

Panorama des mathématiques du calcul scientifique.

Quelques exemples issus de travaux sur l'électrocardiologie

Yves Coudière Lisl Weynans

IMB – UMR 5251, Liryc, Inria Carmen,
CNRS – Université de Bordeaux – Bordeaux-INP
`{yves.coudiere,lisl.weynans}@u-bordeaux.fr`

16 novembre 2020



Qui sommes nous ?



(a) Yves Coudière



(b) Lisl Weynans

L'Institut de Mathématiques de Bordeaux

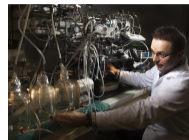
- Le laboratoire qui regroupe les mathématiciens à Bordeaux :
 - ▶ 141 enseignants-chercheurs et chercheurs
 - ▶ 15 personnels d'assistance à la recherche : administratif, informatique, bibliothèque...
 - ▶ 115 doctorants et post-doctorants
 - ▶ articulation avec les masters
- 8 équipes de recherches dont l'équipe *Calcul Scientifique et Modélisation*



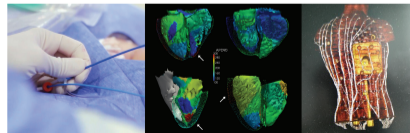
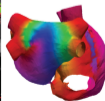
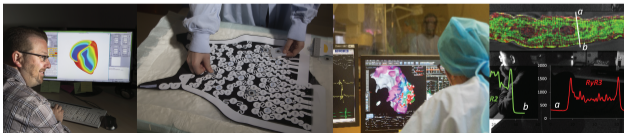
IHU Liryc

L'Institut de Rythmologie et *modélisation* Cardiaque

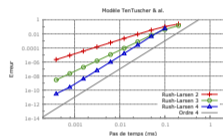
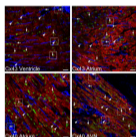
- Regroupe sur le même site
 - ▶ la cardiologie clinique
 - ▶ l'électrophysiologie, cellulaire et tissulaire – plateforme expérimentale
 - ▶ l'imagerie – 2 IRM[, CT], EP lab
 - ▶ *modélisation*
 - ▶ traitement du signal
- formation des professionnels, partenaires industriels



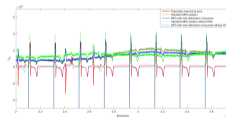
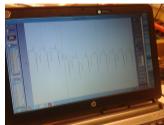
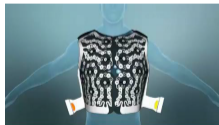
▶ <http://ihu-liryc.fr>



- Nouveaux modèles mathématiques, analyse numérique, calcul parallèle, études numériques pour des pathologies spécifiques



- Étude des signaux cardiaques, résolution de problèmes inverses



- Développement de logiciels (traitement d'image, simulation, problèmes inverses)

L'équipe Calcul Scientifique et Modélisation

- 35 enseignants-chercheurs et chercheurs, 37 doctorants et post-doctorants
- Thèmes de recherche :
 - ▶ Les problèmes d'ingénierie dans l'industrie et la physique (énergie, transport, environnement, etc)
 - ▶ Le calcul scientifique en médecine (oncologie et cardiologie, etc)
- Un principe commun : s'intéresser à « toute la chaîne » dont
 - ▶ interactions forte avec les chercheurs des autres disciplines (appliquées et informatique)
 - ▶ l'analyse et l'analyse numérique
 - ▶ les schémas d'approximation, leur implémentation
 - ▶ l'utilisation du calcul parallèle, jusqu'au niveau des calculateurs européens
- 4 équipes-projet Inria

Rupture d'une éolienne



Figure – Un problème de couplage entre fluide et structure – source : youtube

Aéronautique : prévenir le givrage des ailes d'avions



Figure – Fluide, structure, et interfaces mobiles

Fibrillation atriale

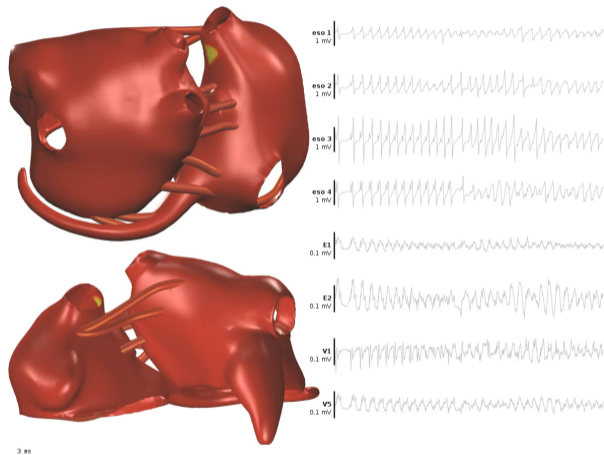


Figure – Propagation des potentiels d'action et fibrillation – Mark Potse

Simulation d'électrocardiogrammes

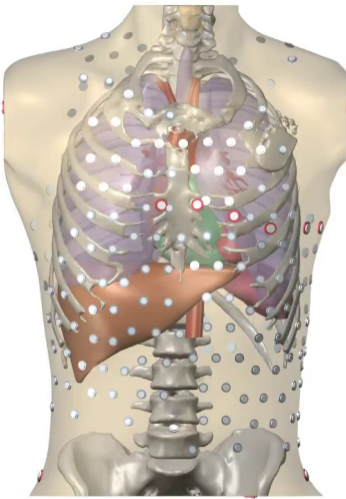


Figure – Simulation personnalisée – Mark Potse

Une démarche commune : le calcul scientifique

Definition

Branche des mathématiques dans laquelle on développe, étudie, met en oeuvre (informatiquement), des méthodes de *résolution approchée* de problèmes mathématiques modélisant des phénomènes physiques, biologiques, etc.

