\Omega .$$

Centre d'une interfaces au bord. Chaque interface au bord est pointée. C'est à dire qu'on considère un ensemble de points $(y_\sigma)_{\sigma \in \delta\mathcal{S}}$ tel que pour toute interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ on ait $y_\sigma \in \sigma$. On suppose de plus que y_σ n'est pas situé sur le bord de σ . En pratique y_σ sera le centre de gravité de σ .

Interfaces au bord d'une cellule primale. Pour une cellule primale $K \in \mathcal{C}$ on introduit le sous ensemble $\delta K \subset \mathcal{S}$ formé des interfaces incluses dans le bord de K .

Le bord de toute cellule $K \in \mathcal{C}$ se décompose donc comme :

$$\forall K \in \mathcal{C} , \quad \partial K = \bigcup_{\sigma \in \delta K} \sigma ,$$

Normale à une interface. Pour une interface $\sigma \in \mathcal{S}$ incluse dans le bord de la cellule primale $K \in \mathcal{C}$, $\sigma \in \delta K$, on note $\mathbf{n}_{\sigma,K}$ le vecteur unitaire normal à σ et pointant vers l'extérieur de K .

Si $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ est une interface au bord, on note \mathbf{n}_σ la normale unitaire à σ pointant vers l'extérieur du domaine.

Normale à un "bord". Si S est un polygone (en dimension 2) ou un polyèdre (en dimension 3), on notera systématiquement $\mathbf{n}_{\partial S}$ le champ de vecteur unitaire et normal à ∂S (défini presque partout) et pointant vers l'extérieur de S .

1.0.2. Cellules diamants. A une interface $\sigma \in \mathcal{S}$ on associe la cellule diamant $D(\sigma)$ de base σ de la manière suivante (voir figure 1) :

- pour une interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$, on considère la cellule primale K telle que $\sigma \in \delta K$. $D(\sigma)$ est définie comme l'intérieur de l'enveloppe convexe de $\sigma \cup \{x_K\}$;
- pour une interface interne $\sigma \in \mathcal{S}_{int}$, on considère les deux cellules primales adjacentes K et L telles que $\sigma = K|L$. $D(\sigma)$ est définie comme l'intérieur de l'enveloppe convexe à $\{x_K\} \cup \sigma \cup \{x_L\}$.

La mesure de la cellule diamant $D(\sigma)$ sera notée $|D(\sigma)|$.

L'ensemble $\mathcal{D} = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{S}} D(\sigma)$ des cellules diamants forme une "partition" du domaine Ω dans le même sens que (140).

1.0.3. Cellules duales. On associe à tout sommet $A \in \mathcal{V}$ du maillage une cellule duale $P(A)$. La construction de ces cellules doit permettre

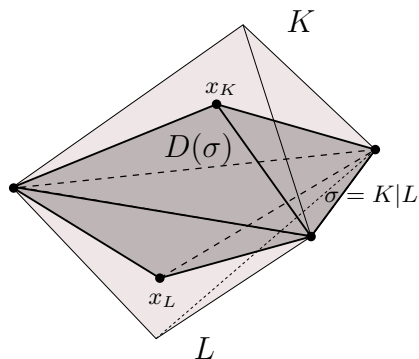


FIGURE 1. Cellule diamant $D(\sigma)$ pour une interface triangulaire.

d'établir l'équivalent discret de la formule de Green en 4 établie par Hermeline [62] et Domelevo et Omnès [38] sur des maillages en dimension 2, ainsi que de généraliser cette formule discrète au cas des maillages en dimension 3.

En dimension 2, il existe plusieurs constructions possibles. On utilisera la construction de Domelevo et Omnès [38] plus simple et fournissant des cellules duales de géométrie convexe. Dans le cas où l'hypothèse (vi) sur le maillage \mathcal{M} n'est plus satisfaite, Hermeline [63] a présenté une construction plus générale. Dans ces deux cas l'ensemble des cellules duales forme une "partition" de Ω dans le même sens que (140).

On propose en dimension 3 une construction des cellules duales qui permet également d'établir une formule de Green discrète. Par contre pour une telle construction les cellules duales ne constitueront plus une partition de Ω au sens de (140). Précisément les cellules duales en dimension 3 se chevauchent de telle sorte qu'elles recouvrent exactement deux fois le domaine.

Décomposition \mathcal{T} en simplex du domaine Ω . Afin de construire les cellules duales on introduit tout d'abord une décomposition de chaque cellule diamant $D(\sigma) \in \mathcal{D}$ en simplex. Les cellules diamants formant une partition du domaine, cette décomposition aboutit à une partition du domaine en simplex, notée \mathcal{T} . Cette décomposition servira par la suite à la définition des fonctions volumes finis dérivables en 2; elle s'appuie sur l'hypothèse (vi) de construction des maillages DDFV.

En dimension 2 ces simplex sont indexés sur les sommets de σ , en dimension 3 ils sont indexés sur les arêtes de σ . Précisément (voir figure 2) :

en dimension 2 on aura la décomposition

$$\overline{D(\sigma)} = D_A(\sigma) \cup D_B(\sigma) ,$$

où A, B sont les sommets de σ ;
 en dimension 3 on aura

$$\overline{D(\sigma)} = \bigcup_{e \subset \partial\sigma} D_e(\sigma) ,$$

où $\{e \subset \partial\sigma\}$ est l'ensemble des arêtes formant le bord de σ .

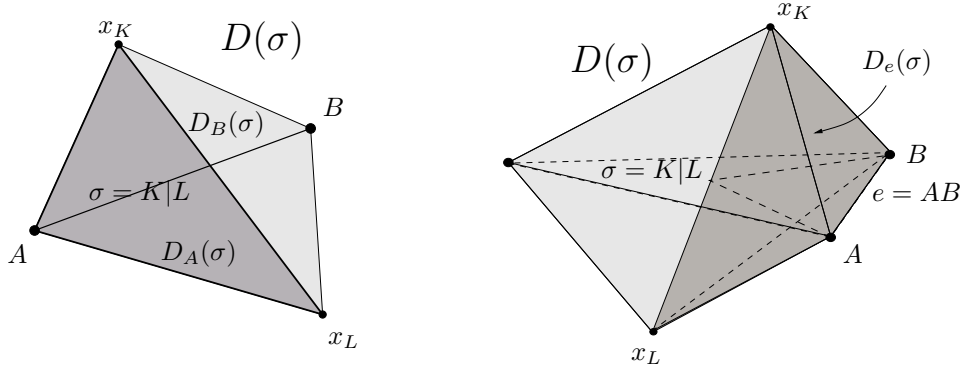


FIGURE 2. Décomposition en simplexe des cellules diamants.

En dimension 2, notant A et B les sommets de σ , on définit les deux triangles $D_A(\sigma)$ et $D_B(\sigma)$ comme :

- si $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ est au bord, on considère la cellule primale K telle que $\sigma \in \delta K$. $D_A(\sigma)$, $D_B(\sigma)$ sont les triangles

$$D_A(\sigma) = x_K A y_\sigma \quad , \quad D_B(\sigma) = x_K B y_\sigma ;$$

- si $\sigma \in \mathcal{S}_{int}$ est interne, soient les cellules primales K et L telles que $\sigma = K|L$. $D_A(\sigma)$, $D_B(\sigma)$ sont donnés par les triangles (voir figure 2)

$$D_A(\sigma) = x_K A x_L \quad , \quad D_B(\sigma) = x_K B x_L .$$

En dimension 3, soit e une arête de σ de sommets A et B . On définit le tétraèdre $D_e(\sigma)$ comme :

- si $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ est au bord, on considère la cellule primale K telle que $\sigma \in \delta K$. Alors,

$$D_e(\sigma) = x_K A B y_\sigma ;$$

- si $\sigma \in \mathcal{S}_{int}$ est interne, soient les cellules primales K et L telles que $\sigma = K|L$. Alors,

$$D_e(\sigma) = x_K A B x_L .$$

DÉFINITION 1.1 (Décomposition \mathcal{T} de Ω en simplexe). *Les cellules diamants forment une partition de Ω au sens de (140). La décomposition des cellules diamants en simplexe définit donc une décomposition du domaine Ω en simplexe. On note \mathcal{T} l'ensemble de ces simplexe. Chacun de*

ces simplex est fermé et l'on a :

$$\bigcup_{T \in \mathcal{T}} T = \bar{\Omega}, \quad \text{int}(T_1) \cap \text{int}(T_2) = \emptyset \quad \text{si} \quad T_1, T_2 \in \mathcal{T} \quad \text{et} \quad T_1 \neq T_2,$$

où $\text{int}(\cdot)$ désigne l'intérieur au sens topologique.

Les sommets des simplex de \mathcal{T} coïncident avec l'ensemble des sommets \mathcal{V} , des centres des cellules primales $(x_K)_{K \in \mathcal{C}}$ et des centres des interfaces au bord $(y_\sigma)_{\sigma \in \mathcal{S}}$.

Définition des cellules duales. Soit σ une interface du maillage. En dimension 2 on a défini les éléments $D_A(\sigma)$ et $D_B(\sigma)$ relatifs aux sommets A et B de σ .

En dimension 3, si A est un sommet de σ , on considère les deux arêtes e_1 et e_2 de σ qui ont A pour sommet. On pose alors,

$$(141) \quad D_A(\sigma) = D_{e_1}(\sigma) \cup D_{e_2}(\sigma) \subset D(\sigma).$$

Contrairement à la dimension 2, ces éléments recouvrent exactement deux fois le domaine Ω .

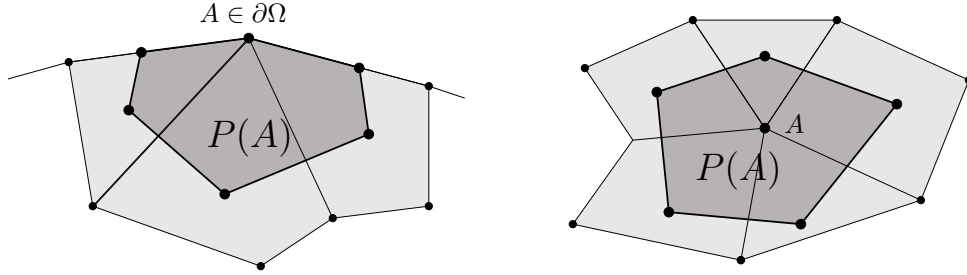


FIGURE 3. Cellule duale pour un sommet $A \in \mathcal{V}$ au bord ou à l'intérieur du domaine

DÉFINITION 1.2 (Cellules duales). *A tout sommet $A \in \mathcal{V}$ on associe la cellule duale $P(A)$ définie comme :*

$$P(A) = \text{int} \left(\bigcup_{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma} D_A(\sigma) \right),$$

où $\{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma\}$ est l'ensemble des interfaces ayant A parmi leurs sommets et où $\text{int}(\cdot)$ désigne l'intérieur au sens topologique.

Les cellules duales sont des ouverts connexes non vides; on note $|P(A)|$ la mesure de $P(A)$. En dimension 2 elles sont en outre convexes.

Si $A \in \mathcal{V}$ est un sommet sur le bord du domaine, alors $A \in \partial P(A)$. Par contre si $A \in \mathcal{V}$ est un sommet à l'intérieur du domaine, on a $A \in P(A)$ (voir figure 3).

On note $\mathcal{P} = (P(A))_{A \in \mathcal{V}}$ l'ensemble des cellules duales. En dimension 2, \mathcal{P} forme une partition du domaine Ω au sens de (140). Par

contre, en dimension 3, les cellules duales se chevauchent et recouvrent exactement deux fois le domaine, ce que l'on résume par :

$$(142) \quad |\Omega| = (d-1) \sum_{A \in \mathcal{V}} |P(A)| .$$

2. Espaces fonctionnels discrets

Relativement au maillage DDFV \mathcal{M} et aux ensembles de cellules duales et cellules diamants associés, on définit plusieurs espaces de fonctions de dimensions finies. Ces espaces sont au nombre de 4 :

- (1) espace $P^1(\mathcal{M})$ des fonctions volumes finis dérivables,
- (2) espace $L^2(\mathcal{D})$ des champs de vecteurs discrets,
- (3) espace $L^2(\delta\mathcal{S})$ des fonctions constantes sur les interfaces au bord,
- (4) espace $\mathcal{F}(\mathcal{M})$ des fonctions volumes finis,

et sont des analogues discrets de $H^1(\Omega)$, $L^2(\Omega)^d$ et $L^2(\partial\Omega)$.

Le but de cette construction est de définir des opérateurs gradient, divergence et trace discrets sur ces espaces (définis en section 3), qui s'organisent selon le diagramme

$$(143) \quad \begin{array}{ccccc} & & \nabla_h & & \text{div}_h \\ & & \longrightarrow & & \longrightarrow \\ P^1(\mathcal{M}) & & L^2(\mathcal{D}) & & \mathcal{F}(\mathcal{M}) \\ & & & & \\ \text{Tr}_h \downarrow & & & & \\ & & L^2(\delta\mathcal{S}) & & \end{array}$$

qui satisfont un analogue discret de la formule de Green établi section 4.

2.0.4. *Fonctions volumes finis dérivables.* Ces fonctions sont définies relativement à la décomposition \mathcal{T} du domaine Ω en simplex introduite en 1.1.

DÉFINITION 2.1. *On introduit l'espace $P^1(\mathcal{M})$ des fonctions volumes finis dérivables. $P^1(\mathcal{M})$ est formé des fonctions ϕ telles que,*

$$(144) \quad P^1(\mathcal{M}) = \{ \phi : \Omega \mapsto \mathbb{R} \text{ continue et affine sur chaque simplex } T \in \mathcal{T} \} ,$$

$P^1(\mathcal{M})$ est donc un sous espace de $H^1(\Omega)$.

La donnée de $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ est équivalente à la donnée des valeurs de ϕ aux sommets du maillage, aux centres des cellules primales et aux centres des interfaces au bord,

$$\{ (\phi(A))_{A \in \mathcal{V}} , (\phi(x_K))_{K \in \mathcal{C}} , (\phi(y_\sigma))_{\sigma \in \delta\mathcal{S}} \}$$

En particulier la dimension de $P^1(\mathcal{M})$ est donnée par :

$$\dim P^1(\mathcal{M}) = \#\mathcal{C} + \#\mathcal{V} + \#\delta\mathcal{S} .$$

2.0.5. *Champs de vecteurs discrets.* L'espace $L^2(\mathcal{D})$ des champs de vecteurs discrets sur \mathcal{M} est composé des champs de vecteurs sur Ω constants par morceaux sur chaque cellule diamant $D(\sigma) \in \mathcal{D}$.

Pour un champ de vecteurs discret $X \in L^2(\mathcal{D})$ on notera X_σ sa valeur sur la cellule diamant $D(\sigma)$.

En tant que sous espace de $L^2(\Omega)^d$, $L^2(\mathcal{D})$ est naturellement muni du produit scalaire

$$(145) \quad \forall X, Y \in L^2(\mathcal{D}), \quad (X, Y)_{L^2(\mathcal{D})} = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}} X_\sigma \cdot Y_\sigma |D(\sigma)|.$$

2.0.6. *Espace $L^2(\delta\mathcal{S})$.* On introduit l'espace $L^2(\delta\mathcal{S})$ composé des fonctions définies sur le bord $\partial\Omega$ du domaine et constantes (presque partout) sur les interfaces au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$.

Pour $f \in L^2(\delta\mathcal{S})$, on note f_σ la valeur prise par f sur l'interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$.

En tant que sous espace de $L^2(\partial\Omega)$, $L^2(\delta\mathcal{S})$ est naturellement muni du produit scalaire :

$$(146) \quad \forall f, g \in L^2(\delta\mathcal{S}), \quad (f, g)_{L^2(\partial\Omega)} = \sum_{\sigma \in \delta\mathcal{S}} f_\sigma g_\sigma |\sigma|.$$

2.0.7. *Fonctions volumes finis.* On approche une fonction $\tilde{f} \in L^2(\Omega)$ par ses valeurs moyennes $(\tilde{f}_K)_{K \in \mathcal{C}}$ sur les cellules primales et $(\tilde{f}_A)_{A \in \mathcal{V}}$ sur les cellules duales :

$$\tilde{f}_K = \frac{1}{|K|} \int_K \tilde{f} dx \quad , \quad \tilde{f}_A = \frac{1}{|P(A)|} \int_P(A) \tilde{f} dx.$$

Ces valeurs satisfont alors la condition globale :

$$\sum_{K \in \mathcal{C}} \tilde{f}_K |K| = \int_\Omega \tilde{f}(x) dx = \frac{1}{d-1} \sum_{A \in \mathcal{V}} \tilde{f}_A |P(A)|,$$

le coefficient $(d-1)$ provient du fait qu'en dimension 3 les cellules duales recouvrent exactement deux fois Ω alors qu'en dimension 2 elle forment une partition de Ω .

DÉFINITION 2.2. *On définit l'ensemble $\mathcal{F}(\mathcal{M})$ des fonctions volumes finis par : $f \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$ est la donnée d'un ensemble de valeurs sur les cellules primales et sur les cellules duales,*

$$f = \{(f_K)_{K \in \mathcal{C}}, (f_A)_{A \in \mathcal{V}}\},$$

qui satisfait la condition intégrale :

$$(147) \quad \sum_{K \in \mathcal{C}} f_K |K| = \frac{1}{d-1} \sum_{A \in \mathcal{V}} f_A |P(A)|,$$

En tant que tel les fonctions volumes finis dérivables ne sont pas des fonctions, on doit les voir comme l'ensemble des valeurs moyennes d'une fonction sur les cellules primales et les cellules duales.

On définit un “crochet de dualité” entre les espaces de fonctions volumes finis dérivables $P^1(\mathcal{M})$ et les espaces de fonctions volumes finis $\mathcal{F}(\mathcal{M}) : \forall (f, \phi) \in \mathcal{F}(\mathcal{M}) \times P^1(\mathcal{M}) :$

$$(148) \quad \langle f, \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = \frac{1}{d} \sum_{K \in \mathcal{C}} f_K \phi(x_K) |K| + \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}} f_A \phi(A) |P(A)| .$$

Ce produit est homogène. En effet si $\mathbb{1}_{\mathcal{F}(\mathcal{M})}$ (*resp.* $\mathbb{1}_{P^1(\mathcal{M})}$) désigne la fonction volumes finis (*resp.* volumes finis dérivable) constante égale à 1, l'égalité (142) assure que

$$\langle \mathbb{1}_{\mathcal{F}(\mathcal{M})}, \mathbb{1}_{P^1(\mathcal{M})} \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = |\Omega| .$$

3. Opérateurs discrets

Entre les espaces fonctionnels discrets définis à la section précédente on introduit des analogues discrets des opérateurs gradient, divergence et trace comme illustré par le diagramme (3.1).

3.1. Opérateur de trace discret. On définit un analogue de la trace sur $H^1(\Omega)$ sur l'espace des fonctions volumes finis dérivables.

DÉFINITION 3.1 (Tr_h). *On définit l'opérateur de trace discret*

$$(149) \quad \text{Tr}_h : P^1(\mathcal{M}) \mapsto L^2(\delta\mathcal{S}) ,$$

par : pour $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ et pour toute interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$,

$$(150) \quad (\text{Tr}_h \phi)_\sigma = \frac{1}{|\sigma|} \int_\sigma \phi(s) ds .$$

En utilisant le fait que $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ est affine sur chacun des simplexes de la décomposition \mathcal{T} de Ω , la trace discrète de ϕ sur l'interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ peut se réécrire en fonction des valeurs prises par ϕ au centre et aux sommets de cette interface :

$$(151) \quad (\text{Tr}_h \phi)_\sigma = \frac{1}{d} \phi(y_\sigma) + \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) \frac{|\partial P(A) \cap \sigma|}{|\sigma|} .$$

En pratique, le centre y_σ de l'interface σ est son centre de gravité et l'expression de la trace discrète se simplifie.

