

# Mini-Projet MAP551 : Ondes progressives dans un milieu excitable : Belousov-Zhabotinsky

Léo Simpson, Ezra Rozier

January 2019

## 1 Introduction

Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à des résolutions numériques des équations de Belousov-Zhabotinsky pour le cas de trois espèces et aux qualités de convergence des méthodes numériques.

L'équation de Belousov-Zhabotinsky est une équation qui décrit les variations spatio-temporelles de la concentration d'espèces lors d'une réaction chimique. Ces équations s'écrivent de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t a - D_a \partial_x^2 a = \frac{1}{\mu}(-qa - ab + fc) \\ \partial_t b - D_b \partial_x^2 b = \frac{1}{\epsilon}(qa - ab + b(1 - b)) \\ \partial_t c - D_c \partial_x^2 c = b - c \end{array} \right. \quad (1)$$

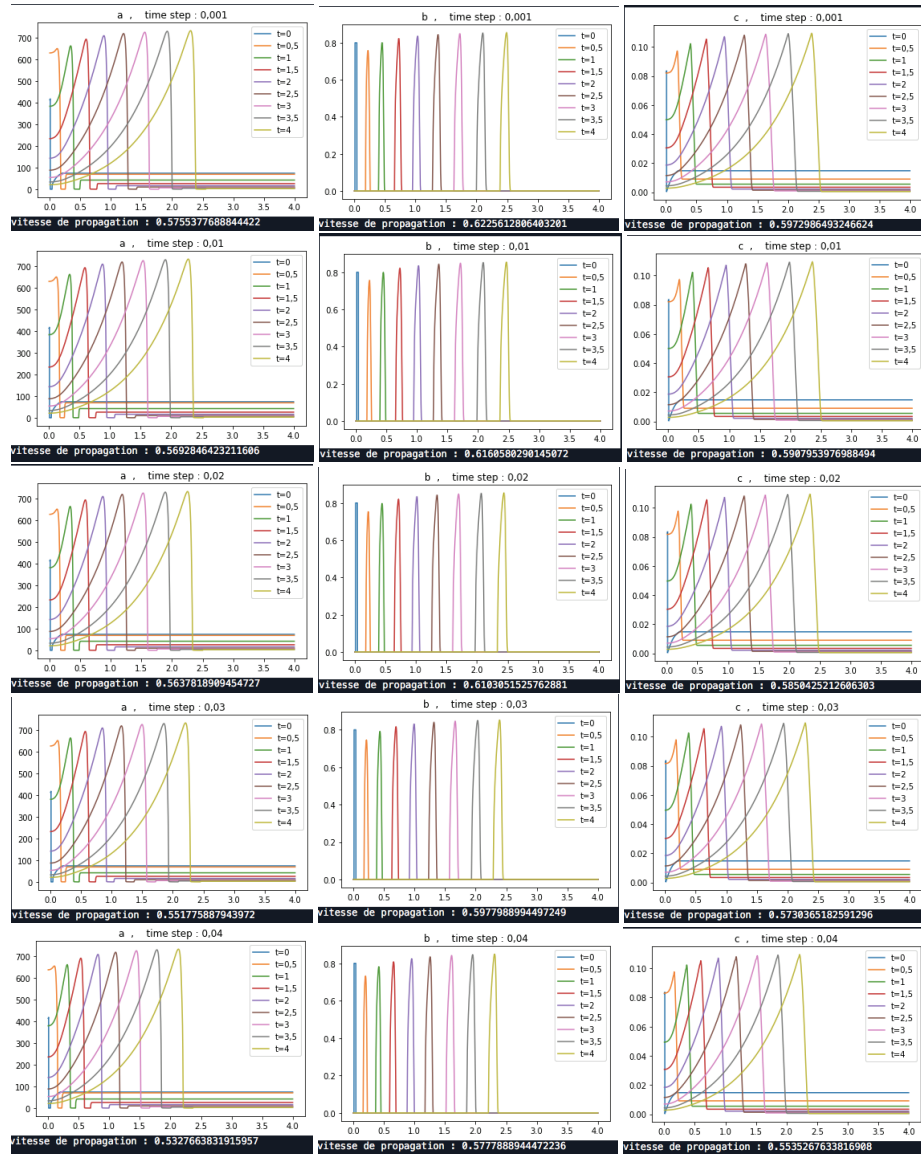
Nous allons étudier l'évolution spacio-temporelle dans le cas d'une seule dimension d'espace et nous remarquerons des propriétés sur le rapport entre l'erreur et le pas de temps d'intégration. Nous justifierons enfin pourquoi nous avons fait le choix de la méthode de Strang dans ce cas.