Objectif

- remplacer des expériences coûteuses, difficiles à réaliser,
- ou tout simplement impossibles,

- faire des prévisions.



La démarche d'étude

Et pour que ça serve vraiment

Interactions : échanges avec physiciens, biologistes, médecins, etc

Modélisation : élaborer un modèle mathématique qui représente le problème considéré

Approximation : construire une méthode numérique pour calculer une solution approchée

Implantation algorithmique : programmer efficacement et sans bugs la méthode numérique

Feedback : validation du modèle mathématique en comparant les résultats à des expériences

La démarche d'étude

Et pour que ça serve vraiment

Interactions : échanges avec physiciens, biologistes, médecins, etc

Modélisation : élaborer un modèle mathématique qui représente le problème considéré

Approximation : construire une méthode numérique pour calculer une solution approchée

Implantation algorithmique : programmer efficacement et sans bugs la méthode numérique

Feedback : validation du modèle mathématique en comparant les résultats à des expériences

Une courte pause



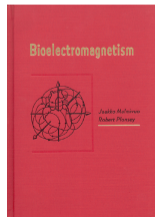
www.wooclap.com/BDMGUM

L'électrocardiographie

Definition (fr.wikipedia.org)

L'électrocardiographie (ECG) est une représentation graphique de l'activité électrique du cœur. Cette activité électrique est liée aux variations de potentiel électrique des cellules spécialisées dans la contraction (myocytes) et des cellules spécialisées dans l'automatisme et la conduction des influx. Elle est recueillie par des électrodes à la surface de la peau.

« Bioelectric phenomena have been a part of medicine throughout its history (...). Bioelectromagnetism is, of course, based strongly on the general theory of electromagnetism (...). Only in the past 100 years has bioelectromagnetism had real diagnostic or therapeutic value. As we know, this is actually the case for most of medicine as well. » J. Malmivuo et R. Plonsey, 1995.



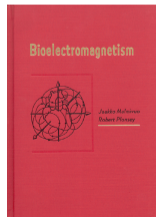
L'électrocardiographie

Definition (fr.wikipedia.org)

L'électrocardiographie (ECG) est une représentation graphique de l'activité électrique du cœur. Cette activité électrique est liée aux variations de potentiel électrique des cellules spécialisées dans la contraction (myocytes) et des cellules spécialisées dans l'automatisme et la conduction des influx. Elle est recueillie par des électrodes à la surface de la peau.

Mais où sont les mathématiques la-dedans ?

« *Bioelectric phenomena have been a part of medicine throughout its history (...). Bioelectromagnetism is, of course, based strongly on the general theory of electromagnetism (...). Only in the past 100 years has bioelectromagnetism had real diagnostic or therapeutic value. As we know, this is actually the case for most of medicine as well.* » J. Malmivuo et R. Plonsey, 1995.



L'électrocardiographie de W. Einthoven

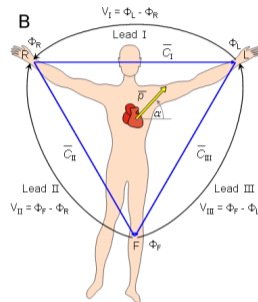
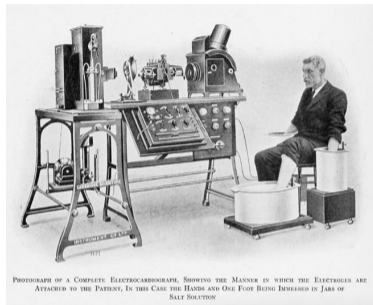


Figure – Prix Nobel de physiologie et médecine, 1924

L'équation de l'électrostatique

– $\text{div}(\sigma(x)\nabla(\phi)) = f$, une équation aux dérivées partielles

Modèles ioniques

J. Physiol. (1952) 117, 500-544

A QUANTITATIVE DESCRIPTION OF MEMBRANE CURRENT AND ITS APPLICATION TO CONDUCTION AND EXCITATION IN NERVE

BY A. L. HODGKIN AND A. F. HUXLEY

From the Physiological Laboratory, University of Cambridge

Figure – Prix Nobel, 1963



Figure – *The giant squid axon*

Modèles ioniques

J. Physiol. (1952) 117, 500-544

**A QUANTITATIVE DESCRIPTION OF MEMBRANE
CURRENT AND ITS APPLICATION TO CONDUCTION
AND EXCITATION IN NERVE**

BY A. L. HODGKIN AND A. F. HUXLEY

From the Physiological Laboratory, University of Cambridge

Figure – Prix Nobel, 1963

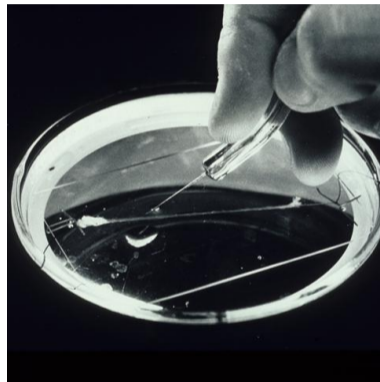


Figure – *The giant squid axon*

Modèles ioniques

Summary of equations and parameters

We may first collect the equations which give the total membrane current I as a function of time and voltage. These are:

$$I = C_M \frac{dV}{dt} + \bar{g}_K n^4 (V - V_K) + \bar{g}_{Na} m^3 h (V - V_{Na}) + \bar{g}_l (V - V_l), \quad (26)$$

where
$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n (1 - n) - \beta_n n, \quad (7)$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m (1 - m) - \beta_m m, \quad (15)$$