En dimension 2 on a :

$$(\text{Tr}_h \phi)_\sigma = \frac{1}{2} \phi(y_\sigma) + \frac{1}{4} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) ,$$

en dimension 3, pour une interface triangulaire :

$$(\text{Tr}_h \phi)_\sigma = \frac{1}{3} \phi(y_\sigma) + \frac{2}{9} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) .$$

3.2. Opérateur gradient discret. On définit un analogue du gradient sur $H^1(\Omega)$ sur l'espace des fonctions volumes finis dérivables. Cette définition est identique à la reconstruction du gradient discret par la méthode des cellules diamants par Coudière *et al.* dans [35, 33].

DÉFINITION 3.2. *L'opérateur gradient discret ∇_h ,*

$$\nabla_h : P^1(\mathcal{M}) \longrightarrow L^2(\mathcal{D}) ,$$

est défini pour $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ par :

$$(152) \quad \forall \sigma \in \mathcal{S} : (\nabla_h \phi)_\sigma = \frac{1}{|D(\sigma)|} \int_{D(\sigma)} \nabla \phi(x) dx .$$

La définition du gradient discret s'exprime en pratique à partir des valeurs prises par ϕ sur les sommets du maillage, les centres des cellules primales et les centres des interfaces au bord.

PROPOSITION 3.1. *Le gradient discret défini en 3.2 se réécrit pour $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ et pour une interface interne $\sigma = K|L$ comme :*

(153)

$$d|D(\sigma)| (\nabla_h \phi)_\sigma = (\phi(x_L) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma,K} - \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ,$$

où $\{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma\}$ est l'ensemble des sommets de l'interface σ .

Pour une interface au bord $\sigma \in \delta K$ on a :

(154)

$$d|D(\sigma)| (\nabla_h \phi)_\sigma = (\phi(y_\sigma) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma,K} - \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} .$$

Géométriquement, $\partial P(A) \cap D(\sigma)$ représente la partie du bord de la cellule duale à A à l'intérieur de $D(\sigma)$. En particulier lorsque σ est une interface au bord, $\partial P(A) \cap D(\sigma)$ ne rencontre pas le bord du domaine (voir figure 4).

DÉMONSTRATION DE 3.1. Comme ϕ est affine sur chacun des simplexes de la décomposition \mathcal{T} de Ω et que chaque cellule diamant se décompose en simplexes de \mathcal{T} on peut réécrire (152) :

$$\begin{aligned} (\nabla_h \phi)_\sigma &= \frac{1}{|D(\sigma)|} \sum_{T \in \mathcal{T}, T \subset D(\sigma)} \int_T \nabla \phi(x) dx \\ &= \frac{1}{|D(\sigma)|} \sum_{T \in \mathcal{T}, T \subset D(\sigma)} \int_{\partial T} \phi(s) \cdot \mathbf{n}_{\partial T} ds . \end{aligned}$$

Comme ϕ est continue, on a exactement :

$$(\nabla_h \phi)_\sigma = \frac{1}{|D(\sigma)|} \int_{\partial D(\sigma)} \phi(s) \cdot \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} ds .$$

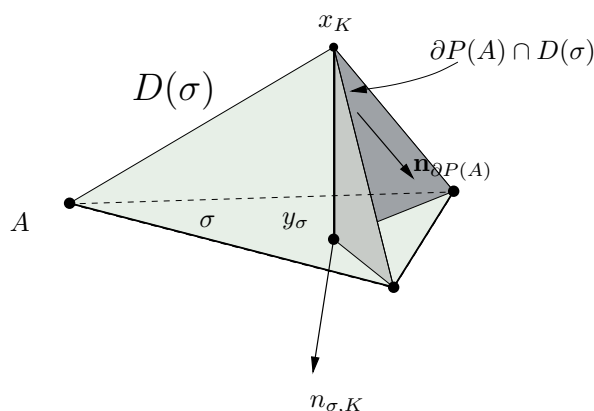


FIGURE 4. Construction du gradient discret : caractérisation de $\partial P(A) \cap D(\sigma)$ pour une cellule diamant $D(\sigma)$ au bord

Supposons pour fixer les idées que $\sigma \in \delta K$ est une interface au bord, et que σ est triangulaire de sommets A , B et C .

Le bord de $D(\sigma)$ se décompose en six faces triangulaires : $\partial D(\sigma) = Ax_K B \cup Ay_\sigma B \cup Bx_K C \cup \dots$. Chacune de ces faces est incluse dans un simplex $T \in \mathcal{T}$ de sorte que ϕ est affine sur ces faces. On a donc, par exemple :

$$\int_{Ax_K B} \phi(s) \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} ds = \frac{1}{3} (\phi(A) + \phi(x_K) + \phi(B)) \int_{Ax_K B} \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} ds .$$

Cette formulation permet d'écrire $(\nabla_h \phi)_\sigma$ en fonction des valeurs de ϕ aux sommets $A \in \mathcal{V}$ et aux centres des cellules primales et des interfaces au bord.

En la développant, puis en rassemblant les termes en $\phi(x_K)$ et en $\phi(A)$ on obtient les expressions :

$$\frac{1}{3} \phi(x_K) \int_{I_{x_K}} \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} \quad , \quad \frac{1}{3} \phi(A) \int_{I_A} \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} ,$$

avec $I_A, I_{x_K} \subset \partial D(\sigma)$.

En utilisant alors le fait que sur un polyèdre S on a $\int_{\partial S} \mathbf{n}_{\partial S} ds = 0$, ces expressions se réécrivent exactement comme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \phi(x_K) \int_{I_{x_K}} \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} &= -\frac{1}{3} \phi(x_K) \int_{\sigma} \mathbf{n}_{\sigma, K} ds = -\frac{1}{3} \phi(x_K) |\sigma| \\ \frac{1}{3} \phi(A) \int_{I_A} \mathbf{n}_{\partial D(\sigma)} &= -\frac{1}{3} \phi(A) \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds , \end{aligned}$$

dont on déduit les formulations (3.2) (153). □

3.3. Opérateur divergence discret.

PROPOSITION 3.2. *Pour un champ de vecteur discret $X \in L^2(\mathcal{D})$ on définit sa divergence discrète sur la cellule primale $K \in \mathcal{C}$ et sur la cellule duale $P(A)$ par :*

$$(155) \quad (\operatorname{div}_h X)_K = \frac{1}{|K|} \int_{\partial K} X(s) \cdot \mathbf{n}_{\partial K} ds$$

$$(156) \quad (\operatorname{div}_h X)_A = \frac{1}{|P(A)|} \int_{\partial P(A)} X(s) \cdot \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds .$$

Ainsi définie la divergence discrète de X vérifie un analogue de la formule de la divergence :

$$(157) \quad \sum_{K \in \mathcal{C}} (\operatorname{div}_h X)_K |K| = \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| = \frac{1}{d-1} \sum_{A \in \mathcal{V}} (\operatorname{div}_h X)_A |P(A)| ,$$

de sorte que la divergence discrète de X vérifie la propriété (147). On définit donc bien un opérateur :

$$\operatorname{div}_h : L^2(\mathcal{D}) \longrightarrow \mathcal{F}(\mathcal{M}) .$$

Pratiquement cette définition de la divergence discrète se réécrit de la manière suivante :

pour une cellules primales $K \in \mathcal{C}$:

$$(158) \quad (\operatorname{div}_h X)_K = \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \delta K} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\sigma, K} |\sigma| ;$$

et pour une cellule duale $P(A)$:

$$(159) \quad (\operatorname{div}_h X)_A = \frac{1}{|P(A)|} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma} X_\sigma \int_{\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds .$$

Pour les cellules duales, cette définition fait intervenir :

- l'ensemble $\{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma\}$ des interfaces qui ont A parmi leurs sommets.
- la partie du bord de $P(A)$, $\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}$. Pour recomposer tout le bord d'une cellule duale $P(A)$ au bord du domaine, il est nécessaire de considérer son intersection avec les fermeture $\overline{D(\sigma)}$ des cellules diamants. On a alors en effet (voir figure 5),

$$(160) \quad \partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)} = (\partial P(A) \cap D(\sigma)) \cup (\partial P(A) \cap \sigma \cap \partial \Omega) .$$

DÉMONSTRATION DE 3.2. On démontre la formule de la divergence discrète (157) pour un champ de vecteurs discret $X \in L^2(\mathcal{D})$.

En sommant sur les cellules primales :

$$\sum_{K \in \mathcal{C}} (\operatorname{div}_h X)_K |K| = \sum_{K \in \mathcal{C}} \sum_{\sigma \in \delta K} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\sigma, K} |\sigma|$$

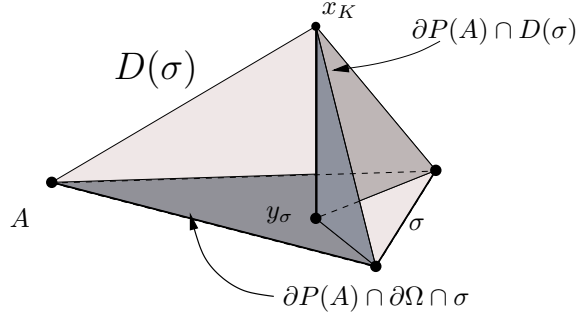


FIGURE 5. Caractérisation de la partie $\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}$ pour une interface au bord

en échangeant les signes sommes, les termes portant sur des interfaces internes s'annulent et il reste,

$$\sum_{K \in \mathcal{C}} (\operatorname{div}_h X)_K |K| = \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma|$$

Pour les cellules duales on a de la même façon,

$$\begin{aligned} \sum_{A \in \mathcal{V}} (\operatorname{div}_h X)_A |P(A)| &= \sum_{A \in \mathcal{V}} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma} X_\sigma \int_{\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds \\ &= \sum_{\sigma \in \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \int_{\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds . \end{aligned}$$

Pour tout sommet $A \in \mathcal{V}$ on a :

$$\sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds = 0 .$$

comme pour les sommets sur le bord on a (voir figure 5),

$$\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)} = (\partial P(A) \cap D(\sigma)) \cup (\partial P(A) \cap \partial \Omega \cap \sigma) ,$$

il reste exactement :

$$\sum_{A \in \mathcal{V}} (\operatorname{div}_h X)_A |P(A)| = \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} |\partial P(A) \cap \sigma| = (d-1) \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| ,$$

le coefficient $d-1$ traduisant le fait qu'en dimension 2 les éléments $\partial P(A) \cap \sigma$ recouvrent exactement une fois $\partial \Omega$ alors qu'en dimension 3 ils le recouvrent deux fois. \square

4. Formule de Green discrète

Dans le cas continu la formule de Green exprime une forme de "dualité" entre les opérateurs divergence et gradient. Si X est un champ

de vecteurs et ϕ une fonction – de régularité H^1 – sur un ouvert régulier et borné Ω :

$$\int_{\Omega} \nabla \phi \cdot X \, dx = - \int_{\Omega} \phi \operatorname{div} X \, dx + \int_{\partial\Omega} \operatorname{Tr} \phi \operatorname{Tr} X \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} \, ds .$$

Algébriquement cette formule peut se réécrire à l’aide des produits scalaires sur $L^2(\Omega)$ et $L^2(\partial\Omega)$:

$$(\nabla \phi, X)_{L^2(\Omega)^d} = - (\phi, \operatorname{div} X)_{L^2(\Omega)} + (\operatorname{Tr} \phi, \operatorname{Tr} X \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega})_{L^2(\partial\Omega)} .$$

Les opérateurs divergence, gradient et trace discrets présentent une relation de “*dualité*” analogue (formule de Green discrète). Cette formule de Green a été établie par Hermeline [62] et par Domelevo et Omnès [38] pour des maillages en dimension 2, on étend ici cette formule au cas des maillages en dimension 3.

Cette propriété algébrique des opérateurs discrets, adjointe aux propriétés du noyau du gradient discret étudiées en 5, permettra d’établir les propriétés élémentaires des opérateurs elliptiques discrétisés : symétrie et inversibilité (chapitres 9 et 10).

PROPOSITION 4.1 (Formule de Green discrète). *Soient $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ et $X \in L^2(\mathcal{D})$ une fonction volumes finis dérivable et un champ de vecteurs discrets sur un maillage DDFV \mathcal{M} du domaine Ω . On a la relation de dualité suivante :*

(161)

$$(\nabla_h \phi, X)_{L^2(\mathcal{D})} = - \langle \operatorname{div}_h X, \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} + (\operatorname{Tr}_h \phi, X \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega})_{L^2(\partial\Omega)} ,$$

où la fonction $X \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} \in L^2(\delta\mathcal{S})$ est définie pour chaque interface au bord $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ par :

$$(X \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega})_{\sigma} = X_{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\sigma} ,$$

et où les produits $(\cdot, \cdot)_{L^2(\mathcal{D})}$, $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F} \times P^1}$ et $(\cdot, \cdot)_{L^2(\partial\Omega)}$ sont définis respectivement en (145), (148) et (146).

DÉMONSTRATION. Soient $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ et $X \in L^2(\mathcal{D})$ une fonction volumes finis dérivable et un champ de vecteurs discrets.

Le produit scalaire de X et $\nabla_h \phi$ sur $L^2(\mathcal{D})$ s’écrit :

$$(162) \quad (\nabla_h \phi, X)_{L^2(\mathcal{D})} = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}} (\nabla_h \phi)_{\sigma} \cdot X_{\sigma} |D(\sigma)| ,$$

et le gradient discret de ϕ sur la cellule diamant $D(\sigma)$ s’écrit,

– pour une interface interne $\sigma = K|L$:

$$|D(\sigma)| (\nabla_h \phi)_{\sigma} = \frac{1}{d} (\phi(x_L) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma, K} - \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ,$$

– pour une interface $\sigma \in \delta\mathcal{S}$ au bord, $\sigma \in \delta K$:

$$|D(\sigma)| (\nabla_h \phi)_{\sigma} = \frac{1}{d} (\phi(y_{\sigma}) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma, K} - \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \phi(A) \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ,$$

Si l'on développe chaque terme de la somme (162) en y injectant l'expression ci dessus du gradient discret et que l'on réorganise les termes en une somme sur les cellules primales et une somme sur les cellules duales on obtient une décomposition de (162) en deux termes

$$(\nabla_h \phi, X)_{L^2(\mathcal{D})} = T_C + T_V .$$

Le terme T_C sur les cellules primales s'écrit,

$$\begin{aligned} T_C &= -\frac{1}{d} \sum_{K \in \mathcal{C}} \phi(x_K) \sum_{\sigma \in \delta K} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\sigma, K} |\sigma| + \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} \frac{1}{d} \phi(y_\sigma) X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| \\ &= -\frac{1}{d} \sum_{K \in \mathcal{C}} \phi(x_K) (\operatorname{div}_h X)_K |K| + \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} \frac{1}{d} \phi(y_\sigma) X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| \end{aligned}$$

Le terme T_V de (162) sur les sommets s'écrit,

$$T_V = -\frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}} \phi(A) \sum_{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma} X_\sigma \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds .$$

Pour faire apparaître la divergence discrète sur les cellules duales (définie par (159)), il faut faire porter l'intégrale à droite de la précédente égalité sur $\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}$.

On rappelle la décomposition (160) du bord des cellules duales (voir figure 5),

$$\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)} = (\partial P(A) \cap D(\sigma)) \cup (\partial P(A) \cap \sigma \cap \partial \Omega) .$$

de sorte que l'on a :

$$\int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds = \int_{\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds - \int_{\partial P(A) \cap \sigma \cap \partial \Omega} \mathbf{n}_{\partial \Omega} ds .$$

Le terme T_V se réécrit donc comme

$$\begin{aligned} T_V &= -\frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}} \phi(A) \sum_{\sigma \in \mathcal{S}, A \in \sigma} X_\sigma \int_{\partial P(A) \cap \overline{D(\sigma)}} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds + \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \partial \Omega} \phi(A) \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}, A \in \sigma} X_\sigma \int_{\partial P(A) \cap \sigma} \mathbf{n}_\sigma ds \\ &= -\frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}} \phi(A) (\operatorname{div}_h X)_A |P(A)| + \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma \sum_{A \in \mathcal{V}, A \in \sigma} \frac{1}{d} \phi(A) |\partial P(A) \cap \sigma| . \end{aligned}$$

Avec la définition (151) de la trace on a donc exactement :

$$T_C + T_V = -\langle \operatorname{div}_h X, \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} + \sum_{\sigma \in \delta \mathcal{S}} (\operatorname{Tr}_h \phi)_\sigma X_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| .$$

ce qui achève la preuve de (161). \square

5. Noyau de l'opérateur gradient discret

Avec la formule de Green discrète (161) une seconde propriété algébrique sur les opérateurs discrets – "l'injectivité" du gradient discret – sera utilisée dans les chapitres suivants pour étudier les propriétés des schémas DDFV.

La démonstration de ces résultats est simple mais technique. On commence donc par en faire un résumé.

Dans le cas continu une fonction $\phi \in H^1(\Omega)$ qui vérifie $\nabla\phi = 0$ est une fonction constante.

Dans le cas discret on veut caractériser les fonctions $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ telles que $\nabla_h\phi = 0$.

- (1) Dans le cas de la dimension 2, Domelevo et Omnès [38] ont montré que si une fonction $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $\nabla_h\phi = 0$ alors il existe deux constantes C_1 et C_2 telles que (proposition 5.1) :

$$(163) \quad \forall K \in \mathcal{C}, \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S} : \quad \phi(x_K) = C_1 = \phi(y_\sigma)$$

$$(164) \quad \forall A \in \mathcal{V} : \quad \phi(A) = C_2 .$$

- (2) En dimension 3, pour un maillage dont les interfaces sont triangulaires, on a exactement le même résultat qu'en dimension 2 (proposition 5.2).
- (3) En dimension 3, pour un maillage dont les interfaces sont quadrangulaires, si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $\nabla_h\phi = 0$ alors (163) reste vrai. Par contre l'ensemble \mathcal{V} des sommets se scinde en deux sous ensembles \mathcal{V}_1 et \mathcal{V}_2 tels que (proposition 5.3) :

$$\forall A \in \mathcal{V}_1 : \quad \phi(A) = C_2 \quad , \quad \forall A \in \mathcal{V}_2 : \quad \phi(A) = C_3 ,$$

éventuellement \mathcal{V}_2 est vide.

Pour établir ces propriétés, on commence par dériver une formulation du gradient discret, dite formulation "différentielle", en 5.1. Cette formulation permettra de caractériser le noyau du gradient discret en 5.2.

5.1. Formulation "différentielle" du gradient discret. Dans le cas de la dimension 2, la formulation du gradient discret se simplifie. Pour une interface $\sigma = K|L$ de sommets A, B orientés comme sur la figure 6 on a :

$$\int_{\partial P(B) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(B)} = |x_K x_L| \mathbf{m}_{\sigma, K} = - \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ,$$

où $\mathbf{m}_{\sigma, K}$ est la normale unitaire à $[x_K, x_L]$ orientée de sorte que $\mathbf{n}_{\sigma, K} \cdot \mathbf{m}_{\sigma, K} > 0$.

On retrouve alors l'expression du gradient discret telle que formulée dans [33, 34, 62, 38] :

$$(165) \quad 2|D(\sigma)| (\nabla_h\phi)_\sigma = (\phi(x_L) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma, K} + (\phi(B) - \phi(A)) |x_K x_L| \mathbf{m}_{\sigma, K} .$$

Cette formulation, équivalente à (153), correspond bien à l'idée de gradient dans la mesure où elle porte sur les différences entre les valeurs prises par ϕ aux sommets de la cellule diamant D_σ : on parlera pour cela de formulation différentielle.

Des formulations comparables en dimension 3 sont déduites dans le cas d'interfaces triangulaires ou quadrangulaires.

