À l'échelle macroscopique, le système avec effet spatial diffusif est donc :

$$\begin{cases} \partial_t u &= \operatorname{div}(D\,\nabla u) + ku(1-u)(u-a) - uz \\ \partial_t z &= -e(ku(u-a-1)+z). \end{cases} \tag{4.5}$$

4.2.1 Adimensionnement

Pour que les phénomènes observés soient toujours semblables dans un intervalle donné, un adimensionnement du système est fait avec $\tau = et$ et $\xi = ex$ (pour chaque dimension) car ceci donne $\forall e, (\tau,\xi) \in [0;1]^2$. On a alors :

$$\begin{cases} e\partial_\tau u &= e^2\operatorname{div}(D\,\nabla u) + ku(1-u)(u-a) - uz \\ \partial_\tau z &= -ku(u-a-1) - z. \end{cases} \tag{4.6}$$

Puis on redimensionne spatialement pour que le phénomène soit adapté à la taille du maillage. On calcule donc la plus grande dimension l d'une boîte englobante du maillage pour la mise à l'échelle spatiale, et avec $x = l\xi$:

$$\begin{cases} e\partial_\tau u &= l^2 e^2\operatorname{div}(D\,\nabla u) + ku(1-u)(u-a) - uz \\ \partial_\tau z &= -ku(u-a-1) - z. \end{cases} \tag{4.7}$$

Pour que temporellement il soit adapté à la dynamique du phénomène cardiaque, comme la systole représente $1/3$ du cycle cardiaque (qui dure environ 0.8 s), on multiplie par 0,26 le temps adimensionné τ pour obtenir le temps réel t adapté au phénomène, ce qui donne une bonne correspondance des phénomènes simulés (dépolarisation, plateau) avec le déroulement de l'ECG. Pour découpler le pas de temps limite $\Delta\tau$ lié au système et le pas de temps réel Δt lié à la durée du phénomène, on résout temporellement le système adimensionné en temps (variable τ) présenté ci-dessus, puis on multiplie le temps total intégré par 0,26 pour savoir à quel instant du cycle on se situe.

Les paramètres utilisés sont principalement tirés de [Aliev and Panfilov, 1996]:

- $e = 0{,}01$
- $k = 8$
- $a = 0{,}15$
- $d_0 = 1$
- $r = 0{,}5$
- $\Delta\tau = 5.10^{-4}$

unitaire, elle est de ρ dans le cas de la matrice de masse de mécanique du chapitre suivant, qui est aussi prise diagonale).

On calcule la matrice de rigidité $\mathcal{K}$ en faisant les produits scalaires des vecteurs de forme détaillés dans l'annexe B, qui représentent les gradients des fonctions de base. Dans notre cas, les fonctions de bases sont linéaires, donc leur gradient est constant par tétraèdre, l'intégration volumique revient donc à multiplier par le volume du tétraèdre V_T. Soit :

$$\mathcal{K}_{ij} = V_T \frac{S_i}{6V_T} \cdot \frac{S_j}{6V_T} = \frac{S_i \,.\, S_j}{36V_T}$$

avec les S_i définis dans l'annexe B.

On obtient donc pour la formulation globale :

$$\partial_t u_h = -\mathcal{M}^{-1}\mathcal{K}u_h$$

Si l'on revient au système initial que l'on veut résoudre (4.7), il suffit de modifier la matrice de raideur pour prendre en compte l'anisotropie :

$$\mathcal{K}_{ij} = \int_\Omega D\nabla\phi_i \,.\nabla\phi_j$$

en prenant soin de replacer D dans le repère cartésien (il a été définit dans le repère de la fibre).

Pour l'intégration temporelle, nous avons mis en œuvre les schémas explicites d'Euler et Runge–Kutta d'ordre 4. Ce dernier a permis d'augmenter le pas de temps d'un facteur 4, mais le coût de calcul étant multiplié par 4, il n'y a pas de gain de temps. Le gain en précision, étudié par Yves Coudière, n'a pas paru significatif, le schéma d'Euler est donc utilisé pour la suite.