$$\frac{dh}{dt} = \alpha_h (1 - h) - \beta_h h, \quad (16)$$

and
$$\alpha_n = 0.01 (V + 10) / \left(\exp \frac{V + 10}{10} - 1 \right), \quad (12)$$

$$\beta_n = 0.125 \exp (V/80), \quad (13)$$

$$\alpha_m = 0.1 (V + 25) / \left(\exp \frac{V + 25}{10} - 1 \right), \quad (20)$$

$$\beta_m = 4 \exp (V/18), \quad (21)$$

$$\alpha_h = 0.07 \exp (V/20), \quad (23)$$

$$\beta_h = 1 / \left(\exp \frac{V + 30}{10} + 1 \right). \quad (24)$$

Figure – Prix Nobel, 1963

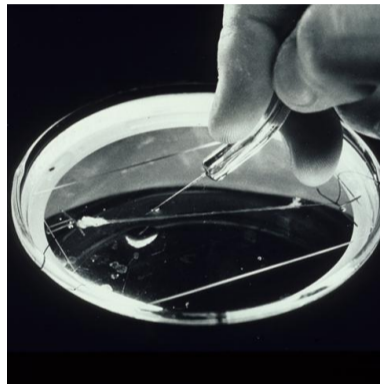


Figure – The giant squid axon

→ Un système d'équations différentielles

Un modèle « simple » pour les oreillettes

Courtemanche, Ramirez, Nattel, 1998

$$\frac{dV}{dt} = \frac{-(I_{ion} + I_{st})}{C_m}$$

$$I_{ion} = I_{Na} + I_{K1} + I_{to} + I_{Kur} + I_{Kr} + I_{Ks} + I_{CaL} + I_{p,Ca} + I_{NaK} + I_{NaCa} + I_{b,Na} + I_{b,K}$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y_{\infty} - y}{\tau_y} \text{ (where } y \text{ is any gating variable)}$$

$$\frac{d[Na^+]_i}{dt} = \frac{-3I_{NaK} - 3I_{NaCa} - I_{b,Na} - I_{Na}}{FV_i}$$

$$\frac{d[K^+]_i}{dt} = \frac{2I_{NaK} - I_{K1} - I_{to} - I_{Kur} - I_{Kr} - I_{Ks} - I_{b,K}}{FV_i}$$

$$\frac{d[Ca^{2+}]_i}{dt} = \frac{B1}{B2}$$

$$B1 = \frac{2I_{NaCa} - I_{p,Ca} - I_{CaL} - I_{b,Ca}}{2FV_i}$$

$$+ \frac{V_{sp}(I_{sp,NaK} - I_{sp}) + I_{rel}V}{V_i}$$

$$B2 = 1 + \frac{[Trpn]_{max}K_{m,Trpn}}{([Ca^{2+}]_i + K_{m,Trpn})^2} + \frac{[Cmnd]_{max}K_{m,Cmnd}}{([Ca^{2+}]_i + K_{m,Cmnd})^2}$$

$$\frac{d[Ca^{2+}]_{tot}}{dt} = I_{to} - I_{sp,NaK} - I_{rel} \frac{V_{rel}}{V_{sp}}$$

$$\frac{d[Ca^{2+}]_{rel}}{dt} = (I_{sr} - I_{rel}) \left[1 + \frac{[Cspn]_{max}K_{m,Cspn}}{([Ca^{2+}]_{rel} + K_{m,Cspn})^2} \right]^{-1}$$

Equilibrium Potential

$$E_x = \frac{RT}{zF} \log \frac{[X]_o}{[X]_i}, \text{ for } X = Na^+, K^+, Ca^{2+}$$

Fast Na⁺ Current

$$I_{Na} = g_{Na}m^3h(V - E_{Na})$$

$$\alpha_m = \begin{cases} 0.32 \frac{V + 47.13}{1 - \exp[-0.1(V + 47.13)]} \\ 3.2, \text{ if } V = -47.13 \end{cases}$$

$$\beta_m = 0.08 \exp\left(-\frac{V}{11}\right)$$

$$\alpha_h = \begin{cases} 0.135 \exp\left(-\frac{V + 80}{6.8}\right) \\ 0, \text{ if } V \geq -40 \end{cases}$$

$$\beta_h = \begin{cases} 3.56 \exp(0.079V) + 3.1 \times 10^4 \exp(0.35V) \\ 0.13 \left[1 + \exp\left(-\frac{V + 10.66}{11.1}\right) \right]^{-1}, \text{ if } V \geq -40 \end{cases}$$

$$\alpha_j = \begin{cases} -127.140 \exp(0.2444V) - 3.474 \times 10^{-3} \exp(-0.04391V) \\ 0, \text{ if } V \geq -40 \end{cases}$$

$$\beta_j = \begin{cases} \frac{0.1212 \exp(-0.01052V)}{1 + \exp[-0.1378(V + 40.14)]} \\ 0.3 \frac{\exp[-2.535 \times 10^{-4}V]}{1 + \exp[-0.11(V + 32)]}, \text{ if } V \geq -40 \end{cases}$$

$$\tau_{\phi} = [n_{\phi} + \beta_{\phi}]^{-1}, \quad \phi_{\infty} = \alpha_{\phi}\tau_{\phi}, \text{ for } \phi = m, h, j$$