5.1.1. *Cas d'une interface triangulaire.* On considère une interface σ de sommets A, B, C .

La formulation différentielle de ∇_h sur $D(\sigma)$ fait intervenir les trois triangles T_A, T_B et T_C représentés sur la figure 6 et définis comme : pour une interface interne $\sigma = K|L$,

$$T_S = x_K S x_L \quad \text{pour } S = A, B, C .$$

et pareillement pour une interface au bord $\sigma \in \delta K$ en changeant x_L

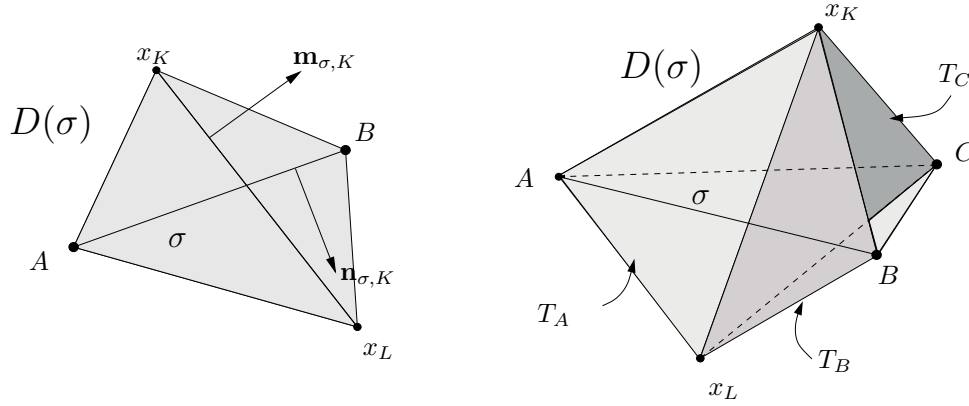


FIGURE 6. Éléments géométriques pour la formulation différentielle du gradient discret.

en y_σ .

On considère ensuite les trois vecteurs unitaires $\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B, \mathbf{m}_C$ normaux respectivement aux triangles T_A, T_B, T_C et orientés de telle sorte que :

- \mathbf{m}_A pointe de B vers C ,
- \mathbf{m}_B pointe de C vers A ,
- \mathbf{m}_C pointe de A vers B .

LEMME 5.1. *Pour une interface σ triangulaire de sommets A, B et C , et avec les conventions d'écriture précisées ci dessus, le gradient discret s'écrit :*

si $\sigma = K|L$ est une interface interne :

(166)

$$3|D(\sigma)|(\nabla_h \phi)_\sigma = (\phi(x_L) - \phi(x_K))|\sigma|\mathbf{n}_{\sigma,K} + (\phi(B) - \phi(C))|T_A|\mathbf{m}_A \\ + (\phi(C) - \phi(A))|T_B|\mathbf{m}_B + (\phi(A) - \phi(B))|T_C|\mathbf{m}_C ,$$

si $\sigma \in \delta K$ est une interface au bord, on a la même formulation en changeant x_L en y_σ .

5.1.2. *Cas d'une interface quadrangulaire.* On considère une interface de sommets A, B, C, D tels que A et C soient opposés.

On a alors :

$$(167) \quad \begin{aligned} \mathbf{m}_A &= \int_{\partial P(A) \cap \mathcal{D}(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds = - \int_{\partial P(C) \cap \mathcal{D}(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(C)} ds \\ \mathbf{m}_B &= \int_{\partial P(B) \cap \mathcal{D}(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(B)} ds = - \int_{\partial P(D) \cap \mathcal{D}(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(D)} ds . \end{aligned}$$

On en déduit la formulation différentielle du gradient discret dans ce cas :

LEMME 5.2. *Pour une interface quadrangulaire de sommets A, B, C, D où A et C sont opposés, le gradient discret s'écrit sur $D(\sigma)$: pour une interface interne*

$$(168) \quad \begin{aligned} 3 |D(\sigma)| (\nabla_h \phi)_\sigma &= (\phi(x_L) - \phi(x_K)) |\sigma| \mathbf{n}_{\sigma, K} \\ &\quad + (\phi(A) - \phi(C)) \mathbf{m}_A + (\phi(B) - \phi(D)) \mathbf{m}_B , \end{aligned}$$

et pareillement pour une interface au bord, $\sigma \in \delta K$ en changeant x_L en y_σ .

5.2. Noyau du gradient discret. En dimension 2, si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $(\nabla_h \phi)_\sigma = 0$ pour une interface $\sigma \in \delta K$ de sommets A et B , la formulation (165) assure que, les vecteurs $\mathbf{n}_{\sigma, K}$ et $\mathbf{m}_{\sigma, K}$ étant indépendants :

- si $\sigma = K|L$ on a $\phi(x_K) = \phi(x_L)$ et $\phi(A) = \phi(B)$,
- si σ est une interface au bord on a $\phi(x_K) = \phi(y_\sigma)$ et $\phi(A) = \phi(B)$.

On en déduit la caractérisation des fonctions de gradient discret égal à 0 :

PROPOSITION 5.1. *Soit \mathcal{M} un maillage DDFV en dimension 2.*

Si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $\nabla_h \phi = 0$ alors il existe deux constantes $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ telles que :

$$(169) \quad \begin{aligned} \forall K \in \mathcal{C}, \forall \sigma \in \delta \mathcal{S} : \quad &\phi(x_K) = C_1 = \phi(y_\sigma) \\ \forall A \in \mathcal{V} : \quad &\phi(A) = C_2 . \end{aligned}$$

5.2.1. *Maillages à interfaces triangulaires.* Le résultat précédent s'étend au cas de maillage en dimension 3 dont toutes les interfaces sont de géométrie triangulaire.

PROPOSITION 5.2. *Soit \mathcal{M} un maillage DDFV en dimension 3 dont toutes les interfaces sont triangulaires.*

Si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $\nabla_h \phi = 0$ alors il existe deux constantes $C_1, C_2 \in \mathbb{R}$ telles que :

$$(170) \quad \begin{aligned} \forall K \in \mathcal{C}, \forall \sigma \in \delta \mathcal{S} : \quad &\phi(x_K) = C_1 = \phi(y_\sigma) \\ \forall A \in \mathcal{V} : \quad &\phi(A) = C_2 . \end{aligned}$$

DÉMONSTRATION. Soit $\sigma = K|L$ une interface interne. On considère, avec les mêmes conventions d'écriture, les sommets A, B, C de σ et les vecteurs associés $\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B$ et \mathbf{m}_C illustrés par la figure 6. Ces vecteurs sont dans le plan orthogonal à $(x_K x_L)$ et sont donc en somme directe avec la normale $\mathbf{n}_{\sigma, K}$ à l'interface σ .

Par conséquent si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $(\nabla_h \phi)_\sigma = 0$, la formulation (166) assure que :

$$\begin{aligned} \phi(x_L) - \phi(x_K) &= 0 \\ (\phi(B) - \phi(C)) |T_A| \mathbf{m}_A + (\phi(C) - \phi(A)) |T_B| \mathbf{m}_B + (\phi(A) - \phi(B)) |T_C| \mathbf{m}_C &= 0. \end{aligned}$$

Pour conclure à (170) il faut montrer que les vecteurs $\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B$ et \mathbf{m}_C forment un système de rang 2.

Pour cela on introduit les trois vecteurs :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_A &= \int_{\partial P(A) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(A)} ds = |T_C| \mathbf{m}_C - |T_B| \mathbf{m}_B \\ \mathbf{n}_B &= \int_{\partial P(B) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(B)} ds = |T_A| \mathbf{m}_A - |T_C| \mathbf{m}_C \\ \mathbf{n}_C &= \int_{\partial P(C) \cap D(\sigma)} \mathbf{n}_{\partial P(C)} ds = |T_B| \mathbf{m}_B - |T_A| \mathbf{m}_A. \end{aligned}$$

Comme sur le bord d'un polyèdre S on a $\int_{\partial S} \mathbf{n}_{\partial S} ds = 0$, \mathbf{n}_A peut s'écrire comme :

$$\mathbf{n}_A = \int_{Bx_K C \cup Bx_L C} \mathbf{n}_{D(\sigma)} ds \in (BC)^\perp,$$

et de même, $\mathbf{n}_B \in (CA)^\perp$ et $\mathbf{n}_C \in (AB)^\perp$.

D'après ce qui précède on a donc :

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_A &\in (BC)^\perp \cap (x_K x_L)^\perp = ((BC) \oplus (x_K x_L))^\perp \\ \mathbf{n}_B &\in (CA)^\perp \cap (x_K x_L)^\perp = ((CA) \oplus (x_K x_L))^\perp \\ \mathbf{n}_C &\in (AB)^\perp \cap (x_K x_L)^\perp = ((AB) \oplus (x_K x_L))^\perp, \end{aligned}$$

par conséquent $\{\mathbf{n}_A, \mathbf{n}_B, \mathbf{n}_C\}$ est de rang 2 exactement, et donc $\mathbf{m}_A, \mathbf{m}_B$ et \mathbf{m}_C également ; ce qui achève la preuve de la proposition. \square

5.2.2. *Maillages à interfaces quadrangulaires.* Dans ce cas le résultat 5.1 de la dimension 2 n'est plus vrai. Une fonction volumes finis dérivable $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ dont le gradient discret est nul prend une valeur constante sur les centres des cellules primales et des interfaces au bord mais ne prend plus une valeur constante sur les sommets.

Précisément l'ensemble \mathcal{V} des sommets du maillage \mathcal{M} peut être scindé en deux sous ensembles distincts \mathcal{V}_1 , et \mathcal{V}_2 ,

$$\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 \cup \mathcal{V}_2,$$

de la manière suivante :

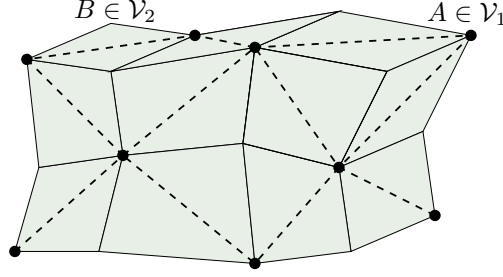


FIGURE 7. Séparation de l'ensemble \mathcal{V} des sommets en deux sous ensembles $\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2$: les points reliés par des lignes pointillées figurent les sommets dans \mathcal{V}_1

- fixant un sommet $A \in \mathcal{V}$, on définit \mathcal{V}_1 comme l'ensemble des sommets dans \mathcal{V} qui peuvent être reliés à A par une suite de segments qui sont tous des diagonales d'interface $\sigma \in \mathcal{S}$ (voir figure 7),
- \mathcal{V}_2 est alors défini par $\mathcal{V}_2 = \mathcal{V} - \mathcal{V}_1$.

Deux cas de figure peuvent alors se produire :

- (1) $\mathcal{V}_2 \neq \emptyset$, alors si B est un point quelconque de \mathcal{V}_2 , \mathcal{V}_2 est exactement égal à l'ensemble des sommets de \mathcal{V} qui peuvent être reliés à B par une suite de segments qui sont tous des diagonales d'interface $\sigma \in \mathcal{S}$. Dans ce cas \mathcal{V}_1 et \mathcal{V}_2 ont le même nombre de sommets.

Ce cas se présente en particulier dès que \mathcal{M} est le maillage d'un domaine Ω simplement connexe.

- (2) $\mathcal{V}_2 = \emptyset$, ce cas peut se présenter (éventuellement) pour des maillages \mathcal{M} de domaines Ω non simplement connexes.

Dans ce cas la proposition 5.2 sur le noyau de ∇_h s'applique.

On se placera par la suite dans le cas 1.

PROPOSITION 5.3. *Soit \mathcal{M} un maillage DDFV en dimension 3 dont toutes les interfaces sont quadrangulaires.*

Si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $\nabla_h \phi = 0$ alors il existe trois constantes C_1, C_2 et C_3 telles que :

$$(171) \quad \begin{aligned} \forall K \in \mathcal{C}, \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S} : \quad \phi(x_K) = C_1 = \phi(y_\sigma), \\ \forall A \in \mathcal{V}_1 : \quad \phi(A) = C_2 \quad \text{et} \quad \forall A \in \mathcal{V}_2 : \quad \phi(A) = C_3. \end{aligned}$$

DÉMONSTRATION. Soit $\sigma \in \mathcal{S}$ une interface du maillage de sommets A, B, C et D avec A et C opposés. Dans la formulation (168) du gradient discret sur la cellule diamant $D(\sigma)$, il est facile de voir que les vecteurs \mathbf{m}_A et \mathbf{m}_B vérifient :

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_A &\in (DB)^\perp \cap (x_K x_L)^\perp = ((DB) \oplus (x_K x_L))^\perp, \\ \mathbf{m}_B &\in (AC)^\perp \cap (x_K x_L)^\perp = ((AC) \oplus (x_K x_L))^\perp, \end{aligned}$$

de sorte qu'ils engendrent le plan perpendiculaire à $(x_K x_L)$ et sont en somme directe avec $\mathbf{n}_{\sigma,K}$.

Par conséquent si $\phi \in P^1(\mathcal{M})$ vérifie $(\nabla_h \phi)_\sigma = 0$, alors on a :

$$\phi(A) = \phi(C) \quad \text{et} \quad \phi(B) = \phi(D) ,$$

ce qui prouve la proposition 5.3. □

Application à la résolution d'EDP elliptiques

On étudie ici l'utilisation des opérateurs gradient et divergence discret pour la résolution de problèmes elliptiques :

- dans un premier temps à l'équation de Poisson,

$$(172) \quad \operatorname{div} \left(\tilde{G} \nabla \phi \right) = f ,$$

pour un tenseur \tilde{G} “de conductivité” continu et pour une condition limite de type Neumann/Dirichlet mixte.

L'utilisation du schéma DDFV pour ce type de problème a déjà été étudiée en dimension 2 par Hermeline [62] qui a établi numériquement la convergence du schéma sur des maillages déformés. Domelevo et Omnès [38] ont prouvé la convergence de la méthode dans le cas d'un tenseur de conductivité isotrope et pour une condition limite Dirichlet homogène.

- dans un second temps à l'équation de Poisson pour un tenseur \tilde{G} présentant une discontinuité dans le domaine (problème de transmission “standard”). Ce problème a également été étudié par Hermeline [63] sur des maillages déformés.

L'étude de ces deux cas est motivée par l'objectif final de résolution du modèle bidomaine (du coeur seul ou du système coeur+thorax couplé) au chapitre 10.

Le premier cas intervient dans le modèle bidomaine du coeur seul quand une partie de sa surface est reliée par un électrode à la masse.

Le second cas intervient dans la résolution du modèle bidomaine couplé coeur+thorax, on montrera au chapitre 10 que ce modèle peut se réécrire sous la forme d'un problème de transmission.

D'autres utilisations des schémas DDFV sont à noter. Andrelanov *et al.* [4] ont étudié l'application du schéma DDFV pour des problèmes elliptiques non linéaires (du type Leray-Lions) et ont en particulier démontré la convergence de la solution approchée ainsi que de son gradient discret vers la solution exacte et son gradient. Delcourte *et al.* ont également appliqué cette méthode à l'équation de Stokes.

1. Schéma DDFV pour l'équation de Poisson

On construit ici un schéma de résolution numérique de l'équation de Poisson (172) à partir des opérateurs gradient et divergence discret définis en 3.2 et 3.3.

On considère (172) sur un domaine borné et connexe $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$ de forme polygonale ou polyédrale selon la dimension. On recherche une solution ϕ satisfaisant une condition limite mixte Neumann/Dirichlet homogène : on considère une sous partie du bord $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ de mesure en dimension $d - 1$ non nulle – dite partie à la masse – sur laquelle :

$$(173) \quad \phi|_{\Gamma_0} = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_0$$

$$(174) \quad \tilde{G} \nabla \phi \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega - \Gamma_0,$$

ce cadre comprend évidemment le cas Dirichlet homogène lorsque $\Gamma_0 = \partial\Omega$.

Le tenseur de conductivité \tilde{G} ,

$$\tilde{G} : \bar{\Omega} \mapsto \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d,$$

est continu sur $\bar{\Omega}$ et symétrique défini positif en chaque point de $\bar{\Omega}$. On supposera de plus que \tilde{G} est uniformément elliptique ; ce qui assure l'existence de solutions faibles pour (172) (174) lorsque $f \in L^2(\Omega)$.

Afin d'approcher les solutions de (172) (174) on se donne un maillage DDFV \mathcal{M} du domaine Ω .

1.1. Discrétisation du problème.

1.1.1. *Modélisation de la masse Γ_0 .* On suppose que la partie au bord du domaine reliée à la masse Γ_0 est composée de la réunion d'interfaces au bord :

$$(175) \quad \Gamma_0 = \bigcup_{\sigma \in \delta\mathcal{S}, \sigma \subset \Gamma_0} \sigma,$$

Comme une interface est fermée, les sommets des interfaces à la masse seront aussi considérés comme reliés à la masse.

1.1.2. *Discrétisation du tenseur de conductivité.* On forme à partir du tenseur de conductivité \tilde{G} dans le cas continu un tenseur de conductivité discret G constant sur chacune des cellules diamants $D(\sigma) \in \mathcal{D}$ du maillage \mathcal{M} :

$$G : x \in D(\sigma) \mapsto G(\sigma) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d.$$

On définira G sur $D(\sigma)$ par la valeur moyenne de \tilde{G} sur $D(\sigma)$,

$$G(\sigma) = \frac{1}{|D(\sigma)|} \int_{D(\sigma)} \tilde{G} dx,$$

en particulier le tenseur discret G est symétrique et défini positif sur chaque cellule diamant par hypothèse sur \tilde{G} .

1.1.3. *Discrétisation des conditions limites.* On recherchera une approximation de la solution de (172) dans un sous espace de $P^1(\mathcal{M})$ dont les éléments vérifient au sens discret les conditions limites (173) (174).

DÉFINITION 1.1 (Espace $P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$). *On considère le sous espace $P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M}) \subset P^1(\mathcal{M})$ formé des fonctions volumes finis dérivables ϕ telles que :*

$$(176) \quad \forall A \in \mathcal{V} : \quad A \in \Gamma_0 \Rightarrow \phi(A) = 0$$

$$(177) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S} : \quad \sigma \subset \Gamma_0 \Rightarrow \phi(y_\sigma) = 0$$

$$(178) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S} : \quad \sigma \not\subset \Gamma_0 \Rightarrow G(\sigma) (\nabla_h \phi)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = 0 .$$

La donnée de $\phi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ est équivalente à la donnée des valeurs de ϕ aux centres des cellules primales et aux sommets non reliés à la masse, c'est à dire de

$$\left\{ (\phi(x_K))_{K \in \mathcal{C}} , \quad (\phi(A))_{A \in \mathcal{V}, A \notin \Gamma_0} \right\} .$$

En effet, si $\sigma \in \delta K$ est une interface au bord, et si les valeurs de ϕ sont connues en chacun des sommets de σ et au centre x_K de K , alors la condition $G(\sigma) (\nabla_h \phi)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = 0$ détermine $\phi(y_\sigma)$ de manière unique.

L'espace $P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ a donc pour dimension :

$$(179) \quad \dim P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M}) = \#\mathcal{C} + \#\{A \in \mathcal{V}, A \notin \Gamma_0\} .$$

1.2. Schéma de résolution, symétrie et inversibilité. Pour $f \in L^2(\Omega)$ on définit $f \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$ (que l'on note également f) :

$$(180) \quad \forall K \in \mathcal{C} : \quad f_K = \frac{1}{|K|} \int_K f \, dx \quad \text{et} \quad \forall A \in \mathcal{V} : \quad f_A = \frac{1}{|P(A)|} \int_{P(A)} f \, dx .$$

On propose alors le schéma suivant pour la résolution de (172) (174), on recherche $\phi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ vérifiant l'équation (172) au sens discret suivant :

$$(181) \quad \forall K \in \mathcal{C} : \quad \operatorname{div}_h (G \nabla_h \phi)_K = f_K$$

$$(182) \quad \forall A \in \mathcal{V} , \quad A \notin \Gamma_0 : \quad \operatorname{div}_h (G \nabla_h \phi)_A = f_A .$$

Les conditions aux limites (173) (174) sont implicitement prises en compte (au sens discret) en cherchant ϕ dans le sous espace $P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M}) \subset P^1(\mathcal{M})$.