Pour le schéma explicite d'Euler, la mise à jour donne :

$$\left\{\begin{array}{lcl} u^{\tau+\Delta\tau} & = & u^\tau + \Delta\tau/e\big[-l^2e^2\mathcal{M}^{-1}\mathcal{K}u^\tau + ku^\tau(1-u^\tau)(u^\tau - a) - u^\tau z^\tau\big] \\ z^{\tau+\Delta\tau} & = & z^\tau + \Delta\tau\big[-ku^\tau(u^\tau - a - 1) - z^\tau\big] \end{array}\right. \tag{4.14}$$

En pratique, les valeurs $\mathcal{M}_{ii}$ et $\mathcal{K}_{ii}$ sont stockées au niveau du nœud i et les valeurs $\mathcal{K}_{ij}$ sont stockées au niveau de l'arête reliant les nœuds i et j, ce qui permet de résoudre ce système localement sans réaliser l'assemblage des matrices $\mathcal{M}$ et $\mathcal{K}$ (comme dans l'approche masse-tenseurs pour la résolution mécanique [Cotin *et al.*, 2000]). Cela permet aussi de facilement modifier les paramètres électriques localement.

Donc on obtient pour le nœud i :

$$\left\{\begin{array}{lcl} u_i^{\tau+\Delta\tau} & = & u_i^\tau + \Delta\tau/e\big[-l^2e^2\mathcal{M}_{ii}^{-1}\sum_{j\in J}\mathcal{K}_{ij}u_j^\tau + ku_i^\tau(1-u_i^\tau)(u_i^\tau-a) - u_i^\tau z_i^\tau\big] \\ z_i^{\tau+\Delta\tau} & = & z_i^\tau + \Delta\tau\big[-ku_i^\tau(u_i^\tau-a-1) - z_i^\tau\big] \end{array}\right. \tag{4.15}$$

avec J l'ensemble des indices des nœuds voisins de i, auquel on ajoute l'indice i.

La contrainte de stabilité liée à l'approximation de Δu est $\Delta\tau_c < h^2/el$ et celle liée à l'approximation de $u(1-u)(u-a)$ est $\Delta\tau_c < e/1-a$, avec h le pas d'espace (en pratique, on prend la longueur d'arête maximale). Ce qui oblige à prendre un pas de temps très faible pour garantir la stabilité (environ 10^{-4}).

Une réflexion est menée sur l'utilisation d'un schéma semi-implicite, ce qui permet une bien meilleure stabilité, et ceci devrait être réalisé dans le cadre d'ICEMA-2, en même temps que la parallélisation de ce calcul.

4.3.2 Conditions limites et conditions initiales

Pour les conditions initiales, la conduction dans le nœud auriculo-ventriculaire est très lente, mais quand le potentiel d'action sort du nœud, il se propage tout d'un coup à une vitesse très vive jusqu'aux fibres de Purkinje à travers le faisceau de His. Le réseau des fibres de Purkinje se ramifie comme un arbre à l'intérieur des ventricules et se termine à la surface de l'endocarde ventriculaire (vitesses de conduction : nœud auriculo-ventriculaire 0,05 ms^{-1}, faisceau de His 1-1,5 ms^{-1}, Purkinje 3-3,5 ms^{-1}).

Ce réseau spécial de conduction n'est pas modélisé de façon histologique ni physiologique mais uniquement phénoménologique. Les conditions initiales correspondent à un potentiel nul à tous les nœuds, sauf sur les nœuds de la surface des endocardes représentant les extrémités du réseau de Purkinje. La condition initiale pour ces nœuds là est un potentiel u_{init} imposé pendant un temps donné t_{init} à partir d'un temps t_0. Il faut que l'intégrale de ce signal ($u_{init}\,t_{init}$) soit supérieure à un certain seuil pour que le processus de réaction-diffusion se déclenche.

Ceci est synchronisé sur l'ECG : t_0 correspond au début de l'onde Q sur l'ECG (voir page 15) et t_{init} à sa durée, car cette onde représente l'instant où la vague électrique commence sa propagation dans le myocarde.

Les conditions limites imposées sur la surface du maillage sont des conditions de Neumann : les valeurs du potentiel sont libres, mais la dérivée normale sur la frontière est nulle. Il n'y a donc pas de réflexion du potentiel sur la surface.

4.3.3 Temps de calcul

Le calcul de la vague de propagation du potentiel d'action prend quelques minutes sur un PC standard, dans le cas d'un maillage de 10 000 à 40 000 éléments. Un travail