Time Independent K⁺ Current

$$I_{K1} = \frac{g_{K1}(V - E_K)}{1 + \exp(0.07(V - 80))}$$

Transient Outward K⁺ Current

$$I_{to} = g_{to}\alpha_{to}(V - E_K)$$

$$\alpha_{to} = 0.65 \left[\exp\left(-\frac{V + 10}{8.5}\right) + \exp\left(-\frac{V - 30}{59.0}\right) \right]^{-1}$$

$$\beta_{to} = 0.65 \left[2.5 + \exp\left(\frac{V + 82}{17.0}\right) \right]^{-1}$$

$$\alpha_{to1} = \begin{cases} 1 + \exp\left(-\frac{V + 20.47}{-17.54}\right) \\ 18.53 + \exp\left(\frac{V + 113.7}{10.95}\right) \end{cases}$$

$$\alpha_{to2} = \begin{cases} 1 + \exp\left(-\frac{V + 126}{7.44}\right) \\ 35.56 + \exp\left(\frac{V + 126}{7.44}\right) \end{cases}$$

$$\tau_{to1} = [n_{to1} + \beta_{to1}]^{-1}K_{to1}$$

$$\tau_{to2} = [n_{to2} + \beta_{to2}]^{-1}K_{to2}$$

Ultraparal Delayed Rectifier K⁺ Current

$$I_{Kur} = g_{Kur}\alpha_{Kur}(V - E_K)$$

$$g_{Kur} = 0.005 + \frac{0.05}{1 + \exp\left(-\frac{V - 15}{13}\right)}$$

$$\alpha_{Kur} = 0.65 \left[\exp\left(-\frac{V + 10}{8.5}\right) + \exp\left(-\frac{V - 30}{59.0}\right) \right]^{-1}$$

$$\beta_{Kur} = 0.65 \left[2.5 + \exp\left(\frac{V + 82}{17.0}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{Kur} = \frac{V + 37.78}{0.035(V + 10) \left[1 + \exp\left(-\frac{V + 10}{-6.24}\right) \right]}$$

$$d_{Kur} = \left[1 + \exp\left(-\frac{V + 10}{8}\right) \right]^{-1}$$

$$f_{Kur} = \left[1 + \exp\left(\frac{V + 28}{6.9}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{CaL} = 2, \quad \tau_{CaL1} = \left[1 + \frac{[Ca^{2+}]_i}{0.00035} \right]^{-1}$$

$$I_{NaK} = g_{NaK} \frac{V - 158}{16}$$

$$\tau_{NaK} = [n_{NaK} + \beta_{NaK}]^{-1}K_{NaK}$$

$$\alpha_{NaK} = \begin{cases} 1 + \exp\left(-\frac{V - 94.45}{27.48}\right) \\ 1 + \exp\left(-\frac{V - 14.1}{5}\right) \end{cases}$$

$$\beta_{NaK} = 7.3898 \times 10^{-5} \frac{V - 3.3328}{\exp\left[5.1237(V - 1)\right]}$$

$$\tau_{NaK} = [n_{NaK} + \beta_{NaK}]^{-1}K_{NaK}$$

$$\alpha_{NaK1} = \begin{cases} 1 + \exp\left(-\frac{V + 14.1}{6.5}\right) \\ 4 \times 10^{-3} \frac{V - 19.9}{1 - \exp\left(-\frac{V - 19.9}{17}\right)} \end{cases}$$

$$\alpha_{NaK2} = 4 \times 10^{-3} \frac{V - 19.9}{1 - \exp\left(-\frac{V - 19.9}{17}\right)}$$

$$\tau_{NaK1} = 3.5 \times 10^{-5} \frac{V - 19.9}{\exp\left(\frac{V - 19.9}{9}\right) - 1}$$

$$\tau_{NaK2} = 8.0, \quad \tau_{NaK3} = \left[1 + \exp\left(\frac{f_{NaK}}{13}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{NaK} = \frac{1}{2} [n_{NaK} + \beta_{NaK}]^{-1}$$

$$x_{L-TypeCa^{2+}} = \left[1 + \exp\left(-\frac{V - 19.9}{12.7}\right) \right]^{-1}$$

$$I_{L-TypeCa^{2+}} = g_{L-TypeCa^{2+}} d f f_{Ca}(V - 65)$$

$$\tau_{L-TypeCa^{2+}} = \frac{1 - \exp\left(-\frac{V + 10}{-6.24}\right)}{0.035(V + 10) \left[1 + \exp\left(-\frac{V + 10}{-6.24}\right) \right]}$$

$$d_{L-TypeCa^{2+}} = \left[1 + \exp\left(-\frac{V + 10}{8}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{L-TypeCa^{2+}} = 90.0197 \exp[-0.0337(V + 10)^2] + 0.02^{-1}$$

$$f_{L-TypeCa^{2+}} = \left[1 + \exp\left(\frac{V + 28}{6.9}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{CaL} = 2, \quad \tau_{CaL1} = \left[1 + \frac{[Ca^{2+}]_i}{0.00035} \right]^{-1}$$

$$I_{Na^{+}K^{+}} = I_{NaK} \frac{1}{1 + [K_{m,NaK}][Na^+]_i^2 \left(\frac{[K^+]_i}{K_{m,NaK}} + 1 \right)}$$

$$f_{Na^{+}K^{+}} = \left[1 + 0.1245 \exp\left(-0.1 \frac{FV}{RT}\right) + 0.0365 \exp\left(-\frac{FV}{RT}\right) \right]^{-1}$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{[Na^+]_i}{67.3}\right) - 1 \right]$$

$$I_{Na^{+}/Ca^{2+}} = \frac{f_{Na^{+}K^{+}} K}{(K^+)_i}$$

$$I_{NaCa} = \frac{f_{NaCa} \sigma_{NaCa} K}{(K^+)_i}$$

$$I_{Ca^{2+}} = f_{Ca^{2+}} \frac{[Ca^{2+}]_i}{0.0005}$$

$$I_{Ca^{2+}} = K_{rel} \mu^{1/2} [Ca^{2+}]_{rel}$$

$$\tau_{Ca^{2+}} = 8.0, \quad \tau_{Ca^{2+}1} = \left[1 + \exp\left(\frac{f_{Ca^{2+}}}{13}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{Ca^{2+}} = 1.91 + 2.09 \left[1 + \exp\left(-\frac{F_s - 3.4175 \times 10^{17}}{13.67 \times 10^{14}}\right) \right]^{-1}$$