THÉORÈME 1.1 (Inversibilité et symétrie). *Pour $f \in L^2(\Omega)$ il existe une unique fonction $\phi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ qui satisfasse le schéma (181) (182).*

Plus précisément ce schéma est symétrique et défini négatif dans le sens suivant :

$$\forall \phi, \psi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M}),$$

$$(183) \quad \langle \operatorname{div}_h (G \nabla_h \phi) , \psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = \langle \operatorname{div}_h (G \nabla_h \psi) , \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} ,$$

$\forall \phi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ telle que $\phi \neq 0$,

$$(184) \quad \langle \operatorname{div}_h(G\nabla_h\phi), \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} < 0 .$$

DÉMONSTRATION. Pour $\phi, \psi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ on a, en appliquant la formule de Green discrète :

$$\langle \operatorname{div}_h(G\nabla_h\phi), \psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = - (G\nabla_h\phi, \nabla_h\psi)_{L^2(\mathcal{D})} + (\operatorname{Tr}_h\psi, G\nabla_h\phi \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega})_{L^2(\Omega)} .$$

Comme $\phi, \psi \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$, le terme de bord est nul et par symétrie de G on a :

$$\langle \operatorname{div}_h(G\nabla_h\phi), \psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = - (\nabla_h\phi, G\nabla_h\psi)_{L^2(\mathcal{D})} = \langle \operatorname{div}_h(G\nabla_h\psi), \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} ,$$

ce qui prouve (183).

En prenant $\psi = \phi$ dans l'équation précédente on obtient par positivité de G :

$$\langle \operatorname{div}_h(G\nabla_h\phi), \phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = - (G\nabla_h\phi, \nabla_h\phi)_{L^2(\mathcal{D})} \leq 0 .$$

Supposons que $(G\nabla_h\phi, \nabla_h\phi)_{L^2(\mathcal{D})} = 0$.

G étant partout défini positif, on en déduit que $\nabla_h\phi = 0$.

Comme les valeurs de ϕ sur les sommets reliés à la masse et sur les centres des interfaces à la masse sont nulles, les propositions 5.1, 5.2 et 5.3 caractérisant le noyau de ∇_h assurent que $\phi = 0$; ce qui prouve (184).

Cette dernière propriété implique que le schéma (181) (182) est injectif. L'égalité (179) sur la dimension de $P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$ assure qu'il est aussi surjectif; ce qui prouve la première partie du théorème. \square

2. Schéma DDFV pour un problème de transmission standard

On présente ici l'utilisation de schémas DDFV pour la résolution numérique d'un problème de transmission entre deux sous domaines du domaine Ω .

Ce problème peut être vu comme l'EDP elliptique de Poisson (172) dans le cas où le tenseur \tilde{G} présente une discontinuité entre deux sous domaines du domaine Ω . On le présentera cependant comme deux problèmes elliptiques sur chacun des sous domaines couplés par des relations de couplage sur l'interface entre ces sous domaines.

2.1. Présentation du problème. On se donne une décomposition du domaine Ω en deux sous domaines T et H telle que le sous domaine H soit à l'intérieur de Ω (voir figure 1) :

$$(185) \quad \Omega = T \cup H \cup \partial H \quad , \quad \overline{H} \subset \Omega$$

On considère deux problèmes elliptiques dans chacun des sous domaines T et H d'inconnues ϕ_T et ϕ_H ,

$$\phi_T : T \mapsto \mathbb{R} \quad , \quad \phi_H : H \mapsto \mathbb{R} ,$$

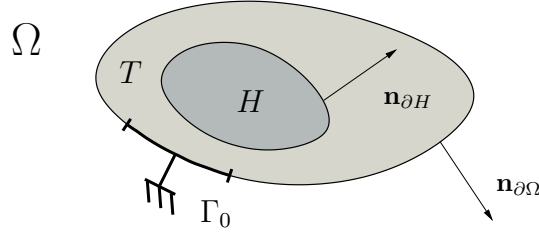


FIGURE 1. Décomposition du domaine Ω en deux sous domaines T et H

s'écrivant,

$$(186) \quad \operatorname{div}(G_T \nabla \phi_T) = f|_T$$

$$(187) \quad \operatorname{div}(G_H \nabla \phi_H) = f|_H,$$

et vérifiant les relations de couplage sur l'interface ∂H entre T et H ,

$$(188) \quad \phi_T|_{\partial H} = \phi_H|_{\partial H}$$

$$(189) \quad G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_H \nabla \phi_H \cdot \mathbf{n}_{\partial H},$$

exprimant la continuité du potentiel et du flux de courant au passage de l'interface entre les deux sous domaines.

On impose également une condition limite pour ϕ_T sur le bord $\partial\Omega$ du domaine de type mixte Neumann/Dirichlet homogène,

$$(190) \quad \phi_T|_{\Gamma_0} = 0$$

$$(191) \quad G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega - \Gamma_0,$$

où $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ désigne la partie du bord de Ω reliée à la masse (Γ_0 est supposé être de mesure en dimension $d-1$ non nulle). On suppose ainsi qu'il n'y a pas de fuite de courant entre le domaine Ω et l'extérieur à travers $\partial\Omega - \Gamma_0$.

Les seconds membres dans (186) (187) sont donnés par $f \in L^2(\Omega)$ dont $f|_T, f|_H$ désignent les restrictions à T et H respectivement.

Les tenseurs de conductivité G_T et G_H ,

$$G_T : \bar{T} \mapsto \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d, \quad G_H : \bar{H} \mapsto \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d,$$

sont supposés être symétriques définis positifs en chaque point, uniformément elliptiques et de régularité C^1 sur \bar{T}, \bar{H} respectivement.

Par contre ces tenseurs peuvent ne pas être continus au passage de l'interface ∂H .

Le problème (186) (191) a une solution Φ unique (au sens variationnel faible) dans le sous espace $H_{\Gamma_0}^1(\Omega)$ des fonctions H^1 sur Ω dont la trace sur Γ_0 est nulle.

Notant ϕ_T et ϕ_H les restrictions de Φ à H et T :

- la relation de couplage (188) est satisfaite au sens de la trace sur ϕ_T, ϕ_H ,

- Si ∂H est régulier et $f \in L^2(\Omega)$ alors ϕ_T et ϕ_H sont de régularité H^2 et (189) a également lieu au sens de la trace.

2.2. Discrétisation du problème.

2.2.1. *Sous maillages.* On considère un maillage *DDFV* \mathcal{M} du domaine Ω que l'on suppose être *adapté* à la décomposition (185) de Ω dans le sens suivant :

$$(192) \quad \partial H = \bigcup_{\sigma \in \mathcal{S}, \sigma \subset \partial H} \sigma .$$

Cette hypothèse permet de définir deux *sous maillages* \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H de \mathcal{M} qui sont respectivement des maillages *DDFV* de T et H .

DÉFINITION 2.1. *A partir d'un maillage DDFV $\mathcal{M} = (\mathcal{C}, \mathcal{S}, \mathcal{V})$ de Ω satisfaisant (192) on définit deux maillages $\mathcal{M}_H = (\mathcal{C}_H, \mathcal{S}_H, \mathcal{V}_H)$ et $\mathcal{M}_T = (\mathcal{C}_T, \mathcal{S}_T, \mathcal{V}_T)$ de H et T respectivement par :*

$$\mathcal{C}_T = \{K \in \mathcal{C}, K \subset T\} , \quad \mathcal{S}_T = \{\sigma \in \mathcal{S}, \sigma \subset \bar{T}\} \text{ et } \quad \mathcal{V}_T = \{A \in \mathcal{V}, A \in \bar{T}\} ,$$

$\mathcal{C}_H, \mathcal{S}_H$ et \mathcal{V}_H étant définis symétriquement par rapport à H .

Définissons les centres des cellules primales et des interfaces au bord pour \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H :

- le centre d'une cellule primale de \mathcal{M}_T ou de \mathcal{M}_H est le centre de la cellule correspondante de \mathcal{M} ,
- le centre d'une interface de \mathcal{M}_T au bord de $\partial\Omega$ est le centre de l'interface correspondante de \mathcal{M} ,
- le centre d'une interface $\sigma = K|L \subset \partial H$ (pour deux cellules primales de \mathcal{M}) est défini par :

$$y_\sigma = (x_K x_L) \cap \sigma .$$

Les sous maillages \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H ainsi définis on introduit relativement à ces sous maillages :

- les ensembles de cellules diamants \mathcal{D}_H et \mathcal{D}_T , les cellules diamants de \mathcal{M}_H et \mathcal{M}_T seront notées $D_H(\sigma)$ et $D_T(\sigma)$,
- les ensembles de cellules duales \mathcal{P}_H et \mathcal{P}_T , les cellules duales DE \mathcal{M}_H et \mathcal{M}_T seront notées $p_H(\sigma)$ et $p_T(\sigma)$,
- les espaces fonctionnels discrets relatifs à ces maillages, notamment les espaces $P^1(\mathcal{M}_H)$ et $P^1(\mathcal{M}_T)$ des fonctions volumes finis dérivables sur H et T ,
- les opérateurs discrets relatifs à ces espaces fonctionnels.

Les cellules diamants et duales des maillages \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H sont en fait simplement données par :

$$P_T(A) = P(A) \cap T \quad , \quad D_T(\sigma) = D(\sigma) \cap T .$$

Géométriquement, les cellules diamants et les cellules duales de \mathcal{M}_T (ou \mathcal{M}_H) relatives à des interfaces ou des sommets non situés sur ∂H sont égales à la cellule correspondante de \mathcal{M} .

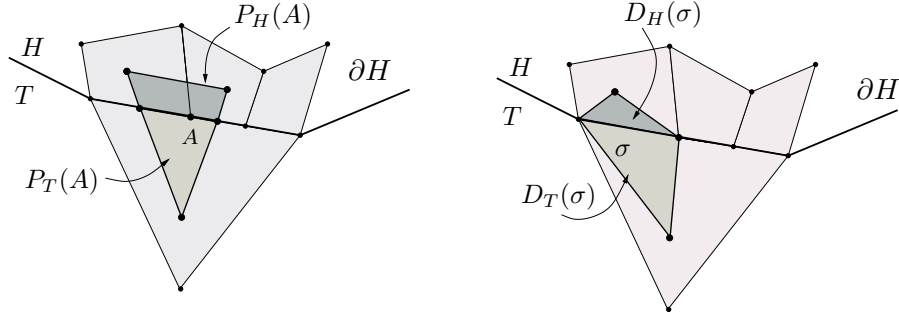


FIGURE 2. Cellules diamants et cellules duales de \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H relatives à des interfaces ou sommets sur ∂H

Par contre sur l'interface on a, pour $A \in \partial H$ et $\sigma \subset \partial H$ (voir figure 2) :

$$P(A) = P_T(A) \cup P_H(A) \quad , \quad D(\sigma) = D_T(\sigma) \cup D_H(\sigma) .$$

2.2.2. *Discrétisation de la masse, des tenseurs.* On discrétise la partie du bord reliée à la masse comme dans la section précédente, en supposant qu'elle est formée de la réunion d'interfaces au bord.

On introduit deux tenseurs discrets G_T et G_H définis relativement aux maillages \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H et constants sur les cellules diamants de \mathcal{M}_T et \mathcal{M}_H respectivement.

Comme dans la section précédente, ces tenseurs discrets sont définis en moyennant sur les cellules diamants les tenseurs du problème continu. Les tenseurs discrets sont donc symétriques et définis positifs sur chaque cellule diamant.

2.2.3. *Discrétisation des relations de couplage et des conditions limites.* On recherchera une approximation de la solution de (186) (191) dans un espace \mathcal{E}_0 de fonctions continues et affines par morceaux dont les éléments vérifient au sens discret les relations de couplage (188) (189) sur ∂H , ainsi que les conditions limites (190) (191) sur $\partial\Omega$

DÉFINITION 2.2 (Espace \mathcal{E}_0). On définit l'espace \mathcal{E}_0 des fonctions Φ continues sur Ω vérifiant :

$$(193) \quad \Phi|_T = \phi_T \in P^1(\mathcal{M}_T) \quad , \quad \Phi|_H = \phi_H \in P^1(\mathcal{M}_H) ,$$

tel que ϕ_T satisfait au sens discret les conditions limites (190) (191) sur $\partial\Omega$,

$$(194) \quad \forall A \in \mathcal{V} : \quad A \in \Gamma_0 \Rightarrow \phi_T(A) = 0$$

$$(195) \quad \forall \sigma \in \mathcal{S} : \quad \sigma \subset \Gamma_0 \Rightarrow \phi_T(y_\sigma) = 0$$

$$(196) \quad \forall \sigma \in \mathcal{S} : \quad \sigma \subset \partial\Omega - \Gamma_0 \Rightarrow G_T(\sigma) (\nabla_h \phi_T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = 0 .$$

et tel que ϕ_T et ϕ_H satisfont la relation de couplage (191) sur $\partial\Omega$,
(197)

$$\forall \sigma \in \mathcal{S} : \quad \sigma \subset \partial H \Rightarrow G_T(\sigma) (\nabla_h \phi_T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_H(\sigma) (\nabla_h \phi_H)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H} ,$$

la relation de couplage (190) étant implicitement prise en compte en supposant que Φ est continue.

La donnée de Φ est équivalente à la donnée de ses valeurs sur les centres des cellules primales de \mathcal{M} et sur les sommets de \mathcal{M} non reliés à la masse :

$$\left\{ (\Phi(x_K))_{K \in \mathcal{C}} , \quad (\Phi(A))_{A \in \mathcal{V}, A \notin \Gamma_0} \right\} .$$

En effet, ces valeurs étant fixées, la fonction ϕ_T (vérifiant (194) (195) (196)) et la fonction ϕ_H sont bien définies, à part leurs valeurs sur les centres y_σ des interfaces $\sigma \subset \partial H$. Il existe alors une unique valeur pour $\phi_T(y_\sigma) = \phi_H(y_\sigma)$ telle que la relation de couplage (197) soit satisfaite.

L'espace \mathcal{E}_0 a donc pour dimension :

$$(198) \quad \dim \mathcal{E}_0 = \#\mathcal{C} + \#\{A \in \mathcal{V}, A \notin \Gamma_0\} .$$

2.3. Schéma de résolution, symétrie et inversibilité.

2.3.1. *Définition du système.* Pour $\Phi \in \mathcal{E}_0$ on note $\phi_T \in P^1(\mathcal{M}_T)$ et $\phi_H \in P^1(\mathcal{M}_H)$ les restrictions de Φ à T et H respectivement.

On définit l'opérateur D sur l'espace \mathcal{E}_0 par :

$\forall K \in \mathcal{C}$:

$$(199) \quad K \subset H : \quad (D\Phi)_K = \operatorname{div}_h (G_H \nabla_h \phi_H)_K$$

$$(200) \quad K \subset T : \quad (D\Phi)_K = \operatorname{div}_h (G_T \nabla_h \phi_T)_K ,$$

$\forall A \in \mathcal{V}, A \notin \Gamma_0$:

$$(201) \quad A \in H : \quad (D\Phi)_A = \operatorname{div}_h (G_H \nabla_h \phi_H)_A$$

$$(202) \quad A \in \bar{T} - \partial H : \quad (D\Phi)_A = \operatorname{div}_h (G_T \nabla_h \phi_T)_A ,$$

$$(203) \quad A \in H : \quad (D\Phi)_A = \frac{|P_T(A)|}{|P(A)|} \operatorname{div}_h (G_T \nabla_h \phi_T)_A + \frac{|P_H(A)|}{|P(A)|} \operatorname{div}_h (G_H \nabla_h \phi_H)_A$$

On étend alors la définition (148) du crochet de dualité $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F} \times P^1}$ par :

$\forall \Phi, \Psi \in \mathcal{E}_0$,

$$\langle D\Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = \frac{1}{d} \sum_{K \in \mathcal{C}} (D\Phi)_K \Psi(x_K) |K| + \frac{1}{d} \sum_{A \in \mathcal{V}} (D\Phi)_A \Psi(A) |P(A)| .$$

2.3.2. *Définition du schéma.* Pour $f \in L^2(\Omega)$ on définit :

$$(204) \quad \forall K \in \mathcal{C} : f_K = \frac{1}{|K|} \int_K f \, dx \quad \text{et} \quad \forall A \in \mathcal{V} : f_A = \frac{1}{|P(A)|} \int_{P(A)} f \, dx .$$

On propose alors le schéma suivant pour la résolution de (186) (191) on recherche $\Phi \in \mathcal{E}_0$:

$$(205) \quad \forall K \in \mathcal{C} : (D\Phi)_K = f_K$$

$$(206) \quad \forall A \in \mathcal{V}, \quad A \notin \Gamma_0 : (D\Phi)_A = f_A .$$

THÉORÈME 2.1 (Inversibilité et symétrie). *Pour $f \in L^2(\Omega)$ il existe une unique fonction $\Phi \in \mathcal{E}_0$ qui satisfasse le schéma (205) (206).*

Plus précisément ce schéma est symétrique et défini négatif dans le sens suivant :

$$\forall \Phi, \Psi \in \mathcal{E}_0,$$

$$(207) \quad \langle D\Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = \langle D\Psi, \Phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} ,$$

$$\forall \Phi \in \mathcal{E}_0 \text{ telle que } \Phi \neq 0,$$

$$(208) \quad \langle D\Phi, \Phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} < 0 .$$

DÉMONSTRATION. Soient $\Phi, \Psi \in \mathcal{E}_0$, on note $\phi_H, \psi_H \in P^1(\mathcal{M}_H)$ et $\phi_T, \psi_T \in P^1(\mathcal{M}_T)$ leurs restrictions respectives à H et T .

Par définition de l'opérateur D et du crochet de dualité $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{F} \times P^1}$, on a tout d'abord :

$$\langle D\Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = \langle \operatorname{div}_h(G_H \nabla_h \phi_H), \psi_H \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} + \langle \operatorname{div}_h(G_T \nabla_h \phi_T), \psi_T \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} .$$

En appliquant la formule de Green discrète sur \mathcal{M}_H on a :

$$(209) \quad \begin{aligned} \langle \operatorname{div}_h(G_H \nabla_h \phi_H), \psi_H \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} &= - (G_H \nabla_h \phi_H, \psi_H)_{L^2(\mathcal{D})} \\ &+ (G_H \nabla_h \phi_H \cdot \mathbf{n}_{\partial H}, \operatorname{Tr}_h \psi_H)_{L^2(\partial H)} \end{aligned}$$

Puis en appliquant la formule de Green discrète sur \mathcal{M}_T :

$$(210) \quad \begin{aligned} \langle \operatorname{div}_h(G_T \nabla_h \phi_T), \psi_T \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} &= - (G_T \nabla_h \phi_T, \psi_T)_{L^2(\mathcal{D})} \\ &+ (G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial T}, \operatorname{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial T)} \end{aligned}$$

Comme le bord de T se décompose en $\partial T = \partial\Omega \cup \partial H$, et que sur ∂H on a $\mathbf{n}_{\partial T} = -\mathbf{n}_{\partial H}$, le terme de bord dans l'égalité précédente se réécrit :

$$\begin{aligned} (G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial T}, \operatorname{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial T)} &= (G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}, \operatorname{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial\Omega)} \\ &- (G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H}, \operatorname{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial H)} \end{aligned}$$

Le premier terme de bord est nul d'après les conditions limites (194) (196) vérifiées par ϕ_T et ψ_T sur $\partial\Omega$:

$$(G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega}, \operatorname{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial\Omega)} = 0 .$$

Par continuité de Ψ et avec la relation de couplage (197) satisfaite par ϕ_T et ϕ_H sur ∂H , le second terme de bord vérifie :

$$(G_T \nabla_h \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H}, \text{Tr}_h \psi_T)_{L^2(\partial H)} = (G_H \nabla_h \phi_H \cdot \mathbf{n}_{\partial H}, \text{Tr}_h \psi_H)_{L^2(\partial H)} .$$

Ainsi en additionnant les égalités (209) (210) on obtient exactement :

$$(211) \quad \langle D\Phi, \Psi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = - (G_H \nabla_h \phi_H, \psi_H)_{L^2(\mathcal{D})} - (G_T \nabla_h \phi_T, \psi_T)_{L^2(\mathcal{D})} ,$$

ce qui, avec la symétrie de G_H et de G_T , prouve (207).