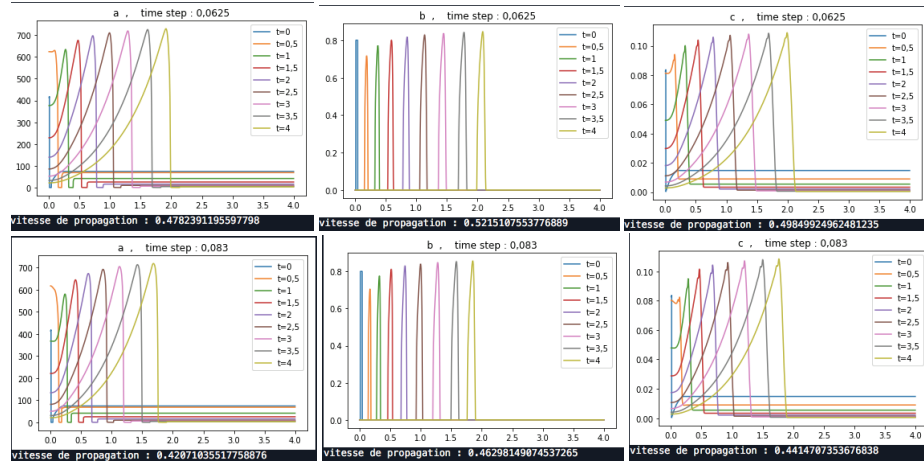
## 2 Traveling waves for the BZ reaction in 1D

### Question2.1

Nous avons simulé la propagation de l'onde pour différent pas de temps d'intégration, et nous associons pour chaque pas de temps, la vitesse de propagation de l'onde.

Le simulations nous donnent la chose suivante :





La vitesse donnée est la vitesse moyenne entre 0 et 4 secondes. On observe que quand le pas de temps augmente, la vitesse de propagation diminue. On a par exemple pour la concentration du réactif  $a$  :  $v = 0.576$  quand  $dt = 0.001$  ;  $v = 0.569$  quand  $dt = 0.01$  ;  $v = 0.564$  quand  $dt = 0.02$  ;  $v = 0.552$  quand  $dt = 0.03$  ;  $v = 0.533$  quand  $dt = 0.04$  ;  $v = 0.478$  quand  $dt = 0.06$  ;  $v = 0.421$  quand  $dt = 0.08$ . À partir d'un pas de temps de 0,03s on voit que l'intégration prédit mal la vitesse de propagation (on a considéré notre solution avec un pas de temps de 0,001s comme une solution quasi-exacte).

## Question 2.2

Nous allons nous intéresser aux erreurs de notre méthode d'intégration. Pour cela nous prenons comme référence (solution quasi-exacte) le cas d'un pas de temps de  $0,001s$  et nous calculerons l'erreur absolue moyenne (en tous les points d'intégration). On trace donc la solution pour ce petit pas de temps, ainsi que la solution pour un pas de temps un peu plus grand, et on calcule la différence des deux. Ensuite, on calcule l'erreur moyenne selon la norme 1 en moyennant la valeur absolue de l'erreur sur tous les points.

Pour des pas temps allant de  $0,002s$  (deux fois le pas de temps pour la solution de référence) à  $0,04$ , l'erreur reste surtout localisée à la fin de l'onde car c'est à cet endroit que la raideur est la plus importante.

En effet, on a déjà remarqué dans la question précédente que lorsque le pas de temps augmente, la vitesse de propagation diminue un petit peu, et vu la raideur de cette onde, on remarque qu'un décalage minime de l'onde provoque une erreur très importante autour du point de décalage.