$$V_{rel} = 1 - \left[1 + \exp\left(-\frac{F_s - 6.835 \times 10^{14}}{13.67 \times 10^{14}}\right) \right]^{-1}$$

$$\tau_{rel} = 6.0 \frac{1 - \exp\left(-\frac{V - 7.9}{5}\right)}{\left[1 + 0.3 \exp\left(-\frac{V - 7.9}{5}\right) \right] (V - 7.9)}$$

$$w_{rel} = 1 - \left[1 + \exp\left(-\frac{V - 40}{17}\right) \right]^{-1}$$

$$F_s = 10^{-12} V_{rel} f_{rel} = \frac{5 \times 10^{13}}{F} \left[\frac{1}{2} I_{Ca} - \frac{1}{5} f_{NaCa} \right]$$

$$I_{rel} = \frac{[Ca^{2+}]_{rel} - [Ca^{2+}]_{tot}}{\tau_{rel}}$$

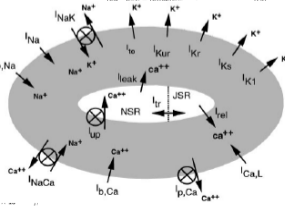
$$\tau_{rel} = 180$$

$$I_{rel} = \frac{I_{rel,trans}}{1 + [K_{sp,Ca^{2+}}][Ca^{2+}]_i}$$

$$I_{rel,trans} = \frac{[Ca^{2+}]_{rel}}{[Ca^{2+}]_{tot,trans}} I_{rel,trans}$$

$$I_{rel,trans} = \frac{[Ca^{2+}]_{rel}}{[Ca^{2+}]_{tot,trans}} I_{rel,trans}$$

$$I_{rel,trans} = \frac{[Ca^{2+}]_{rel}}{[Ca^{2+}]_{tot,trans}} I_{rel,trans}$$



Autre exemple : modélisation géométrique

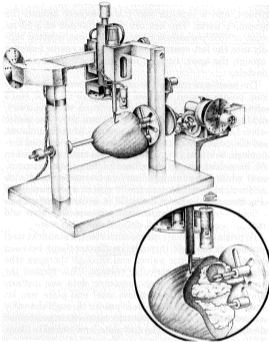


FIG. 2. Schematic diagram of measurement rig. Inset: more detailed view of end plate assembly and measurement probe. Cutaway view of ventricles reveals location pins inserting into silicone rubber casts of right and left ventricles.

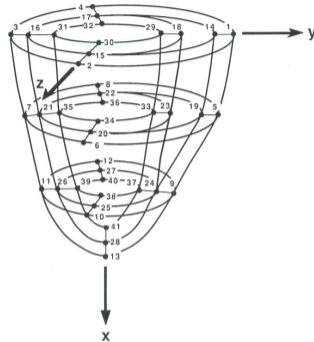


FIG. 4. Schematic diagram of finite element mesh. Node numbers are shown. Free wall of right ventricle is represented by 4 elements (nodes 1, 2, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 12, 14, 15, 17, 19, 20, 22, 24, 25, 27).

A material point in the myocardium described by the coordinates (λ, μ, θ) has rectangular Cartesian coordinates

$$x = a \cosh \lambda \cos \mu$$

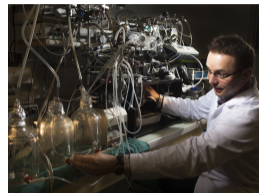
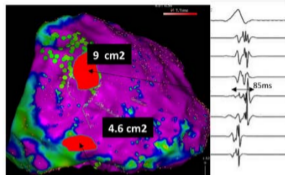
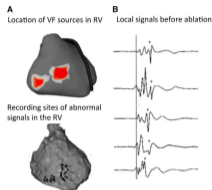
$$y = a \sinh \lambda \sin \mu \cos \theta$$

$$z = a \sinh \lambda \sin \mu \sin \theta$$

where a is the location of the focus on the x -axis, as shown in Fig. 1A.

« We developed a mathematical representation of ventricular geometry and muscle fiber organization using three-dimensional finite elements referred to a prolate spheroid coordinate system. » *PM Nielsen & al, 1991.*

Exemples de problèmes de calcul scientifique



Biologie : modéliser plus finement la physiologie cellulaires, et les interactions entre cellules – Mitocard

Science médicale : simuler un coeur cellule par cellule – Exacard, Microcard

Disp. médicaux, médicaments : Utiliser le calcul scientifique pour construire des essais cliniques virtuels – SimCardioTest

Diagnostic : retrouver les paramètres des équations à partir des ECG ou autres mesures électriques

Modèle bidomaine

- Équation de Laplace Pour deux potentiels électrique superposés dans le coeur :

$$\begin{aligned}\operatorname{div}(\sigma_i \nabla \phi_i) &= A_m (\partial_t(\phi_i - \phi_e) + I_{\text{ion}}(\phi_i - \phi_e, \dots)) \\ -\operatorname{div}(\sigma_e \nabla u_e) &= A_m (\partial_t(\phi_i - \phi_e) + I_{\text{ion}}(\phi_i - \phi_e, \dots))\end{aligned}$$

avec des conditions aux limites

- Le courant I_{ion} est calculé par couplage avec un système d'EDO,
 - ▶ entre 2 et plus de 100 équations (cf modèle CRN vu précédemment)
 - ▶ qui peut être *complexe et raide*