L'égalité (207) prouve également que $\langle D\Phi, \Phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} \leq 0$.

Les tenseurs G_H et G_T étant définis positifs sur chaque cellule duale, (207) assure que si $\langle D\Phi, \Phi \rangle_{\mathcal{F} \times P^1} = 0$, alors $\nabla_h \phi_T = 0$ et $\nabla_h \phi_H = 0$. Comme ϕ_T est nulle sur les sommets et les centres des interfaces à la masse, les propositions 5.1, 5.2 et 5.3 caractérisant le noyau de ∇_h assurent que $\phi_T = 0$.

La continuité de Φ implique que ϕ_H est nulle sur les sommets et les centres d'interfaces sur ∂H . Par conséquent on a aussi $\phi_H = 0$; ce qui prouve (208).

L'égalité (208) prouve que le schéma (205) (206) est injectif. L'égalité (198) sur la dimension de \mathcal{E}_0 montre qu'il est également surjectif; ce qui prouve la première partie du théorème. \square

CHAPITRE 10

Schéma DDFV pour le modèle bidomaine

Schéma DDFV pour le modèle bidomaine couplé coeur+thorax

1. Nomenclature et équations

On rappelle les quantités et notations pour le modèle bidomaine introduit aux chapitres 2 et 4.

Variables :

ϕ	potentiel	$[mV]$
V_m	potentiel de membrane	$[mV]$
C_m	capacité membranaire	$[\mu F.cm^{-2}]$
A_m	rapport d'aspect membranaire	$[cm^{-1}]$
G	tenseur de conductivité	$[mS.cm^{-1}]$
I_{ion}	courant ionique membranaire	$[\mu A]$
t	variable de temps	$[ms]$
x	variable d'espace	$[cm]$

Indices :

i	intra-cellulaire
e	extra-cellulaire
T	thorax

Sur le domaine Ω comprenant les sous domaines H et T occupés par le coeur et le thorax, le modèle se décompose entre un problème en espace et deux problèmes en temps.

Problème bidomaine en espace :

$$(212) \quad \operatorname{div}((G_i + G_e) \nabla \phi_e) = -\operatorname{div}(G_i \nabla V_m) \quad \text{sur } H$$

$$(213) \quad \operatorname{div}(G_T \nabla \phi_T) = 0 \quad \text{sur } T$$

avec les deux relations de couplage sur ∂H entre ϕ_e et ϕ_T décrites en 3,

$$(214) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur } \partial H$$

$$(215) \quad G_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial H} ,$$

ainsi que la condition limite sur ϕ_i au bord du coeur,

$$(216) \quad G_i \nabla \phi_e \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = -G_i \nabla V_m \cdot \mathbf{n}_{\partial H} ,$$

et avec les conditions limites sur $\partial\Omega$ obtenues en supposant qu'une sous partie $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ au bord du domaine est reliée par une électrode à la masse,

$$(217) \quad \phi_T = 0 \quad \text{sur} \quad \Gamma_0$$

$$(218) \quad G_T \nabla \phi_T \cdot \mathbf{n}_{\partial\Omega} = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega - \Gamma_0$$

Équation d'évolution sur V_m :

$$(219) \quad A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = -\text{div} (G_e \nabla \phi_e) \quad \text{dans} \quad H$$

Équation d'évolution sur I_{ion} en chaque point de H (voir chapitre 3) :

$$(220) \quad I_{ion} = I_{ion}(V_m, \mathbf{w}) \quad , \quad \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$$

$$(221) \quad \frac{d\mathbf{w}}{dt} = F(V_m, \mathbf{w}) \quad .$$

2. Existence de solutions

2.0.3. *Cas du coeur seul.* Dans ce cas on ne garde que les équations (212) et (219) (221) que l'on complète par des conditions limites de type Neumann sur V_m et ϕ_e au bord du coeur.

Colli-Franzone et Savaré [30] ont montré l'existence et l'unicité des solutions pour ce problème et établi des estimations sur la régularité de ces solutions dans le cas où l'équation sur les courants ioniques (221) est un modèle simplifié du type Fitzhugh-Nagumo introduit en 3.0.7. Leur approche se base sur la théorie des équations d'évolution dégénérées et utilise une formulation variationnelle de (212), (219) (221).

Cette analyse a été reprise par Sanfelici [104] qui a montré pour ce système la convergence d'une méthode de Galerkin semi discrétisée en espace.

Une seconde analyse type semi groupes est également envisageable dans le cas où le coeur est supposé être totalement isolé. C'est à dire tel que ϕ_e et ϕ_i vérifient une condition limite de Neumann homogène au bord du coeur. Dans ce cas l'équation (212) définit implicitement ϕ_e en fonction de V_m a une constante additive près. L'équation d'évolution (219) peut ainsi être réécrite en terme de V_m uniquement,

$$A_m (C_m \partial_t V_m + I_{ion}) = \mathcal{L} V_m \quad ,$$

où l'opérateur non local $\mathcal{L} : D(\mathcal{L}) \subset H^2(H) \mapsto L^2(H)$ apparaît formellement comme la moyenne harmonique des opérateurs $\text{div} (G_i \nabla \cdot)$ et $\text{div} (G_e \nabla \cdot)$.

Les propriétés de \mathcal{L} sont cependant mal connues et la question de savoir si \mathcal{L} est sectoriel est ouverte.

2.0.4. *Cas du problème couplé.* Peu d'études théoriques portent sur le problème bidomaine couplé. La résolution du problème bidomaine en espace sous la forme (212) (216) n'est déjà pas évidente.

Le problème bidomaine en espace a été davantage étudié dans le cadre des relations d'interface coeur/thorax définies en 3.2. Ces secondes relations de couplage permettent en effet de résoudre simplement le problème bidomaine en espace : en théorie à partir d'une formulation variationnelle dans $H^1(\Omega)$ et en pratique par des éléments finis P^1 .

Le problème bidomaine en espace est plus difficile à résoudre avec les relations de couplage (214) (216) considérées ici.

Il est possible de poser variationnellement ce problème dans $H^1(\Omega)$ en réinterprétant la condition non standard de flux sur l'interface comme une condition de dérivée oblique. Ces conditions de dérivé oblique (du type $\nabla\phi \cdot \mathbf{l} = g$ où \mathbf{l} vérifiant $\mathbf{l} \cdot \mathbf{n} > 0$ est une direction oblique non tangentielle) peuvent se traiter variationnellement en ajoutant un terme intégral de frontière dans la forme bilinéaire (voir par exemple [79]).

3. Résolution du problème bidomaine en espace

On se place dans le cadre géométrique de la section 2. On considère un maillage DDFV \mathcal{M} de Ω qui soit adapté à la décomposition du domaine Ω en deux sous domaines T et H . On désigne par \mathcal{M}_H et \mathcal{M}_T les sous maillages de \mathcal{M} sur H et T respectivement tels que définis en 2.2.

3.0.5. *Définitions des inconnues et du problème discret.* On recherche les inconnues $\phi_e \in P^1(\mathcal{M}_H)$ et $\phi_T \in P^1(\mathcal{M}_T)$ qui vérifient au sens discret les équations (212) (213) du problème bidomaine en espace,

$$(222) \quad \operatorname{div}_h((G_i + G_e)\nabla_h\phi_e) = -\operatorname{div}_h(G_i\nabla_h V_m) \quad \text{dans} \quad \mathcal{F}(\mathcal{M}_H)$$

$$(223) \quad \operatorname{div}_h(G_T\nabla_h\phi_T) = 0 \quad \text{dans} \quad \mathcal{F}(\mathcal{M}_T),$$

et les deux relations de couplage (214) (215) associées,

$$(224) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur} \quad \partial H$$

$$(225) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S}_H : (G_e\nabla_h\phi_e)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = (G_T\nabla_h\phi_T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H},$$

et les conditions limites (217) (218) sur le bord $\partial\Omega$ du domaine :

$$(226) \quad \forall A \in \mathcal{V} : A \in \Gamma_0 \Rightarrow \phi_T(A) = 0$$

$$(227) \quad \forall \sigma \in \mathcal{S} : \sigma \subset \Gamma_0 \Rightarrow \phi_T(y_\sigma) = 0$$

$$(228) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S} : \sigma \not\subset \Gamma_0 \Rightarrow (G_T\nabla_h\phi_T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = 0$$

3.0.6. *Calcul du second membre $-\operatorname{div}_h(G_i\nabla_h V_m)$ de (222).* Dans ce problème V_m est une donnée. Pour que le second membre de (222) soit défini, V_m doit être donné sur les centres des cellules primales, des cellules duales et des interfaces au bord de \mathcal{M}_H .

Cependant V_m est dirigé par l'équation d'évolution discrétisée

$$(229) \quad A_m(C_m\partial_t V_m + I_{ion}) = -\operatorname{div}_h(G_e\nabla_h\phi_e),$$

qui ne permet de définir V_m que sur les cellules duales et primales de \mathcal{M}_H .

Les valeurs de V_m sur les centres des interfaces au bord seront donc traitées comme des inconnues.

Ces inconnues sont définies implicitement à partir de la condition limite (216) discrétisée :

$$(230) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S}_H : (G_i \nabla_h \phi_e)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = - (G_i \nabla_h V_m)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma .$$

A partir de l'extension $\tilde{V}_m \in P^1(\mathcal{M}_H)$ de V_m définie par

$$(231) \quad \forall K \in \mathcal{T}_H : \quad \tilde{V}_m(x_K) = V_m(x_K)$$

$$(232) \quad \forall A \in \mathcal{V}_H : \quad \tilde{V}_m(A) = V_m(A)$$

$$(233) \quad \forall \sigma \in \delta\mathcal{S}_H : \quad \left(G_i \nabla_h \tilde{V}_m \right)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma = 0 ,$$

et à partir de la condition limite (230), le second membre de (222) est défini par :

(1) pour une cellule primale K ou duale $P(A)$ non au bord,

$$(234) \quad -\operatorname{div}_h (G_i \nabla_h V_m)_K = -\operatorname{div}_h \left(G_i \nabla_h \tilde{V}_m \right)_K$$

$$(235) \quad -\operatorname{div}_h (G_i \nabla_h V_m)_A = -\operatorname{div}_h \left(G_i \nabla_h \tilde{V}_m \right)_A ,$$

(2) pour une cellule duale K située sur le bord ∂H ,

$$(236) \quad -\operatorname{div}_h (G_i \nabla_h V_m)_K = -\operatorname{div}_h \left(G_i \nabla_h \tilde{V}_m \right)_K \\ + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \delta\mathcal{S}_H \cap \delta K} (G_i \nabla_h \phi_e)_\sigma \cdot \mathbf{n}_\sigma |\sigma| ,$$

(3) pour une cellule primale $P(A)$ située au bord,

$$(237) \quad -\operatorname{div}_h (G_i \nabla_h V_m)_A = -\operatorname{div}_h \left(G_i \nabla_h \tilde{V}_m \right)_A \\ + \frac{1}{|K|} \sum_{\sigma \in \delta\mathcal{S}_H, A \in \sigma} (G_i \nabla_h \phi_e)_\sigma \cdot \int_{\sigma \cap \partial P(A)} \mathbf{n}_{\partial H} ds ,$$

3.0.7. *Réécriture sous forme d'un problème de transmission standard.* La donnée de V_m sur les cellules primales et duales de \mathcal{M}_H ainsi que la condition limite (230) permet de définir le second membre de (222) à partir des définitions (234) (237).

Introduisant le tenseur de conductivité discret G_H sur \mathcal{M}_H ,

$$(238) \quad G_H(\sigma) = \begin{cases} G_i(\sigma) + G_e(\sigma) & \text{si } \sigma \not\subset \partial H \\ G_e(\sigma) & \text{si } \sigma \subset \partial H \end{cases} ,$$

on réécrit l'équation (222) à partir des définitions (234) (237) du second membre.

Les termes de bord dans (234) (237) se simplifient et l'on obtient simplement :

$$(239) \quad \operatorname{div}_h(G_H \nabla_h \phi_e) = -\operatorname{div}_h(G_i \nabla_h \widetilde{V}_m) \quad \text{dans } \mathcal{F}(\mathcal{M}_H) .$$

Et ce problème est couplé avec le thorax par les équations

$$(240) \quad \operatorname{div}(G_T \nabla \phi_T) = 0 \quad \text{dans } \mathcal{F}(\mathcal{M}_T)$$

$$(241) \quad \phi_e = \phi_T \quad \text{sur } \partial H$$

$$(242)$$

$$\forall \sigma \in \delta \mathcal{S}_H : (G_H \nabla_h \phi_e)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H} = (G_T \nabla_h \phi_T)_\sigma \cdot \mathbf{n}_{\partial H}$$

3.0.8. *Conclusion.* A partir du tenseur de conductivité modifié G_H donné par (238) et de l'extension $\widetilde{V}_m \in P^1(\mathcal{M}_H)$ de V_m donnée par (231) (233), la formulation discrétisée du problème bidomaine en espace se réécrit exactement comme un problème de transmission standard (239) (242), complété par les conditions limites (226) (230).

Les résultats de la section 2 s'appliquent à cette formulation. Il existe par conséquent une unique fonction continue affine par morceaux Φ définie sur Ω dont les restrictions à T et H vérifient

$$(243) \quad \Phi|_H = \phi_e \in P^1(\mathcal{M}_H) \quad , \quad \Phi|_T = \phi_T \in P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M}_T) ,$$

où ϕ_e et ϕ_T vérifient (231) (233) et où ϕ_T vérifie en outre les conditions limites sur $\partial\Omega$ (226) (230).

Pratiquement la donnée de Φ est équivalente à la donnée du vecteur formé par les valeurs de Φ aux centres des cellules primales et sur les sommets non à la masse :

$$(244) \quad \Phi = \begin{cases} \Phi(x_K) \quad , & K \in \mathcal{T} \\ \Phi(A) \quad , & A \in \mathcal{V}, \quad A \notin \Gamma_0 \end{cases} .$$

Le problème bidomaine en espace discrétisé se réécrit alors sous forme d'un système linéaire sur \mathbb{R}^N ,

$$(245) \quad A(\overline{\mathcal{G}}) \Phi = b(V_m) ,$$

la taille N du système étant égale au nombre total de sommets non reliés à la masse et de cellules primales du maillage \mathcal{M} :

$$N = \#\mathcal{C} + \#\{A \in \mathcal{V} \mid A \notin \Gamma_0\} .$$

De plus si l'on effectue le changement de base consistant à pondérer chaque vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^N par la mesure de la cellule primale ou duale correspondante dans \mathcal{M} (changement de base diagonal), alors la matrice du système à résoudre est symétrique définie et négative.

Résultats numériques

1. Implémentation pratique

On applique ici pratiquement les schémas DDFV, décrits au chapitre 10, à la résolution numérique du modèle bidomaine coeur+thorax. Sur un domaine Ω composé des deux sous domaines H (le coeur) et T (le thorax), le modèle est discrétisé sur un maillage DDFV \mathcal{M} adapté à cette décomposition de Ω . Les phénomènes décrits ont cours sur des échelles différentes dans le coeur et dans le thorax. Pour prendre en compte ces différences d'échelle, le maillage sera raffiné dans le sous domaine H . Sur ce maillage, les schémas numériques de résolution du modèle sont implémentés en FORTRAN 90.

A chaque pas de temps, la résolution s'effectue en trois étapes :

- (1) inversion du problème bidomaine en espace (245),
- (2) actualisation des courants ioniques en chaque points du coeur (220) (221),
- (3) intégration de l'équation d'évolution sur le potentiel transmembranaire (229).

1.1. Inversion du système linéaire. Notant V_m^n le vecteur formé du potentiel transmembranaire sur chaque cellules primales et duales du coeur ; et notant Φ^n le potentiel

$$\Phi^n = \begin{cases} \phi_e^n & \text{dans } H \\ \phi_T^n & \text{dans } T \end{cases} ,$$

donné aux sommets du maillage non reliés à la masse et aux centres des cellules primales, le modèle bidomaine en espace discrétisé s'écrit sous la forme d'un système linéaire à inverser :

$$(246) \quad A(\overline{G})\Phi^n = b(V_m^n),$$

où la matrice $A(\overline{G})$ est creuse et, à un changement de base diagonale près, symétrique définie et négative.

Puisqu'il est nécessaire de résoudre ce système à chaque pas de temps, il est impératif de bien choisir sa technique d'inversion. On comparera les deux méthodes suivantes :

- (1) Bigradient conjugué. Cet algorithme permettant d'inverser des systèmes linéaires non symétriques, il s'applique directement

à (246) sans symétrisation préalable de $A(\overline{G})$. On utilisera la méthode améliorée BICGSTAB.

- (2) une fois symétrisé, (246) peut être résolu par l'algorithme GM-Res. Cette symétrisation correspond simplement à une multiplication par une matrice diagonale qui peut être vue comme un préconditionneur.

Comme $A(\overline{G})$ est la discrétisation d'un opérateur non borné, le système à inverser est par nature mal conditionné. Ce mauvais conditionnement est augmenté par plusieurs facteurs. La condition limite sur le bord du thorax est proche d'une condition limite Neumann homogène et la plus petite valeur propre (en valeur absolue) de $A(\overline{G})$ est donc proche de zéro. Par ailleurs la géométrie du maillage, non structurée et faisant intervenir des éléments de dimensions différentes (voir figure 5), ainsi que l'anisotropie, contribuent également à ce mauvais conditionnement.

Par conséquent le calcul d'un bon préconditionneur peut fortement améliorer la convergence des schémas d'inversion de (246). De plus ce préconditionneur sera calculé une fois pour toutes en début de calcul de sorte que cette opération n'est pas pénalisante en terme de coût.

Tout d'abord, étant donné que le maillage \mathcal{M} est non structuré, la numérotation des ses éléments n'est pas du tout ordonnée et deux éléments géométriquement voisins ne seront pas en général voisins dans la matrice $A(\overline{G})$. Cette matrice a donc un profil distordu (voir figure 1). On construit un premier préconditionneur en renumérotant les éléments du maillage. L'opérateur de renumérotation est déterminé par l'algorithme de Cuthill-McKee symétrique inverse (SRCM). Le préconditionneur obtenu est une simple matrice de permutation, la multiplication par ce préconditionneur ainsi que son inversion sont très peu coûteuses. L'application de l'algorithme est illustré par la figure 1.

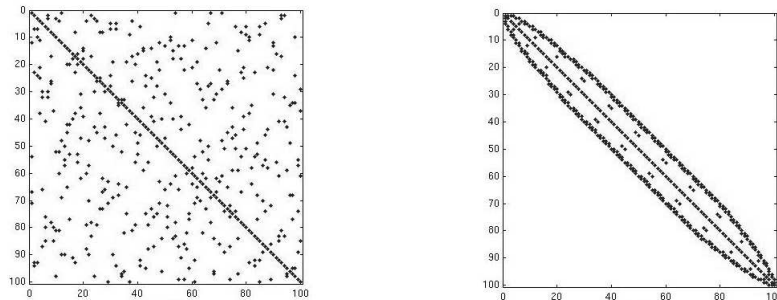


FIGURE 1. Profil de la matrice $A(\overline{G})$ avant (à gauche) et après (à droite) renumérotation.