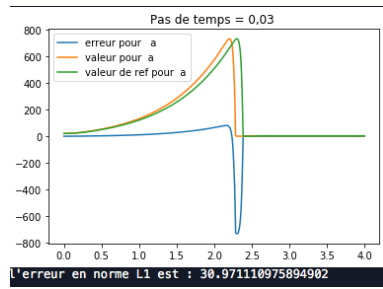


Figure 1:  $dt = 0,003$

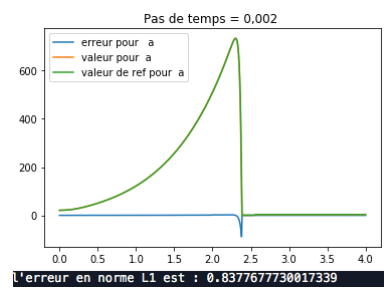


Figure 2:  $dt = 0,002$

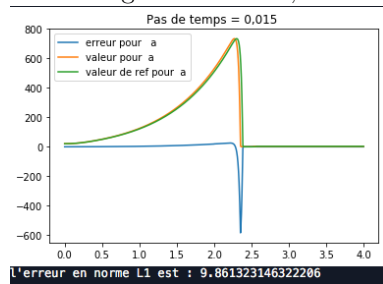


Figure 3:  $dt = 0,0015$

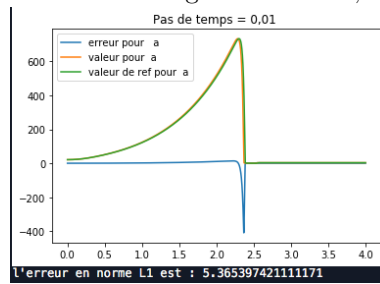
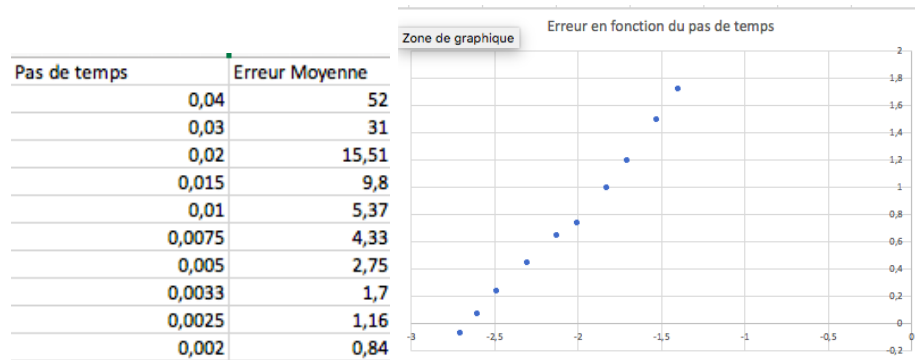


Figure 4:  $dt = 0,001$

Figure 5: Graphe de l'erreur, de la solution de référence, et de la solution approchée ainsi que la valeur moyenne de l'erreur

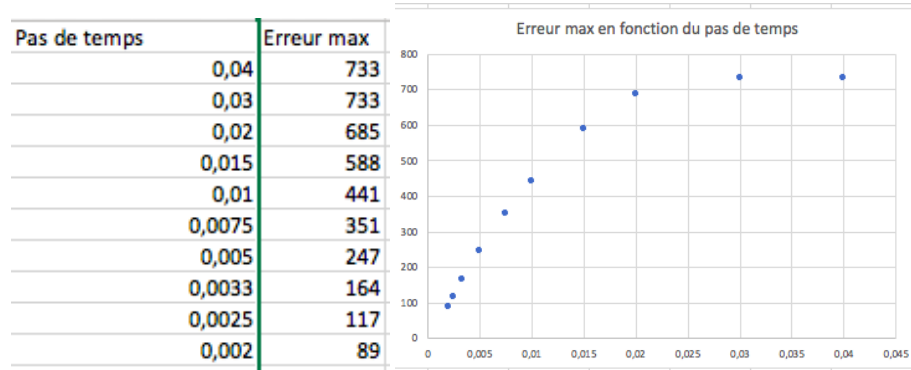
Il est donc intéressant de noter l'erreur en fonction du pas de temps pour comprendre comment évolue la convergence du modèle, ainsi que l'ordre de celui-ci. Or cela dépend de la manière de calculer l'erreur. Nous allons donc retenir deux méthodes de calcul de l'erreur : la calculer en norme L1 puis en norme infinie, et trouver dans les deux cas la corrélation avec le pas de temps. Étudions d'abord l'erreur moyenne : voici les valeurs de cette erreur moyenne pour quelques pas de temps :



On a ici tracé la dépendance en pas de temps en échelle logarithmique.

