Milieux complexes avec un modèle de Réaction-Diffusion

Sergio Chibbaro[1], Federico Bianco[1], Davide Vergni[2], & Angelo Vulpiani[3]

[1] Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, UMR7190, Institut Jean Le Rond d'Alembert, F-75005 Paris, France.
[2] Istituto Applicazioni Calcolo, CNR, V.le Manzoni 30, 00185, Rome, Italy
[3] Dipartimento di Fisica, Università "La Sapienza" and ISC-CNR, Piazzale Aldo Moro 2, I-00185 Roma, Italy
sergio.chibbaro@upmc.fr

Nous étudions la dynamique complexe dans des milieux hétérogènes par le moyen d'un simple modèle de réaction-diffusion (RD). En particulier, nous avons exploré les lois d'échelle et la dynamique qui se développe sur un réseau de percolation, qui peut grossièrement représenter un milieux poreux. Deux cas différent ont été analysés en détail : la dynamique du front réactif dans un réseau de percolation asymptotique et la propagation du front à travers un réseau de percolation confiné par deux parois.

Les processus de réaction-diffusion ont été largement étudiés dans les dernières années car il s'agit de systèmes qui peuvent expliquer la physique de différents problèmes pertinents [1,2]. L'étude mathématique de ce genre de dynamique sur un substrat homogène peut être reporté au modèle de Fisher-Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov (FKPP) [3]

$$\partial_t \theta = D \Delta \theta + \alpha g(\theta)\,, \tag{1}$$

où le champ scalaire θ représente la concentration fractionnaire de produits de réaction, D est la diffusivité moléculaire, $g(\theta)$ décrit le procédé de réaction et α est le taux de réaction (l'inverse d'un temps).

Une approche naturelle à l'étude de la réaction et la diffusion dans un milieu hétérogène peut être construit en généralisant l'Eq. (1), dans laquelle l'opérateur de transport $\hat{L} = D(\mathbf{x})\Delta$, dépend des variables spatiales :

$$\partial_t \theta(\mathbf{x}, t) = D(\mathbf{x}) \Delta \theta(\mathbf{x}, t) + f(\theta(\mathbf{x}, t))\,. \tag{2}$$

La forme et la distribution spatiale de $D(\mathbf{x})$ permet de prendre en considération les propriétés du milieu et donc de traiter des sujets physiques et biologiques différents [4,5].

Nous avons appliqué ce modèle général aux deux cas considérés. Pour la diffusion réactive, les données numériques et des arguments analytiques montrent une loi d'échelle en forme de loi de puissance pour le produit de la réaction du type $M(t) \sim t^{d_l}$, où d_l est la dimension de connectivité. Dans le canal en percolation, un comportement plus complexe a été exploré. Une onde progressive statistiquement stationnaire se développe. La vitesse et l'épaisseur de cette onde progressive ont été calculés numériquement.

Tandis que la vitesse du front est une quantité faiblement fluctuante et son comportement peut être compris utilisant de simples raisonnements théoriques, l'épaisseur du front est une quantité qui manifeste des fluctuations très importantes, qui suivent un comportement en loi de puissance en fonction de la largeur du canal. Les lois d'échelle observées suggèrent un effet important de l'hétérogénéité même loin du seuil de percolation, alors que le substrat n'est plus auto-similaire à toutes les échelles.

Références

1. J.D. Murray, *Mathematical Biology*, (Springer-Verlag, Berlin, 1993).
2. N. Peters, *Turbulent combustion* (Cambridge University Press, New York, 2000).
3. A. N. Kolmogorov, I. G. Petrovskii, and N. S. Piskunov, Moscow Univ. Bull. Math. **1**, 1 (1937) ; R. A. Fischer, Ann. Eugenics **7**, 355 (1937).
4. N. Shigesada and K. Kohkichi. *Biological invasions : theory and practice*, (Oxford University Press, UK, 1997).
5. A. Okubo and S. A. Levin, *Diffusion and ecological problems : modern perspectives.* (Springer Verlag, New York, 2001).