Une fois ses éléments réordonnés, la matrice creuse $A(\overline{G})$ a un profil de matrice bande. Par conséquent un algorithme LU incomplet peut fournir un bon préconditionneur pour ce système.

Pour ces raisons on construit un préconditionneur pour la matrice $A(\overline{G})$ en commençant par la symétriser (pour le GMRes), en renumérotant les éléments puis en calculant la décomposition $ILU(p)$ de la matrice ainsi obtenue.

Une fois ce préconditionneur calculé, la résolution du système préconditionné nécessite désormais la multiplication par le préconditionneur en début de calcul et son inversion en fin de calcul (une fois l'algorithme convergé).

Le préconditionneur est une matrice creuse de même profil que $A(\overline{G})$ de sorte que la multiplication par le préconditionneur est peu coûteuse. Par contre son inversion sera d'autant plus coûteuse que l'indice p du ILU_p incomplet est grand. Pour cette raison on se limite au choix de p petit : $p = 0$ ou $p = 1$.

préconditionnement	aucun	ILU0	ILU1
BICGSTAB	43.8	7.1	6.9
GMRes	63.8	24.2	25.8

TABLE 1. Nombre moyen d'itérations nécessaires à l'inversion du problème bidomaine en espace (pour une erreur relative de $1E-3$) selon le préconditionnement.

Comparaison des algorithmes. Ces différents choix d'algorithmes d'inversion et de préconditionneurs sont testés sur même calcul effectué à partir du maillage illustré en figure 5 et comptant 17000 éléments.

L'influence du préconditionnement sur le nombre d'itérations moyen nécessaire à l'inversion du système (246) est d'abord évaluée pour les deux algorithmes d'inversion envisagés. La précision relative demandée pour l'inversion est de $1E-3$. Les résultats sont donnés dans la table 1 et illustrent la nécessité du préconditionnement. Par contre le préconditionneur ILU1 n'apporte pas d'avantage par rapport au préconditionneur ILU0 tout en étant plus coûteux à inverser.

On choisira par la suite un préconditionnement ILU0.

Le préconditionnement est en outre plus efficace pour l'algorithme BICGSTAB que pour le GMRes. La différence d'efficacité entre ces deux algorithmes s'accroît par ailleurs lorsque l'on augmente l'exigence sur la précision relative. La table 2 présente le temps CPU moyen nécessaire à 100 inversions du système (246) (avec préconditionnement ILU0), reportés selon la précision demandée.

Le temps de calcul requis par l'algorithme BICGSTAB a un comportement linéaire par rapport au logarithme de la précision. Par contre il est de plus en plus délicat de faire converger le GMRes lorsque la précision s'accroît.

Cette différence entre les deux algorithmes est probablement due à l'opération de symétrisation. La matrice de symétrisation est diagonale et ses valeurs propres sont les volumes des éléments du maillage. Le

volume de ces éléments est beaucoup plus petit dans le coeur que dans le thorax ce qui induit un mauvais conditionnement de l'opération de symétrisation.

Précision	1E-3	1E-5	1E-7
BICGSTAB	92	260	1012
GMRes	112	1253	non convergé

TABLE 2. Temps CPU comparé des méthodes BICGSTAB et GMRes (temps moyen pour 100 inversions avec préconditionneur ILU0) en fonction de la précision demandée.

Conclusion. Pratiquement, une précision lors de l'inversion de $1E-7$ nous a paru comme étant un minimum pour l'obtention de résultats de qualité.

Le choix de l'algorithme d'inversion est donc reporté sur le BICGSTAB avec préconditionneur ILU0.

1.2. Actualisation des courants ioniques. Le calcul des courants ioniques (détaillé au chapitre 3) nécessite le traitement de variables de porte et d'autres mécanismes (pompes, transporteurs et tampons). La plupart de ces mécanismes sont fortement dépendants d'autres variables (tel que le potentiel de membrane V_m). Il est évidemment fondamental de produire une bonne approximation de ces courants tout en évitant un coût en temps CPU excessif. La technique utilisée pour produire cette approximation dépendra donc des variables.

Les variables les plus délicates à traiter sont les variables de porte relatives au canal sodium rapide. Ce courant est responsable de la dépolarisation et les variables qui le dirigent ont des variations en temps rapides comparativement aux autres variables. Il est fondamental de calculer avec précision ce courant ionique ce qui impose une première contrainte sur le pas de temps. Durant la dépolarisation on utilisera un schéma Runge-Kutta d'ordre 4. En dehors de la zone de dépolarisation ces variables seront traitées comme les autres dans la mesure où leurs variations sont alors beaucoup moins importantes.

La plupart des variables de porte et des concentrations sont actualisées soit en utilisant un schéma d'Euler, soit en utilisant une formule analytique en supposant que V_m est constant entre deux pas de temps successifs. Cette hypothèse est particulièrement appropriée au traitement de la zone de repolarisation. Relativement au pas de temps, qui a été fixé par rapport au calcul dans la zone de dépolarisation, les variations de V_m dans la zone de repolarisation sont effectivement faibles.

Enfin, les quantités de calcium intra-cellulaire contenues dans les tampons sont calculées à partir des formules analytiques de Zeng *et al.* [118].

Il est à noter que le calcul des courants ioniques est purement local. Des simulations numériques profilées (voir 2) ont montré que, même en utilisant les modèles les plus sophistiqués utilisant le plus de variables, seule une petite partie du temps CPU total était requise pour l'actualisation des courants ioniques ; l'essentiel de ce temps étant utilisé lors de l'inversion du système linéaire. Par conséquent le choix d'un modèle ionique réaliste n'est pas pénalisant sur le temps de calcul.

2. Simulations numériques

2.1. Monodomaine : comparaison de schémas volumes finis. L'objectif de cette première simulation est de comparer les deux méthodes volumes finis précédemment décrites, les schémas volumes finis classiques sur des maillages admissibles de la partie 2 (que l'on notera schéma CFV en abrégé) et les schémas DDFV.

On se place dans le cadre simplifié du modèle monodomaine non couplé sur un domaine H circulaire de rayon 1 cm . Les fibres sont également circulaires et on impose une conductivité de 1 mS.cm^{-1} dans le sens de la fibre et de 0.1 mS.cm^{-1} dans la direction transverse.

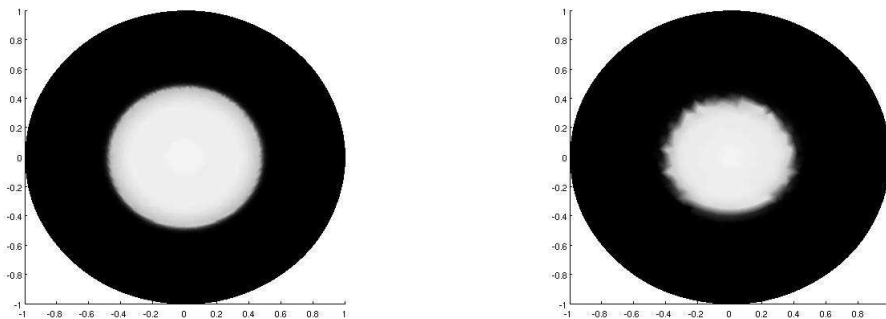


FIGURE 2. Onde circulaire : solution de référence (à gauche) et schéma DDFV (à droite).

A l'état initial le disque est entièrement polarisé et une stimulation est appliquée au centre du domaine à $t = 10\text{ ms}$. Cette impulsion génère une onde qui doit être circulaire. Une solution de référence est calculée sur un maillage très raffiné (comptant 69 800 éléments) à laquelle on compare des solutions calculées sur un maillage comptant 2120 éléments à partir du schéma DDFV (figure 2) et du schéma CFV (figure 3).

Comme sur un même maillage le schéma CFV utilise moins d'inconnues que le schéma DDFV, il est attendu qu'à maillage égal un schéma

DDFV soit plus précis qu'un schéma CFV. Afin de comparer des solutions obtenues à nombre d'inconnues comparable, on introduit un second maillage raffiné (comptant 4300 cellules primales). Le nombre d'inconnues pour le schéma CFV sur ce second maillage est supérieur au nombre d'inconnues du schéma DDFV sur le précédent maillage.

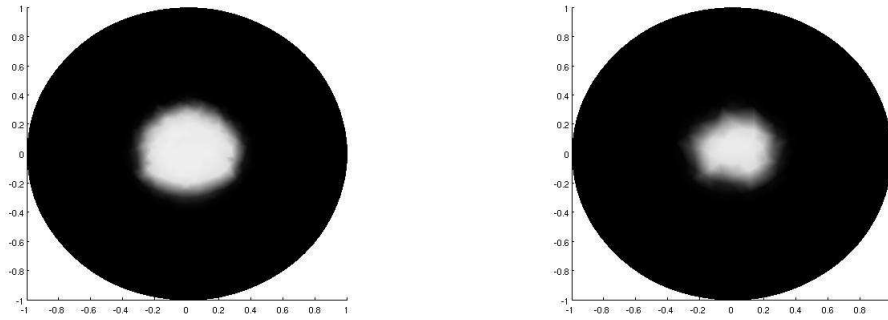


FIGURE 3. Ondes circulaire : schéma admissible ; maillage raffiné à gauche.

Il est clair au vu de la figure 3 que les résultats du schéma CFV ne constituent pas une bonne approximation de la solution de référence. La vitesse de propagation est plus faible qu'avec le schéma DDFV. La forme de l'onde est déformée selon les défauts du maillage et n'est pas circulaire. Cette déformation du profil de l'onde sera en outre accrue sur des maillages plus distordus. Par contre la solution donnée par le schéma DDFV est de meilleure qualité. Le profil de l'onde est quasi-circulaire, la déformation de ce profil étant de l'ordre de la taille des éléments du maillage. La vitesse de propagation est également plus proche de la vitesse réelle.

En plus de la possibilité d'inversion du problème bidomaine en espace, le schéma DDFV apparaît comme un bon choix pour la résolution du modèle monodomaine, notamment en ce qu'elle permet une bonne gestion de l'anisotropie du milieu.

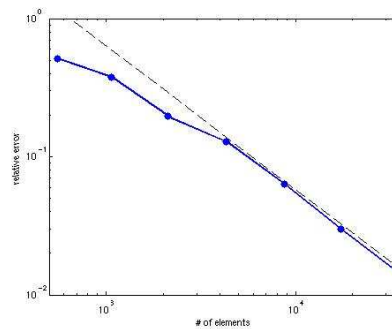


FIGURE 4. Convergence de la vitesse de propagation.

Afin d'évaluer la convergence du schéma DDFV, le calcul précédemment décrit a été reproduit sur une suite de maillages progressivement raffinés. Huit maillages ont été utilisés dont le nombre d'éléments (cellules +sommets) est respectivement 551, 1069, 2123, 4309, 8721, 17270, 34017 et 69780 (maillage de référence).

L'erreur relative commise sur la vitesse de propagation de l'onde circulaire est représentée en échelle logarithmique sur la figure 4.

A part le premier point, cette erreur relative a une forme linéaire caractéristique et l'ordre de la convergence est de 1.04.

2.2. Bidomaine : système couplé coeur+thorax en dimension 2. On présente ici l'application du modèle bidomaine couplé coeur+thorax sur une géométrie bidimensionnelle représentant une coupe transverse du thorax.

Sur cette géométrie plusieurs exemples de calculs sont présentés. Dans le but de faciliter leur comparaison, ces exemples sont tous obtenus à partir du même maillage, représenté sur la figure 5 : un coeur elliptique de 8×6 cm présentant une cavité ventriculaire est placé dans un thorax de 30×16 cm.

Les fibres musculaires cardiaques sont également elliptiques et placées autour de la cavité ventriculaire.

Le thorax sera considéré comme un milieu homogène de conductivité électrique isotrope et constante c_T .

Une électrode (de rayon 1 cm) reliée à la masse est placée sur le bord du thorax au milieu de sa partie nord-ouest. Le reste du bord du thorax est considéré comme électriquement isolé.

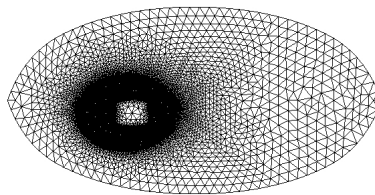


FIGURE 5. Structure du maillage

Les valeurs suivantes (table 2.2) des paramètres physiques sont utilisés (où c^l et c^t sont les conductivités dans les directions longitudinales et transverse à la fibre). Notamment les rapports d'anisotropie entre les milieux intra et extra-cellulaires diffèrent d'un facteur 3.

constante	valeur et unité	
A_m	2000	cm^{-1}
C_m	1.0	$\mu\text{F} \cdot \text{cm}^{-2}$
c_i^l	4.0	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_i^t	1.8	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_e^l	2.0	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_e^t	1.5	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$
c_T	2.4	$\text{mS} \cdot \text{cm}^{-1}$

TABLE 3. Paramètres physiques pour le modèle bidomaine

Les courants ioniques membranaires sont calculés à partir de la version améliorée du modèle Luo-Rudy 11 [84, 83] proposée par Faber et Rudy [47].

La stimulation du coeur se fera par l'application, en un ou deux points, d'un courant électrique appliqué dans le milieu extra-cellulaire. Les points de stimulation sont situés sur le grand axe du coeur au bord de la cavité ventriculaire.

2.2.1. *Simulation d'ECG normaux.* Pour cette simulation la stimulation électrique du coeur est appliquée toutes les 600 ms (correspondant à un rythme cardiaque de 100 pulsations par minute). Des ECG sont produits (figure 6) en enregistrant le potentiel thoracique au long de cette simulation en quatre points situés autour de la surface thoracique.

Dans un premier temps cette stimulation est appliquée en un seul point du coeur, situé sur le bord gauche de la cavité ventriculaire. La stimulation régulière du coeur se traduit par des ECG périodiques, dont la fréquence correspond effectivement à la fréquence de stimulation.

La forme globale de ces ECG permet d'identifier le complexe QRS, associé à la dépolarisation ventriculaire, ainsi que l'onde T, associée à sa repolarisation (voir chapitre 4).

La localisation de ces électrodes est déterminante dans la forme de l'ECG. Le complexe QRS (de même que l'onde T) pouvant être dirigée aussi bien vers le haut que vers le bas. Cette observation peut être mise en parallèle avec les ECG réels représentés figure 1.

Le mécanisme d'évolution du potentiel de membrane V_m dans le coeur ainsi que des potentiels Φ extra-cellulaires et thoraciques est représenté sur la figure 7. Initialement le coeur et le thorax sont au repos. La perturbation du potentiel extra-cellulaire ϕ_e suit la propagation de l'onde de dépolarisation de V_m . Le potentiel thoracique n'étant lié au potentiel extra-cellulaire que par les relations de couplage sur le bord du coeur, ϕ_T reste au repos tant que l'onde de dépolarisation

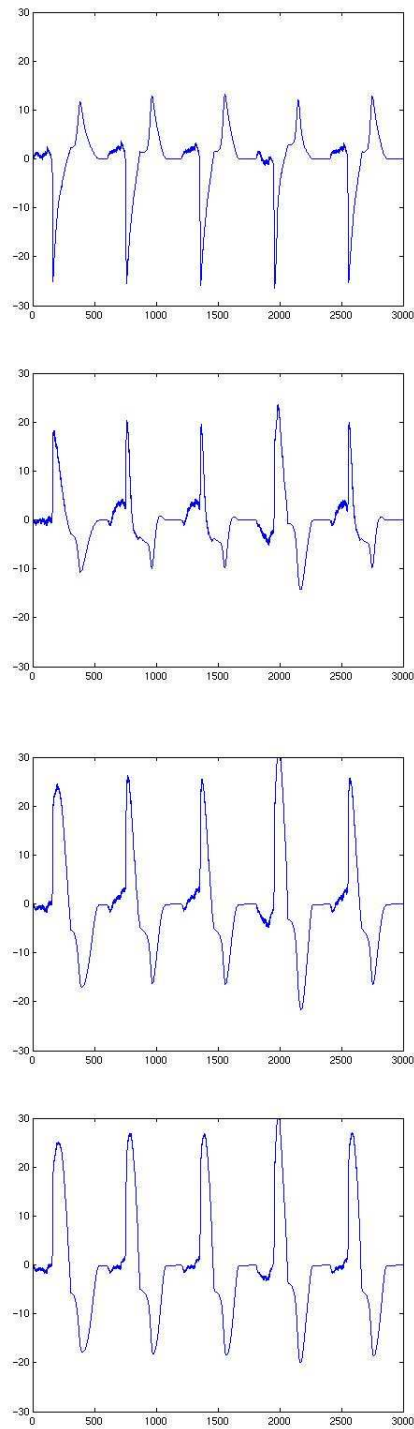


FIGURE 6. Simulation d'ECG, 1 point de stimulation.

n'a pas atteint le bord du coeur. Il subit par contre une brusque variation (correspondant au complexe QRS) lorsque l'onde de dépolarisation atteint le bord.

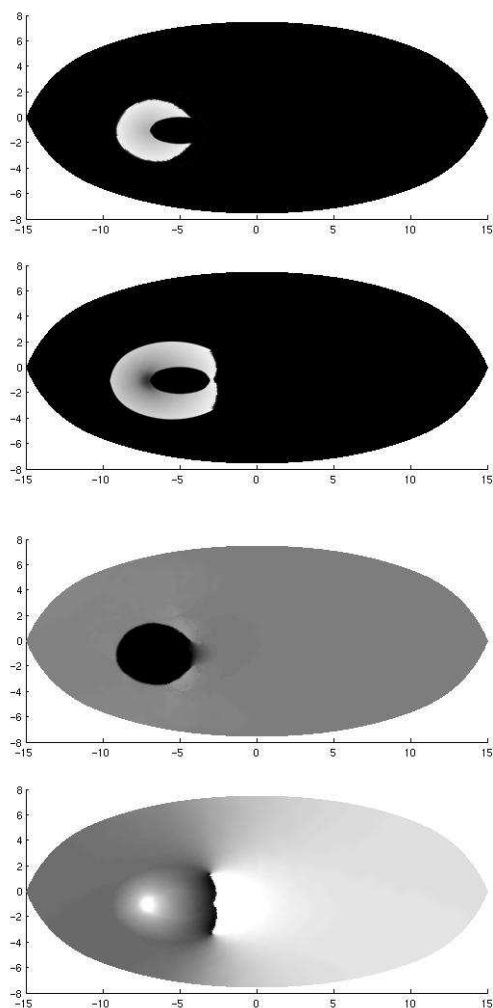


FIGURE 7. Potentiel de membrane V_m (en haut) et potentiel Φ correspondant (en dessous) à $t = 140 \text{ ms}$ à gauche et $t = 240 \text{ ms}$ (à droite).

La simulation précédente est maintenant reproduite en utilisant deux points de stimulation. Les bords gauche et droit de la cavité ventriculaire sont stimulés, simultanément, toutes les 600 ms .

On enregistre les ECG à partir des mêmes quatre électrodes que précédemment, ce second ensemble d'ECG est représenté en figure 8. Comparativement à la figure 6 il est intéressant de noter le profond changement causé par cette double stimulation sur les ECG. Celui ci se traduit sur le complexe QRS par une forte perturbation de sa forme ; on note un renforcement de l'amplitude de l'onde T.

Les potentiels V_m et Φ à l'instant $t = 240 \text{ ms}$ sont représentés sur la figure 9 (a comparer avec la figure 9).

