TP n°7
Modèle simplifié de Belouzov-Zhabotinsky

Les réactions chimiques de type Belouzov-Zhabotinsky (BZ) sont des réactions oscillantes générant en dimension deux des formes de spirales auto-organisées. Les équations complètes sont de type réaction-diffusion, mais nous allons voir qu'une modélisation simple à partir d'un système discret permet d'obtenir ces spirales.

1. **Equations et modélisation**
   Une description simplifiée de la réaction (BZ) est obtenue à partir de 3 espèces chimiques, A,B,C, réagissant suivant les équations suivantes :

$$\begin{aligned} A + B &\xrightarrow{\alpha} 2A \\ B + C &\xrightarrow{\beta} 2B \\ C + A &\xrightarrow{\gamma} 2C \end{aligned}$$

   α, β, γ étant des réels positifs.

   (a) En notant A_n, B_n et C_n les quantités des espèces A, B, et C au temps t_n, montrer que les quantités au temps t_{n+1} s'écrivent :

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A_n + A_n * (\alpha B_n - \gamma C_n) \\ B_{n+1} &= B_n + B_n * (\beta C_n - \alpha A_n) \\ C_{n+1} &= C_n + C_n * (\gamma A_n - \beta B_n) \end{aligned}$$

   (b) Programmer sous *scilab* l'évolution des trois quantités A,B,C et observer un système oscillant. On prendra par exemple, $A_0 = B_0 = C_0 = 0.1$ et $\alpha = 1.2$, $\beta = \gamma = 1$.

2. **Modèle 2D et introduction de la diffusion spatiale**
   A,B,C sont maintenant des matrices et leurs éléments (i,j) représentent la quantité de produit A,B ou C au point x_{ij}. En chaque point l'évolution de ces quantités se fait suivant le système décrit précédement (1.a).
   Comme nous allons le voir, l'introduction de la diffusion spatiale des espèces se fait en utilisant un opérateur de moyenne utilisant les points voisins.

   (a) On se place en dimension 1 pour simplifier les calculs. A partir d'une transformée de Fourier spatiale de l'équation de la chaleur

$$\partial_t U = \partial_{xx} U,$$

   déterminer le symbole exact, i.e l'opérateur $S(\omega, \delta t)$ tel que

$$\hat{U}(\omega, t + \delta t) = S(\omega, \delta t)\,\hat{U}(\omega, t).$$

   (b) Calculer le symbole approché $\tilde{S}$ obtenu en discrétisant l'équation de la chaleur par un schéma aux différences finies centrées d'ordre 2 en espace et un schéma d'Euler explicite en temps.

(c) Calculer le symbole $M(\omega)$ correspondant à l'opérateur de moyenne suivant :

$$U_i^{n+1} = 1/3\,(U_{i+1}^n + U_i^n + U_{i-1}^n).$$

En déduire que $\tilde{S}$ et M sont équivalents si $3\delta t = \delta x^2$.

(d) En dimension 2 on écrira l'opérateur de moyenne utilisant les points $\{U_{ij},\, -1 \leq i, j \leq 1\}$.

(e) Programmer en *scilab* le schéma correspondant au système discret (1.a) auquel on ajoute l'étape de moyenne précédente que l'on calculera avec la fonction **conv2**. Pour des raisons de stabilité, on contraindra les valeurs de A,B et C entre 0 et 1.

(f) Initialiser les matrices avec la fonction **random**, puis tracer par exemple la matrice A_n en utilisant la fonction **grayplot()**. Vous devriez observer des structures similaires à celles de la figure suivante.