Quelques problèmes d'analyse de ces équations

- Est-ce que le problème est bien posé ? Existence, unicité de la solution
- Quelles sont les propriétés de la solution ? Périodicité, bornes, etc
- Que dire des situations limites ? Couches fines, petites perturbation
- Peut-on retrouver des paramètres des équations à partir des mesures de la solution ?
Problèmes inverse, optimisation

Les solutions n'ont pas d'expression analytique, calculable

→ On cherche alors une solution approchée

Quelques problèmes d'analyse de ces équations

- Est-ce que le problème est bien posé ? Existence, unicité de la solution
- Quelles sont les propriétés de la solution ? Périodicité, bornes, etc
- Que dire des situations limites ? Couches fines, petites perturbation
- Peut-on retrouver des paramètres des équations à partir des mesures de la solution ?
Problèmes inverse, optimisation

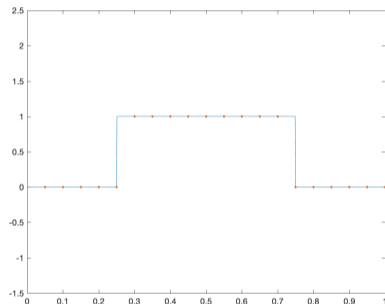
Les solutions n'ont pas d'expression analytique, calculable

→ On cherche alors une solution approchée

Discrétisation : méthode numérique

Une équation modèle : l'équation de transport

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) &= 0 \text{ sur } [0, 1] \text{ et pour } t > 0 \\ u(0, x) &= u_0(x) \text{ sur } [0, 1] \\ u(t, 0) &= u(t, 1)\end{aligned}$$



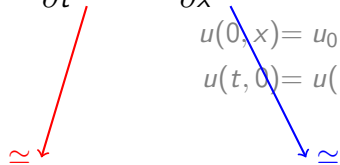
On cherche une solution approchée sous forme discrète : u_i^n sur les points $x_i = i dx$ d'une grille, aux instants successifs $t^n = n dt$.

Discrétisation : méthode numérique

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0 \text{ sur } [0, 1] \text{ et pour } t > 0$$

$$u(0, x) = u_0(x) \text{ sur } [0, 1]$$

$$u(t, 0) = u(t, 1)$$


$$\frac{u(t^{n+1}, x_j) - u(t^n, x_j)}{dt} + \frac{u(t^n, x_{j+1}) - u(t^n, x_{j-1})}{2 dx} \approx 0$$

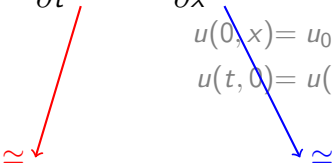
$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{dt} + \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2 dx} = 0$$

Discrétisation : méthode numérique

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0 \text{ sur } [0, 1] \text{ et pour } t > 0$$

$$u(0, x) = u_0(x) \text{ sur } [0, 1]$$

$$u(t, 0) = u(t, 1)$$


$$\frac{u(t^{n+1}, x_j) - u(t^n, x_j)}{dt} + \frac{u(t^n, x_{j+1}) - u(t^n, x_{j-1})}{2 dx} \approx 0$$

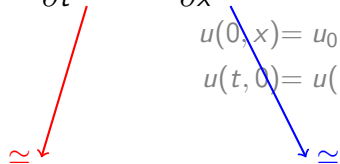
$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{dt} + \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2 dx} = 0$$

Discrétisation : méthode numérique

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0 \text{ sur } [0, 1] \text{ et pour } t > 0$$

$$u(0, x) = u_0(x) \text{ sur } [0, 1]$$

$$u(t, 0) = u(t, 1)$$


$$\frac{u(t^{n+1}, x_j) - u(t^n, x_j)}{dt} + \frac{u(t^n, x_{j+1}) - u(t^n, x_{j-1})}{2 dx} \approx 0$$

Formule finale de calcul : $u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{dt}{2 dx} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n)$

Transport 1D : précision

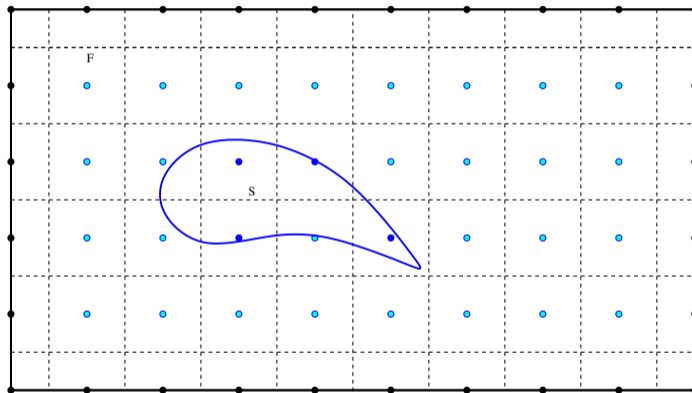
Transport 1D : stabilité

Quelques propriétés des méthodes de discrétisation

Etude des propriétés de ces méthodes numériques :

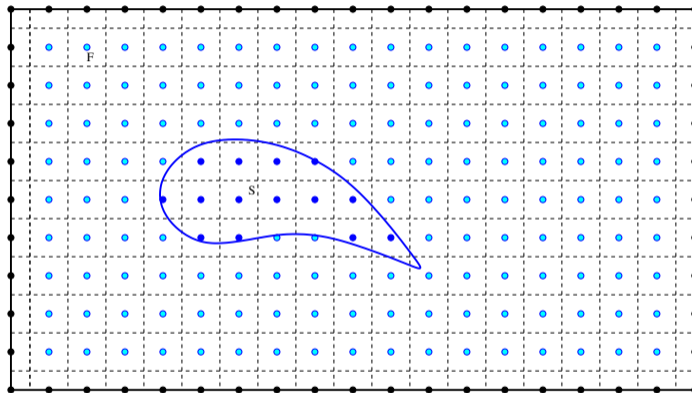
- Stabilité (pas d'oscillations parasites)
- Précision de l'approximation
- Convergence vers la vraie solution
- Conservation des propriétés de la vraie solution (périodicité, positivité...)
- ...