Pour cette simulation, le temps CPU requis par chaque partie du code a également été profilé. Pour chaque pas de temps, l'actualisation

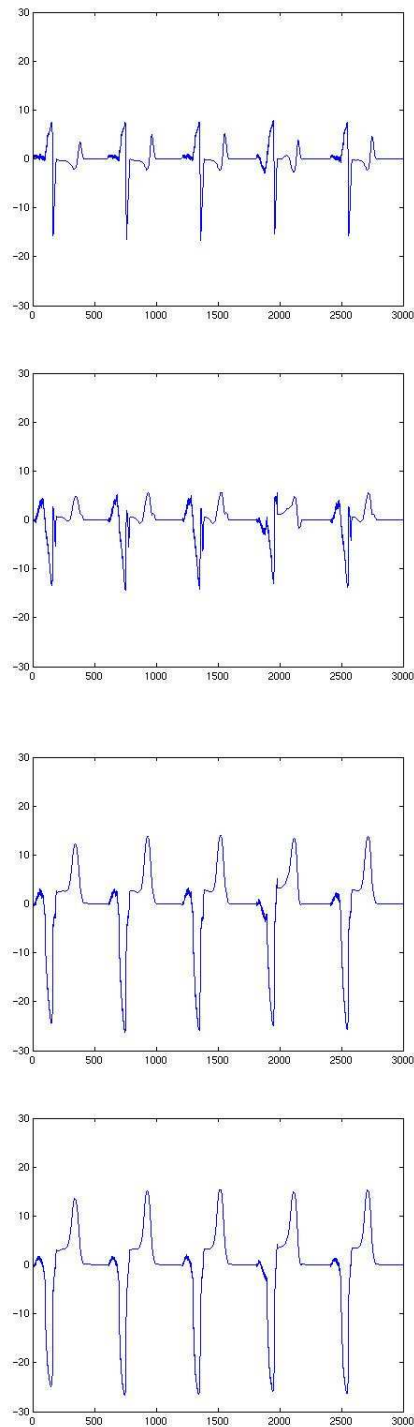


FIGURE 8. Simulation d'ECG, 2 points de stimulation.

des courants ioniques ne représente que 3.5% du temps (pour le modèle de Faber et Rudy [47]) tandis que l'inversion du problème bidomaine

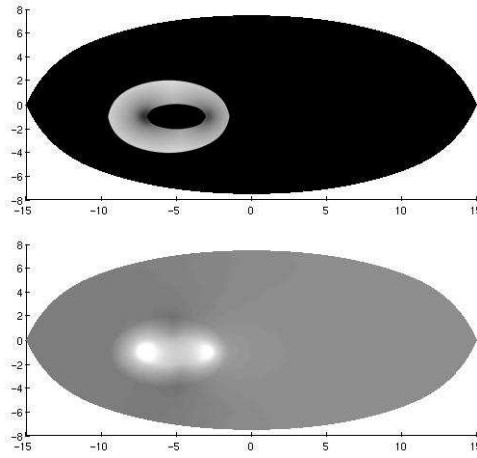


FIGURE 9. V_m (à gauche) et Φ (à droite) à $t = 240 \text{ ms}$.

en espace (246) requiert 93.2% du temps. On voit donc que, même pour des modèles ioniques sophistiqués, le temps requis pour le calcul des courants ioniques membranaires est négligeable comparativement à l'inversion du système linéaire, ce qui justifie le choix d'un modèle réaliste de membrane plutôt que d'un modèle non physiologique simplifié tel que décrit en 3.0.7.

2.2.2. Simulation d'ECG anormaux : ischémie et tachycardie.

Ischémie. L'utilisation de modèles de membrane réalistes a pour avantage la possibilité de simuler certains dysfonctionnements de l'activité électrique cardiaque. En effet l'action de certaines drogues, ou la conséquences de carences, se traduisent au niveau cellulaire par une modification des propriétés biochimiques de la membrane en altérant les protéines membranaires ayant pour charge le transport ionique membranaire. A titre d'exemple on simule l'ischémie.

L'origine de l'ischémie est un manque en oxygène du myocarde. Sa première conséquence est la perturbation du métabolisme cellulaire aboutissant à une augmentation de la concentration en acides du milieu intra-cellulaire (acidose). Cette acidose perturbe les échanges ioniques membranaires et aboutit à une concentration anormalement élevée du milieu extra-cellulaire en ions potassium.

Shaw et Rudy [108] ont établi une version modifiée du modèle de Luo-Rudy II modélisant cette pathologie.

L'influence de l'ischémie sur les ECG est représentée figure 10. La modification la plus notable est certainement la diminution de l'amplitude du signal.

Tachycardie. La tachycardie est caractérisée par une augmentation du rythme cardiaque. On augmente ici la fréquence de stimulation à une stimulation chaque 250 ms (soit 240 pulsations par minute). On

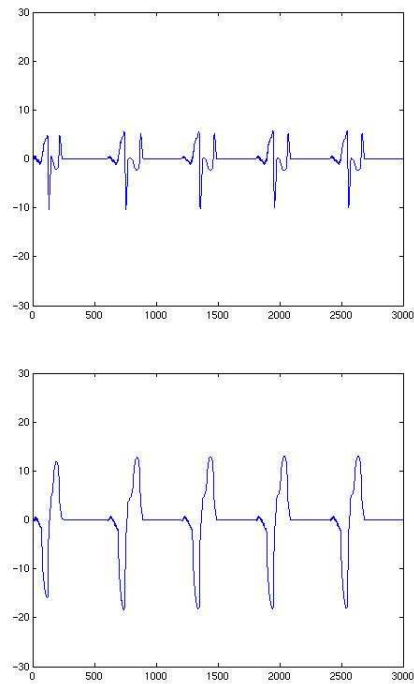


FIGURE 10. ECG en état d'ischémie

utilisera également la configuration introduite ci-dessus d'une double stimulation.

Deux faits intéressants sont à noter.

On constate qu'après une période transitoire l'ECG s'installe dans un régime régulier. Le profil périodique de l'ECG ne possède pas d'onde T.

Ensuite la seconde stimulation (à droite) ne joue plus aucun rôle dans l'ECG à part pour le premier battement. Cette stimulation a en effet lieu dans une zone où les canaux sodium rapide restent fermés. Par conséquent les cellules ne peuvent pas se dépolariser et l'effet de cette stimulation est nul (voir la forme de V_m sur la figure 12).

Le mécanisme complet du coeur fait intervenir à la fois les phénomènes de l'excitation électrique et de la contraction musculaire.

La contraction du muscle cardiaque fait intervenir la concentration intra-cellulaire en Ca^{2+} : lors de la dépolarisation, un flux rentrant de calcium initie la contraction à l'échelle cellulaire. Cependant une trop forte concentration intra-cellulaire en Ca^{2+} est toxique et après la repolarisation un système de pompe évacue le calcium intra-cellulaire superflu.

En état de tachycardie ce processus de régulation du calcium intra-cellulaire est perturbé, les dépolarisations se succèdent à un rythme trop élevé pour permettre à la cellule d'évacuer correctement le trop plein de calcium.

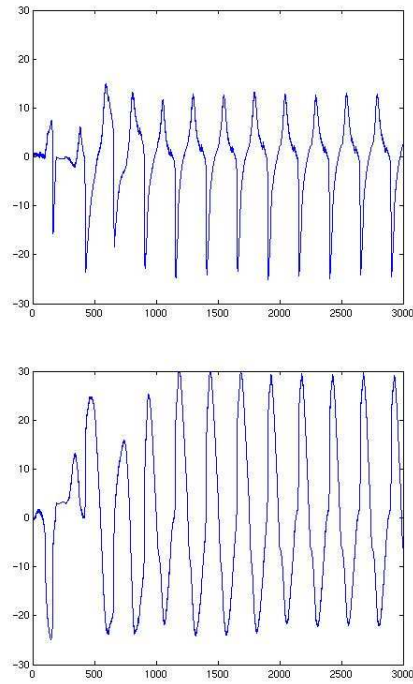
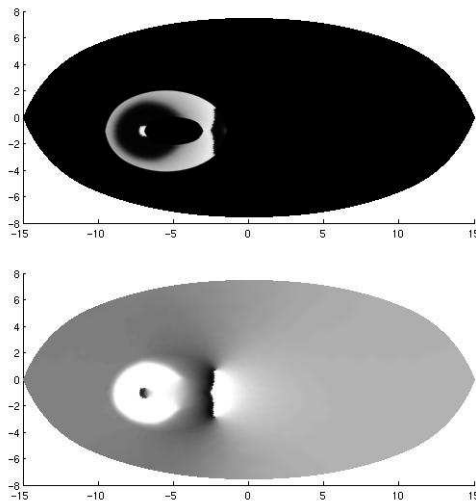


FIGURE 11. ECG en état de tachycardie

FIGURE 12. Tachycardie : V_m (à gauche) et Φ (à droite).

En conséquence la courbe du calcium intra-cellulaire (figure 13) augmente progressivement sans pouvoir revenir à son état initial ; au delà d'un certain taux cette concentration entraîne la mort de la cellule.

2.3. Bidomaine : coeur isolé en dimension 3. On présente dans cette section un exemple de calcul en dimension 3.

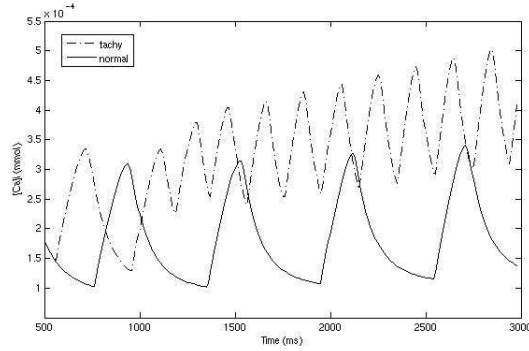


FIGURE 13. Concentration intra-cellulaire en ion calcium Ca^{2+}

Le maillage tétraédral de la figure 2.3 est issu de mesures expérimentales sur le coeur humain. Il comporte la donnée géométrique des deux ventricules ainsi que la donnée de la direction des fibres musculaires en chacun des points du maillage.

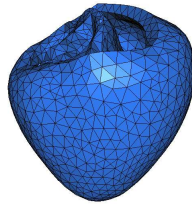


FIGURE 14. Maillages 3D des deux ventricules (3 800 points, 17 500 tétraèdres)

La donnée de la direction des fibres permet la définition des tenseurs de conductivité intra et extra-cellulaires et on modélise l'activité électrique cardiaque dans les ventricules à l'aide du modèle bidomaine pour le coeur isolé : les relations de couplage entre l'activité électrique dans le coeur et l'activité électrique dans le thorax sont ici remplacées par une condition de flux nul pour le potentiel extra-cellulaire au bord du coeur. On considère également qu'une partie de la surface du coeur est reliée à la masse, afin de pouvoir inverser l'équation d'équilibre (17).

Les courants ioniques membranaires sont modélisés par le modèle de Ten Tusher, Noble, Noble et Panfilov [113] spécifique aux cellules ventriculaires de l'être humain.

Les paramètres physiques utilisés sont ceux de la table 2.2, à l'exception du paramètre d'échelle A_m qui a été réduit d'un facteur 5 : le maillage utilisé ne comportant pas suffisamment de points, l'utilisation d'une valeur réaliste pour A_m place le calcul dans le régime de *propagation failure* (voir section 1.1).

En dimension 3 le système linéaire à inverser a des propriétés différentes au cas de la dimension 2 : comme en dimension 2 ce système est creux mais le nombre d'éléments non nuls par ligne est plus important. La stratégie de préconditionnement de la section 1.1 est conservée, un préconditionnement *ilu1*, s'avérant plus efficace que le préconditionneur *ilu0* en 2D, est ici utilisé. Malgré ce préconditionnement, l'inversion du système linéaire est bien plus lourde en 3D qu'en 2D et nécessite (pour une précision relative de $1E-7$) environ 130 itérations par inversion.

Les figures 2.3 2.3 représentent l'évolution du potentiel transmembranaire V_m et du potentiel extra cellulaire ϕ_e respectivement, lors de la propagation de l'onde de dépolarisation dans les ventricules.

Les résultats obtenus sont qualitativement cohérents. Cependant il est à noter que d'une part la vitesse de propagation du front de l'onde de dépolarisation est inférieure à la valeur attendue. Ce défaut est à mettre en relation avec le manque de finesse du maillage : on a effectivement observé en dimension 1 (voir section 1) que des maillages grossiers ralentissent considérablement la propagation des fronts d'onde et d'autant plus que l'on est proche du régime de *propagation failure*. D'autre part l'aspect du front d'onde manque de netteté, à cause du paramètre A_m fortement sous évalué ici.

Ces deux points illustrent que le recours à des maillages plus fins (comportant approximativement 10 fois plus de points) est nécessaire pour obtenir des résultats réalistes et de qualité. L'utilisation de tels maillages rendra cependant impératif de paralléliser les calculs afin de réduire le coût en temps. A titre d'exemple, le coût en temps pour le calcul représenté ici est de deux jours et ne rend compte que d'un cinquième (100 ms) d'une pulsation cardiaque.

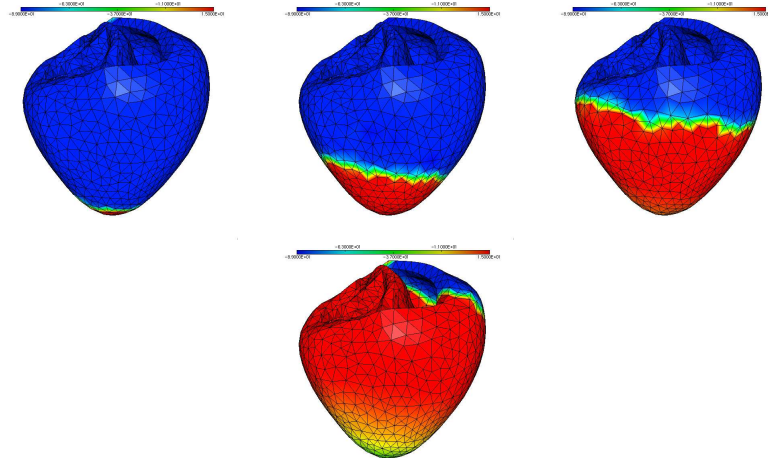
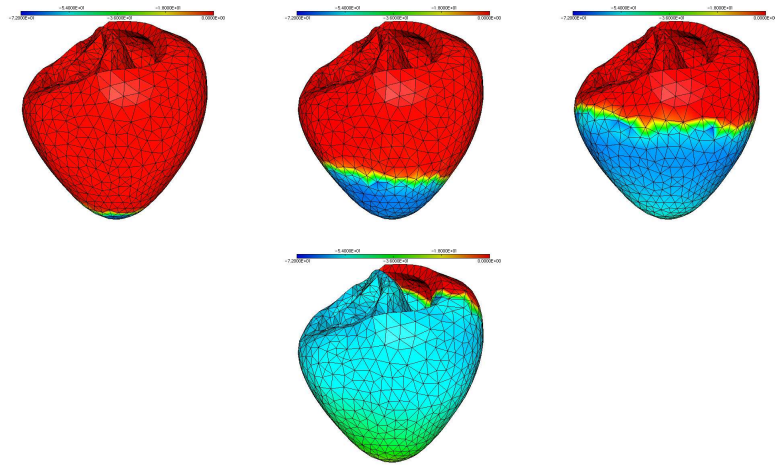


FIGURE 15. V_m : propagation de l'onde de dépolarisation

FIGURE 16. ϕ_e : propagation de l'onde de dépolarisation

Index des mots clés

Analyse fonctionnelle

- ensemble résolvant, 109
- espaces fractionnaires, 111
- générateur infinitésimal, 107
- opérateurs sectoriels, 109
- semi groupes, 107
- spectre, 109

Maillages admissibles

- cells, 68
- centers, 69
- discrete elliptic operator, 71
- interfaces, 68

Maillages DDFV

- \mathcal{E}_0 , 157
- cellule diamant, 131
- cellule duale, 131
- cellules, 129
- cellules adjacentes, 130
- centre d'une cellule, 130
- centre d'une interface, 131
- champs de vecteurs discrets,
136
- divergence discrète, 140
- fonction volume fini, 136
- fonctions volumes finis dérivables,
135
- gradient discret, 138
- interface interne, 131
- interfaces, 129
- sommets, 130
- sous maillage, 156
- trace discrète, 137

Index des notations

Analyse fonctionnelle

$\mathcal{L}(X)$, 109

$\rho(A)$, 109

$\sigma(A)$, 109

$C^\nu(\Omega)$, 113

X^α , 111

$D(\sigma)$, 131

$P(A)$, 131

x_K , 130

y_σ , 131

Maillages admissibles

$\delta\mathcal{S}$, 68

\mathcal{S} , 68

\mathcal{S}^* , 68

\mathcal{T} , 68

\mathcal{X} , 69

\mathcal{Y} , 69

$\mathbf{n}_{K,e}$, 68

τ_e , 70

$|u_{\mathcal{T}}|_{1,\mathcal{T}}$, 71

$\|u_{\mathcal{T}}\|_{L^2}$, 69

$A_{\mathcal{T}}$, 71

$H^1(\mathcal{T})$, 71

$L^2(\mathcal{T})$, 69

Maillages DDFV

\mathcal{C} , 129

$L^2(\mathcal{D})$, 136

\mathcal{D} , 131

div_h , 140

δK , 131

$\mathcal{F}(\mathcal{M})$, 136

$L^2(\delta\mathcal{S})$, 136

$P^1(\mathcal{M})$, 135

$P_{\Gamma_0}^1(\mathcal{M})$, 153

\mathcal{M} , 129

$\mathbf{n}_{\sigma,K}$, 131

\mathbf{n}_σ , 131

∇_h , 138

\mathcal{P} , 131

\mathcal{S} , 129

$\delta\mathcal{S}$, 131

\mathcal{S}_{int} , 131

\mathcal{T} , 132

Tr_h , 137

\mathcal{V} , 130

Bibliographie

- [1] I. Aavatsmark, T. Barkve, O. Boe, and T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. i. derivation of the methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5) :1700–1716, 1998.
- [2] T. Akiyama, J.F. Richeson, J.T. Ingram, and J. Oravec. Effects of varying the electrical conductivity of the medium between the heart and the body surface on the epicardial and praecordial electrocardiogram in the pig. *Cardiovasc Res.*, 12 :697–702, 1978.
- [3] L. Ambrosio, P. Colli-Franzone, and G. Savaré. On the asymptotic behaviour of anisotropic energies arising in the cardiac bidomain model. *Interfaces Free Bound.*, 2(3) :231–266, 2000.
- [4] B. Andreianov, F. Boyer, and F. Hubert. Discrete-duality finite volume schemes for Leray-Lions type elliptic problems on general 2D meshes. 2005.
- [5] G. Auchmuty and C. Zhai. Computation of rotating wave solutions of reaction-diffusion equations on a circle. *East-West J. Numer. Math.*, 4(3) :151–163, 1996.
- [6] A Bardou, P Auger, P Birkui, and J. L. Chassé. Modeling of Cardiac Electrophysiological Mechanisms : from Action Potential Genesis to its Propagation in Myocardium. *Critical Reviews in Biomedical Engineering*, 24 :141–221, 1996.
- [7] G.W. Beeler and H. Reuter. Reconstruction of the Action Potential of Ventricular Myocardial Fibres. *J. Physiol.*, 268 :177–210, 1977.
- [8] Y. Bourgault, M. Ethier, and V.G. LeBlanc. Simlulation of electrophysiological waves with an unstructured finite element method. *M2AN*, 2003.
- [9] N.F. Britton. Threshold phenomena and solitary traveling waves in a class of reaction- diffusion systems. *SIAM J. Appl. Math.*, 42 :188–217, 1982.
- [10] N.F. Britton. *Reaction-diffusion equations and their applications to biology*. London etc. : Academic Press, 1986.
- [11] H Brézis. *Analyse fonctionnelle. Théorie et applications*. Masson, 1983.
- [12] M. J. Castro Díaz and F. Hecht. Anisotropic mesh generation. Minimization of interpolation error. In *XV Congress on Differential Equations and Applications/V Congress on Applied Mathematics, Vol. I, II (Spanish) (Vigo, 1997)*, volume 9 of *Colecc. Congr.*, pages 647–653. Univ. Vigo, Vigo, 1998.
- [13] Shui-Nee Chow, J. Mallet-Paret, and Wen Xian Shen. Traveling waves in lattice dynamical systems. *J. Differ. Equations*, 149(2) :248–291, 1998.
- [14] Shui-Nee Chow and Wen Xian Shen. Dynamics in a discrete Nagumo equation : Spatial topological chaos. *SIAM J. Appl. Math.*, 55(6) :1764–1781, 1995.
- [15] J.C. Clements, J. Nenonen, P.K. Li, and B.M.. Horacek. Activation dynamics in anisotropic cardiac tissue via decoupling. *Ann. Biomed. Eng.*, 32(7) :984–990, 2004.