Cela correspond à un ordre 1 bien que la méthode de Strang est censée nous donner une convergence d'ordre 2. Ceci montre que l'on a du mal à bien caractériser l'erreur. En effet, l'erreur est due à la différence de vitesse de diffusion. Or, vu la raideur de la courbe, un petit décalage sur la vitesse de propagation implique une très grande erreur autour de la fin de la vague. L'erreur moyenne est fortement influencée par ce phénomène et représente donc assez mal la convergence du modèle.

En ce qui concerne l'étude de l'erreur en norme infinie, voici la dépendance en pas de temps que l'on obtient :



Ici, le problème de caractérisation de l'erreur est encore plus flagrant. En effet on a une erreur qui se stabilise lorsque la vague de la solution approchée est "doublée" par la vague de la solution quasi-exacte. Il est donc difficile d'estimer un ordre de convergence.

### Question 2.3

Pour répondre à cette question, nous faisons d'abord des rappels sur la méthode de Strang en la comparant notamment à la méthode de Lie, vues en cours :

Ces méthodes dites de "splitting" sont basées sur le paradigme "Diviser pour mieux régner". Ces deux méthodes se basent sur des solutions d'équations différentielles du type suivant :

$X^t v_0$  est solution de :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = \Delta v \\ v(0) = v_0 \end{cases} \quad (2)$$

$Y^t w_0$  est solution de :

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} = F(w) \\ w(0) = w_0 \end{cases} \quad (3)$$

On a donc une partie diffusive et une partie réactive du phénomène étudié.

La formule de Lie donne une solution numérique approchée :

$$L^t u_0 = X^t Y^t u_0 \text{ ou } L^t u_0 = Y^t X^t u_0$$

C'est une méthode d'ordre 1.

La formule de Strang est par définition plus efficace car elle donne une méthode de résolution d'ordre 2 :

$$S^t u_0 = X^{t/2} Y^t X^{t/2} u_0 \text{ ou } S^t u_0 = Y^{t/2} X^t Y^{t/2} u_0$$

La nuance que nous étudions ici est la raison pour laquelle le choix a été fait dans la résolution numérique d'utiliser la solution de la partie réactive pour les demis pas de temps et la partie diffusive pour les pas de temps entiers.

Nous mettrons donc en regard les deux méthodes suivantes :

- méthode 1 : mettre la partie réactive pour les demis pas de temps.
- méthode 2 : mettre la partie diffusive pour les demis pas de temps.

Notre objectif est donc de dire pourquoi dans le cas présent, il est plus adapté d'utiliser la méthode 1.

Intéressons-nous au code de la fonction. On voit que la fonction de réaction crée une liste auxiliaire *uloc* qui est de taille *neq* (3 dans notre cas) et grâce à *uloc* la fonction changera directement les valeurs de la solution à l'intérieur de la liste *u*.

La fonction de diffusion quant à elle crée un nouveau tableau de la taille de *u* pour y mettre les valeurs voulues.

Ainsi l'espace mémoire occupé par la fonction de réaction est constant alors que l'espace mémoire occupé par la fonction de diffusion est linéaire en la taille de *u*.

Le coût mémoire de la méthode 1 est donc linéaire en la taille de *u* et est deux fois plus faible que le coût mémoire de la méthode 2. C'est pour cette raison que l'on utilise la méthode 1.

On a donc utilisé une méthode d'intégration qui est optimale pour notre cas. On a vu que l'ordre 2 de la convergence nous permettait d'avoir des résultats fidèles pour des pas de temps de splitting assez grand (0,02s) et nous permettait aussi d'accéder à des précisions bien supérieures (pas de temps de splitting : 0,001s). De plus le coût en mémoire de notre méthode reste raisonnable.