Maillages



↔ Pas beaucoup de points \Rightarrow ... pas très précis ...

Maillages



↔ Plus de points ⇒ ... plus précis

Les maillages non structurés

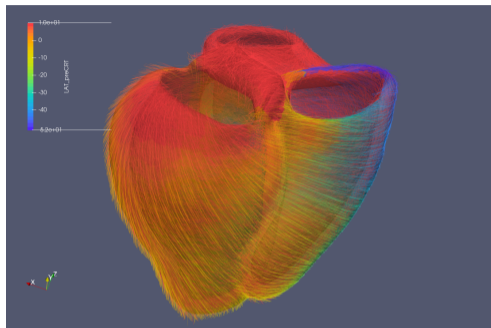
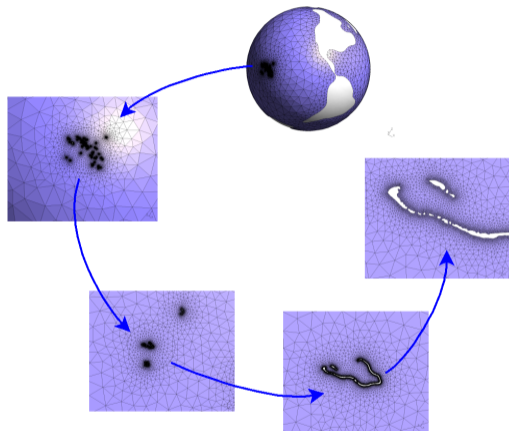


Figure – Des ventricules avec la direction des fibres musculaires (par IRM, un cochon)

Nb points	Nb tetraèdres
294 348	1 433 548

Techniques de maillages



Mesh generated using Gmsh
<http://www.geuz.org/gmsh>

Figure – Maillage non structuré des océans – Provenance des images : Jean-François Remacle, UCL

Maillages mobiles

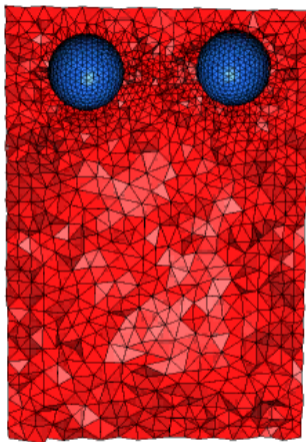
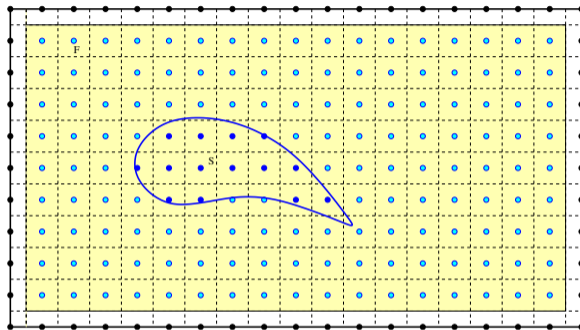


Figure – Provenance des images : Cécile Dobrzynski, Institut de Mathématiques de Bordeaux

Calcul parallèle

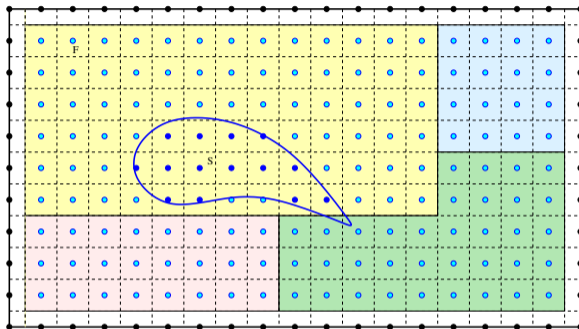


Calcul séquentiel : un seul domaine, un seul processeur

Calcul parallèle : décomposition de domaine, 4 processeurs

Répartition du travail homogène \Rightarrow bon partitionnement !

Calcul parallèle

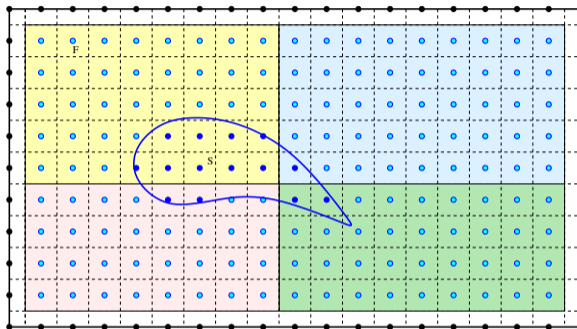


Calcul séquentiel : un seul domaine, un seul processeur

Calcul parallèle : décomposition de domaine, 4 processeurs

Bleu pas beaucoup de travail comparé à jaune \Rightarrow mauvais partitionnement ...

Calcul parallèle



Calcul séquentiel : un seul domaine, un seul processeur

Calcul parallèle : décomposition de domaine, 4 processeurs

Répartition du travail homogène \Rightarrow bon partitionnement !