- [16] L. Clerc. Directional differences of impulse spread in trabecular muscle from mammalian heart. *J. Physio.*, 255(2) :335–346, 1976.
- [17] E. Colleen, Clancy, and Y. Rudy. Na⁺ Channel Mutation That Causes Both Brugada and Long-QT Syndrome Phenotypes : A Simulation Study of Mechanism. *Circulation*, 105 :1208–1213, 2002.
- [18] P. Colli Franzone and L. Guerri. Spreading of excitation in 3-D models of the anisotropic cardiac tissues. I : Validation of the eikonal model. *Math. Biosci.*, 113(2) :145–209, 1993.
- [19] P. Colli Franzone, L. Guerri, and E. Magenes. Oblique double layer potentials for the direct and inverse problems of electrocardiology. *Math. Biosci.*, 68(1) :23–55, 1984.
- [20] P. Colli Franzone, L. Guerri, M. Pennacchio, and B. Taccardi. Spread of excitation in 3-D models of the anisotropic cardiac tissue. II : Effects of fiber architecture and ventricular geometry. *Math. Biosci.*, 147(2) :131–171, 1998.
- [21] P. Colli-Franzone, L. Guerri, M. Pennacchio, and B. Taccardi. Anisotropic mechanism for multiphasic unipolar electrograms. Simulation studies and experimental recordings. *Ann. Biomed. Engrg.*, 28 :1326–1342., 2000.
- [22] P. Colli-Franzone, L. Guerri, M. Pennacchio, and B. Taccardi. On the polyphasic character of simulated and experimental electrograms. *Biomedizinische Technik*, 14 :16–19, 2001.
- [23] P. Colli Franzone, L. Guerri, and S. Rovida. Wavefront propagation in an activation model of the anisotropic cardiac tissue : Asymptotic analysis and numerical simulations. *J. Math. Biol.*, 28(2) :121–176, 1990.
- [24] P. Colli-Franzone, L. Guerri, and B. Taccardi. Modeling ventricular excitation : Axial and orthotropic anisotropy effects on wavefronts and potentials. *Math. Biosci.*, 188 :191–205, 2004.
- [25] P. Colli Franzone, L. Guerri, and S. Tentoni. Mathematical modeling of the excitation process in myocardial tissue : Influence of fiber rotation on wavefront propagation and potential field. *Math. Biosci.*, 101(2) :155–235, 1990.
- [26] P. Colli Franzone, L. Guerri, and C. Viganotti. Oblique dipole layer potentials applied to electrocardiology. *J. Math. Biol.*, 17(1) :93–124, 1983.
- [27] P. Colli-Franzone, L. Guerri, C. Viganotti, E. Macchi, S. Baruffi, S. Spaggiari, and B. Taccardi. Potential fields generated by oblique dipole layers modeling excitation wavefronts in the anisotropic myocardium. *Circ. Res.*, 51 :330–346, 1982.
- [28] P. Colli-Franzone, L.F. Pavarino, and B. Taccardi. Monodomain simulations of excitation and recovery in cardiac blocks with intramural heterogeneity. in *Functional Imaging and Modeling of the Heart (FIMH05)*, *Lect. Notes Comput. Sci.*, 3504 :267–277, 2005.
- [29] P. Colli-Franzone, L.F. Pavarino, and B. Taccardi. Simulating patterns of excitation, repolarization and action potential duration with cardiac Bidomain and Monodomain models. *To appear in Math. Biosci.*, 2005.
- [30] P. Colli-Franzone and G. Savaré. Degenerate evolution systems modeling the cardiac electric field at micro- and macroscopic level. In *Evolution equations, semigroups and functional analysis*. Lorenzi, Alfredo (ed.) et al., In memory of Brunello Terreni, 2002.
- [31] Piero Colli Franzone, Luciano Guerri, Micol Pennacchio, and Bruno Taccardi. Spread of excitation in 3-D models of the anisotropic cardiac tissue. II : Effects of fiber architecture and ventricular geometry. *Math. Biosci.*, 147(2) :131–171, 1998.

- [32] Piero Colli-Franzone, Micol Pennacchio, and Luciano Guerri. Accurate computation of electrograms in the left ventricular wall. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 10(4) :507–538, 2000.
- [33] Y. Coudière, J-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. *M2AN*, 33(3) :493–516, 1999.
- [34] Y. Coudière, T. Gallouët, and R. Herbin. Discrete Sobolev inequalities and L^p error estimates for finite volume solutions of convection diffusion equations. *M2AN*, 35(4), 2001.
- [35] Yves Coudière and Philippe Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for the linear convection-diffusion equation on locally refined meshes. *M2AN*, 34(6) :1123–1149, 2000.
- [36] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnès. Discrete-duality finite volume method for second order elliptic problems. *Proceedings of the international symposium on Finite Volumes for Complex Applications IV*, 2005.
- [37] D. Di-Francesco and D. Noble. Simulations of Ionic Currents and Concentration Changes. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, pages 353–398, 1985.
- [38] K. Domelevo and P. Omnès. A finite volume method for the Laplace operator on almost arbitrary two-dimensional grids. *M2AN*, 2005.
- [39] Bertolazzi; E. and G. Manzini. A cell centered second order accurate finite volume method for convection-diffusion problems on unstructured meshes. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 8 :1235–1260, 2004.
- [40] Bertolazzi; E. and G. Manzini. A Second-Order Maximum Principle Preserving Finite Volume Method for Steady Convection-Diffusion Problems. *SIAM J. on Numer. Anal.*, 2005.
- [41] W. Einthoven. Die galvanometrische Registrierung des menschlichen Elektrokardiogramms, zugleich eine Beurteilung der Anwendung des Capillarelektrometers in der Physiologie. *Archiv für die gesamte Physiologie des Menschen und der Tiere*, 99 :472–480, 1903.
- [42] L. C. Evans. *Partial differential equations*. American Mathematical Society, 1998.
- [43] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. *Finite volume methods*. Ciarlet, P. G. (ed.) et al., Handbook of numerical analysis. Vol. 7, 2000.
- [44] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A finite volume scheme for anisotropic diffusion problems. *C. R., Math., Acad. Sci. Paris*, 339(4) :299–302, 2004.
- [45] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A cell centered finite volume approximation for second order partial derivative operators with full matrix on unstructured meshes in any space dimension. *IMAJNA*, 2005.
- [46] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, and A. Michel. Convergence of a finite volume scheme for nonlinear degenerate parabolic equations. *Numer. Math.*, 92(1) :41–82, 2002.
- [47] G. Faber and Y. Rudy. Action Potential and Contractility Changes in [Na+]i Overloaded Cardiac Myocytes : A Simulation Study. *Biophysical Journal*, 78 :2392–2404, 2000.
- [48] P. C. Fife and J.B. McLeod. The approach of solutions of nonlinear diffusion equations to traveling front solutions. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 65 :335–361, 1977.

- [49] R. Fitzhugh. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophys. J.*, 1 :445–465, 1961.
- [50] T. Gallouët, R. Herbin, and M. H. Vignal. Error estimates on the approximate finite volume solution of convection diffusion equations with boundary conditions. *Proceedings of the Finite Volumes for Complex Applications II.*, pages 189–196, 1999.
- [51] D.B. Geselowitz. Multipole representation for an equivalent cardiac generator. *Proc. IRE* 48, 48 :75–79, 1960.
- [52] David Gilbarg and Neil S. Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Reprint of the 1998 edition.
- [53] L.S. Green, B. Taccardi, R. Ershler, and R.L. Lux. Epicardial potential mapping. Effects of conducting media on isopotential and isochrone distributions. *Circulation*, 84(6) :2513–2521, 1991.
- [54] P. Grottum, A. Tveito, and Zych D. K. Numerical simulation for the excitation process in the human heart. *Oslo University Report*, 1995.
- [55] R.M. Gulrajani, M.C. Trudel, and J.L. Leon. A membrane-based computer heart model employing parallel processing. *Biomedizinische Technik*, 46 :20–22, 2001.
- [56] S.P. Hastings. On the existence of homoclinic and periodic orbits for the Fitzhugh- Nagumo equations. *Q. J. Math., Oxf. II. Ser.*, 27 :123–134, 1976.
- [57] C.S. Henriquez. Simulating the electrical behaviour of cardiac tissue using the bidomain model. *Crit. Rev. Biomed. Engr.*, 21 :1–77, 1993.
- [58] Dan Henry. *Geometric theory of semilinear parabolic equations*. Springer-Verlag, LNM 840, 1981.
- [59] R. Herbin. An error estimate for a finite volume scheme for a diffusion-convection problem on a triangular mesh. *Numer. Methods Partial Differ. Equations*, 11(2) :165–173, 1995.
- [60] R. Herbin. Finite volume methods for diffusion convection equations on general meshes. *Proceedings of the international symposium on Finite Volumes for Complex Applications*, 1996.
- [61] R. Herbin and O. Labergeirie. Finite volume schemes for elliptic and elliptic-hyperbolic problems on triangular meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 147(1-2) :85–103, 1997.
- [62] F. Hermeline. A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes. *J. Comput. Phys.*, 160(2) :481–499, 2000.
- [63] F. Hermeline. Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 192(16-18) :1939–1959, 2003.
- [64] F. Hermeline. Une méthode de volumes finis pour l’approximation des opérateurs de diffusion en dimension 3 sur des maillages déformés. *Rapport interne du CEA*, 2005.
- [65] A.L. Hodgkin and A.F. Huxley. A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve. *J. Physiol.*, 117 :500–544, 1952.
- [66] G.J. Huiskamp. Simulation of depolarization in a membrane-equation based model of the anisotropic ventricle. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 45(7) :847–855, 1998.

- [67] C. Jones. Stability of the travelling wave solution of the FitzHugh-Nagumo system. *Trans. Am. Math. Soc.*, 286 :431–469, 1984.
- [68] J. P. Keener. Propagation and its failure in coupled systems of discrete excitable cells. *SIAM J. Appl. Math.*, 47 :556–572, 1987.
- [69] J. P. Keener. An eikonal-curvature equation for action potential propagation in myocardium. *J. Math. Biol.*, 29(7) :629–651, 1991.
- [70] J.P. Keener and J. Sneyd. *Mathematical Physiology*. Springer-Verlag, 1998.
- [71] W. Krassowska and J.C. Neu. Homogenization of syncytial tissues. *CRC Crit. Rev. Biomed. Eng.*, 21(2) :137–199, 1993.
- [72] W. Krassowska and J.C. Neu. Effective boundary conditions for syncytial tissues. *IEEE*, 41(2) :143–150, 1994.
- [73] W. Krassowska and R.E. Pilkington, T.C. and Ideker. Potential distribution in three-dimensional periodic myocardium. I. Solution with two-scale asymptotic analysis. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 37(3) :252–266, 1990.
- [74] C. Le Potier. Finite volumes in 2 or 3 dimensions for a diffusion convection equation applied to porous media with cast3m. *Proceedings of the XVth International Conference on Computational methods in Water Ressources*, 2 :1015–1026, 2004.
- [75] C. Le Potier. A finite volume for the approximation of highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes. *Proceedings of the international symposium on Finite Volumes for Complex Applications IV*, 2005.
- [76] G.L. Lines. *Simulating the Electrical Activity in the Heart - A Bidomain Model of the Ventricles Embedded in a Torso*. Phd thesis, Department of informatics, University of Oslo,, 1999.
- [77] G.T. Lines, P. Grottum, A.J. Pullan, J. Sundes, and A. Tveito. Mathematical models and numerical methods for the forward problem in cardiac electrophysiology. *Comput. Visual. Sci.*, 5 :215–239, 2003.
- [78] G.T. Lines, P. Grottum, and A. Tveito. Modeling the electrical activity of the heart : a bidomain model of the ventricles embedded in a torso. *Comput. Visual. Sci.*, 5 :195–213, 2003.
- [79] J.-L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications. Vol. 2*. Travaux et Recherches Mathématiques, No. 18. Dunod, Paris, 1968.
- [80] J.L. Lions. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*. Dunod, 1969.
- [81] A. Lunardi. *Analytic semigroups and optimal regularity in parabolic problems*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 1995.
- [82] C.H. Luo and Y. Rudy. A model of the Ventricular Cardiac Action Potential. *Circ. Res.*, 68 :1501–1526, 1991.
- [83] C.H. Luo and Y. Rudy. A Dynamic Model of the Cardiac Ventricular Action Potential. *Circ. Res.*, 74 :1097–1113, 1994.
- [84] C.H. Luo and Y. Rudy. A Dynamic Model of the Cardiac Ventricular Action Potential I. Simulations of Ionic Currents and Concentration Changes. *Circ. Res.*, 74 :1071–1096, 1994.
- [85] R.S. MacLeod, B. Taccardi, and R.L. Lux. The influence of torso inhomogeneities on epicardial potentials. *Computer in Cardiology*, pages 793–796, 1994.

- [86] T.E. Mc Allister, D. Noble, and R.W. Tsien. Reconstruction of the Electrical Activity of Cardiac Purkinje Fibre. *J. Physiol.*, 251 :1–59, 1975.
- [87] Ilya D. Mishev. Finite volume methods on Voronoi meshes. *Numer. Methods Partial Differ. Equations*, 14(2) :193–212, 1998.
- [88] J. D. Murray. *Mathematical biology. 2nd ed.* Biomathematics (Berlin). 19. Berlin : Springer-Verlag., 1993.
- [89] J.S. Nagumo, S. Arimoto, and S. Yoshizawa. An active pulse transmission line simulating nerve axon. *Proc. IRE*, 50 :2061–2071, 1962.
- [90] M.P. Nash and Panfilov A.V. Electromechanical model of excitable tissue to study reentrant cardiac arrhythmias. *Progress in Biophysics & Molecular Biology*, 85 :501–522, 2004.
- [91] D. Noble. A modification of the hodgkin-huxley equation applicable to Purkinje fibre action and pacemaker potentials. *J. Physiol.*, 160 :317–352, 1962.
- [92] E. Page. Cat Heart Muscle in Vitro. Part III. The extracellular space . *J. Gen. Physiol.*, 46 :201–213, 1962.
- [93] A. Pagès, M. Sermesant, and P. Frey. Generation of computational meshes from mri and ct-scan data.
- [94] A. Panfilov and J.P. Keener. Re-entry in an anatomical model of the heart. *Chaos Solitons Fractals*, 5(3-4) :681–689, 1995.
- [95] A. V. Panfilov. Spiral breakup as a model of ventricular fibrillation. *Chaos*, 8(1) :57–64, 1998.
- [96] A. V. Panfilov and R. R. Aliev. A simple two-variable model of cardiac excitation. *Chaos Solitons and Fractals*, 7(3) :293–301, 1996.
- [97] A. V. Panfilov and James P. Keener. Re-entry in three-dimensional Fitzhugh-Nagumo medium with rotational anisotropy. *Physica D*, 84(3-4) :542–552, 1995.
- [98] R.C. Penland, D.M. Harrild, and C.S. Henriquez. Modeling impulse propagation and extracellular potential distributions in anisotropic cardiac tissue using a finite volume element discretization. *Computing and Visualization in Sciences*, 4 :215–226, 2004.
- [99] M. Pennacchio, G. Savaré, and P. Colli-Franzone. Multiscale modelling for the bioelectric activity of the heart. *to appear on SIAM J. on Math. Anal.*, 2005.
- [100] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. 1.* Academic Press, 1972.
- [101] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. II.* Academic Press, 1975.
- [102] W. Rudin. *Functional analysis.* International Series in Pure and Applied Mathematics., 1973.
- [103] G. Sands. *Mathematical model of ventricular activation in an anatomically accurate deforming heart.* Phd thesis, Department of Engineering sciences, University of Auckland., 1996.
- [104] S. Sanfelici. Convergence of the galerkin approximation of a degenerate evolution problem in electrocardiology. *Numer. Methods for Partial Differential Equations*, 18 :218–240, 2002.
- [105] O.H. Schmidt. Biological information processing using the concept of interpenetrating domains. *in Information Processing in the Nervous System*, ch 18 :325–331, 1969.

- [106] M. Sermesant, Y. Coudière, H. Delingette, and N. Ayache. Progress towards an electromechanical model of the heart for cardiac image analysis. In *IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI'02)*, 2002.
- [107] M. Sermesant, O. Faris, F. Evans, E. McVeigh, Y. Coudière, H. Delingette, and N. Ayache. Preliminary validation using in vivo measures of a macroscopic electrical model of the heart. In *International Symposium on Surgery Simulation and Soft Tissue Modeling (IS₄TM'03)*, 2003.
- [108] R.M. Shaw and Y. Rudy. Electrophysiologic Effects of Acute Myocardial Ischemia : a Theoretical Study of Altered Cell Excitability and Action Potential Duration. *Cardiovascular Research*, 35 :256–272, 1997.
- [109] A.A. Shcherbakov. On the estimate of the attractor's dimension for multidimensional FitzHugh-Nagumo equations. *Russ. J. Math. Phys.*, 1(4) :533–538, 1993.
- [110] J. Smoller. *Shock waves and reaction-diffusion equations*. Springer- Verlag., 1983.
- [111] B. Taccardi. Distribution of heart potentials on the thoracic surface of normal human subjects. *Circ. Res.*, 12 :341–52, 1963.
- [112] R. Temam. *Infinite-dimensional dynamical systems in mechanics and physics. 2nd ed.* Applied Mathematical Sciences. 68. New York, NY : Springer., 1997.
- [113] K.H. Ten Tusscher, D. Noble, P.J. Noble, and A.V. Panfilov. A Model for Human Ventricular Tissue. *Am J Physiol Heart Circ Physiol*, 286, 2004.
- [114] L. Tung. *A bidomain model for describing ischemic myocardial D-C potentials*. Ph.D. thesis, M.I.T., 1978.
- [115] A.D. Waller. A demonstration on man of electromotive changes accompanying the heart's beat. *J. Physiol.*, 8 :229–234, 1887.
- [116] E. Yanagida. Stability of fast travelling pulse solutions of the FitzHugh-Nagumo equations. *J. Math. Biol.*, 22 :81–104, 1985.
- [117] E. Yanagida. Stability of travelling front solutions of the FitzHugh-Nagumo equations. *Math. Comput. Modelling*, 12(3) :289–301, 1989.
- [118] J. Zeng, K.R. Laurita, D.S. Rosenbaum, and Y. Rudy. Two Components of the Delayed Rectifier K⁺ Current in Ventricular Myocytes of the Guinea Pig Type. *Circulation Research*, 77 :140–152, 1995.
- [119] H. Zhang and A.V. Holden. Chaotic meander of spiral waves in the FitzHugh-Nagumo system. *Chaos Solitons Fractals*, 5(3-4) :661–670, 1995.
- [120] Linghai Zhang. On traveling waves of a generalized bistable equation. *Acta Math. Appl. Sin., Engl. Ser.*, 17(2) :286–288, 2001.
- [121] B. Zinner. Stability of traveling wavefronts for the discrete Nagumo equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 22(4) :1016–1020, 1991.
- [122] B. Zinner. Existence of traveling wavefront solutions for the discrete Nagumo equation. *J. Differ. Equations*, 96(1) :1–27, 1992.