Performances récentes en cardiologie

maillage	Δx (μm)	Δt (μs)	Nb sommets
M1	200	10	2.16×10^7
M2	100	5	1.68×10^8
M4	50	2	1.33×10^9
M8	25	0.5	1.05×10^{10}



Table – D'après M. Potse & al. 2020

Possible grace à la disponibilité de

► Joliot-Curie : le supercalculateur dédié à la recherche le plus puissant de France – juin 2020

collaboration chercheurs de l'IMB et du LABRI
250 000 coeurs de calcul

Performances récentes en cardiologie

maillage	Δx (μm)	Δt (μs)	Nb sommets
M1	200	10	2.16×10^7
M2	100	5	1.68×10^8
M4	50	2	1.33×10^9
M8	25	0.5	1.05×10^{10}

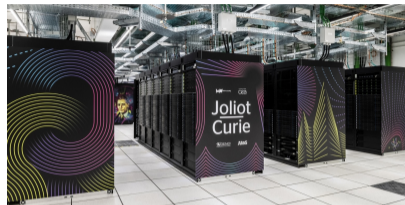


Table – D'après M. Potse & al. 2020

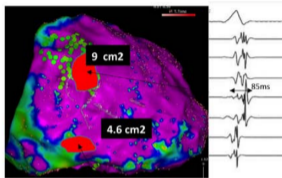
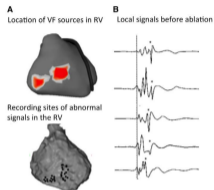
Possible grace à la disponibilité de

▸ Joliot-Curie : le supercalculateur dédié à la recherche le plus puissant de France – juin 2020

collaboration chercheurs de l'IMB et du LABRI
250 000 coeurs de calcul

Des questions communes

Entre médecine et mathématiques



La mort subite, qu'est-ce que c'est ?
Comment ça marche ?
Peut-on la prévoir ?
Et plein d'autres questions...

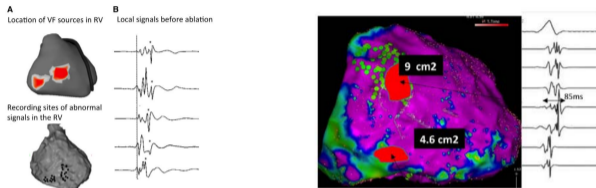
Médecine : comprendre et prévoir, prendre en charge

Math et calcul scientifique : très nombreuses questions

- modéliser, simuler les détails les plus fins
- comprendre l'effet de (petites ou grandes) perturbations sur les signaux
- relier les signaux (et autres données des patients) au fonctionnement de leur coeur → problèmes inverse.

Des questions communes

Entre médecine et mathématiques



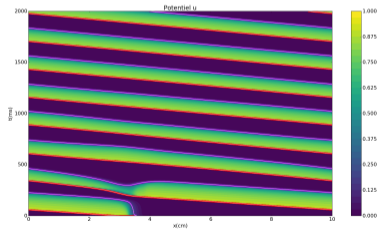
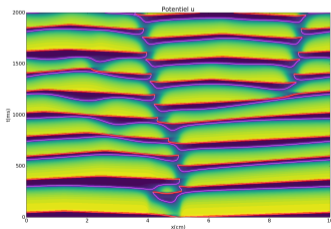
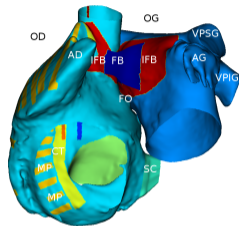
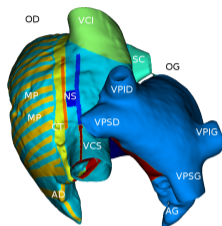
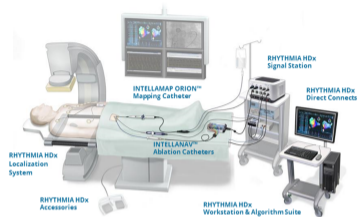
La mort subite, qu'est-ce que c'est ?
Comment ça marche ?
Peut-on la prévoir ?
Et plein d'autres questions...

Médecine : comprendre et prévoir, prendre en charge

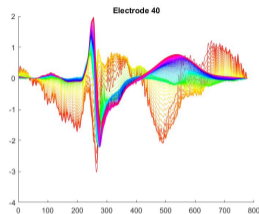
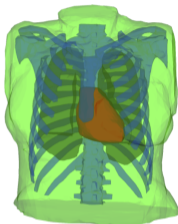
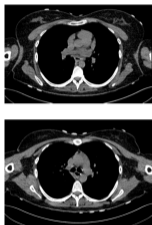
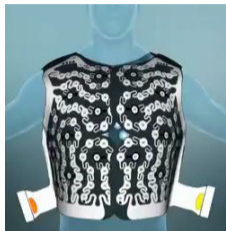
Math et calcul scientifique : très nombreuses questions

- modéliser, simuler les détails les plus fins
- comprendre l'effet de (petites ou grandes) perturbations sur les signaux
- relier les signaux (et autres données des patients) au fonctionnement de leur coeur → **problèmes inverse**.

Exemple difficile : la fibrillation atriale



Des données à foison



y compris non-invasive

- Imagerie (CT, IRM, etc)
- Signaux, par exemple :

$$252 \times 1/\text{ms} \times 1\text{h} = 252 \times 10^3 \times 3600 = 907\,200\,000.$$

- Que faire de toutes ces données ?

Les défis modernes du calcul scientifique

- Méthodes basées sur les données

nouvelles méthodes de statistique, apprentissage automatique

Corrèlent les données entre elles, quand c'est possible

Par exemple, peut-on trier entre malade et sain ?

- Expertise sur les modèles numérique

Explique les mécanismes sous-jacent aux données

Allier modèles explicatifs fins avec la puissance des méthodes basées sur les données ?

Interaction entre les données des systèmes connectés et les modèles expliquant les mécanismes (dans tous les champs de la physique, de la santé, de l'ingénierie)

Merci de votre attention



www.wooclap.com/MLTHPU

Des questions ?