Projet de modélisation numérique

Master recherche IPG-Paris 7

Sophie Androvandi et Marie Pétronille, Février 2005

1 Problème

Nous sommes confrontés à un problème de diffusion 1D mettant en jeu deux espèces en concentrations différentes, l'une radioactive (c_1), l'autre radiogénique (c_2) et dont les évolutions temporelle et spatiale sont régies par le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t}(t,x) = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}(t,x) - \lambda c_1(t,x) \quad \forall t \in]0,T], \forall x \in]0,L[\tag{1}$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}(t,x) = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}(t,x) + \lambda c_1(t,x) \quad \forall t \in]0,T], \forall x \in]0,L[\tag{2}$$

avec pour valeurs initiales :

$$c_1(0,x),\ c_2(0,x) \quad \text{donnés} \quad \forall x \in]0,L[\tag{3}$$

et pour conditions limites :

$$\frac{\partial c_1}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial c_1}{\partial x}(t,L) = \frac{\partial c_2}{\partial x}(t,0) = \frac{\partial c_2}{\partial x}(t,L) = 0 \quad \forall t \in]0,T] \tag{4}$$

où D_1 et D_2 sont les diffusivités de chacune des espèces 1 et 2 et λ est le coefficient de désintégration de l'espèce 1 en l'espèce 2.

Nous pouvons discuter physiquement les différents termes des équations (1) et (2) comme suit :

- $\frac{\partial c_1}{\partial t}(t,x)$ et $\frac{\partial c_2}{\partial t}(t,x)$ correspondent aux termes d'évolution temporelle des espèces 1 et 2 respectivement.
- $D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}(t,x)$ et $D_1 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}(t,x)$ sont caractéristiques des équations de diffusion et correspondent aux termes d'évolution spatiale des deux espèces.
- $\lambda c_1(t,x)$ correspond au terme de désintégration radioactive ; il est négatif dans l'équation (1) (perte de l'élément 1 par décroissance radioactive) et positif dans l'équation (2) (production de l'élément 2).

Les évolutions temporelles et spatiales des espèces 1 et 2 sont couplées par l'intermédiaire du terme $\lambda c_1(t,x)$. Il s'agit d'un couplage au degré 1. L'évolution de $c_2(t,x)$ va être conditionnée par celle de $c_1(t,x)$, mais pas l'inverse.

1.1 Solution analytique impulsionnelle pour un domaine infini

Nous cherchons à résoudre l'équation :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t}(t,x) = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}(t,x) - \lambda c_1(t,x) \quad \forall t \in]0,T], \forall x \in]0,L[\tag{5}$$

avec pour solution en t=0

$$c_1(0,x) = \delta(x). \tag{6}$$

Prenons ici comme définition d'une transformée de Fourier :

$$\tilde{c_1}(x) = e^{-2i\pi(kx)}$$

En appliquant cette formule à l'équation (5) en x, nous obtenons l'équation différentielle ordinaire en temps suivante pour la transformée $\tilde{c_1}(t,k)$:

$$\frac{\partial \tilde{c_1}(t,k)}{\partial t} = -4\pi^2 k^2 D_1 \tilde{c_1}(t,k) - \lambda \tilde{c_1}(t,k).$$

En intégrant par rapport au temps :

$$\tilde{c_1}(t,k) = \tilde{c_1}(0,k) e^{-(4\pi^2 k^2 D_1 + \lambda)t}.$$

D'après la condition initiale donnée par l'équation (6), mais dans le domaine de Fourier, nous obtenons finalement :

$$\tilde{c_1}(t,k) = \delta(x) e^{-(4\pi^2 k^2 D_1 + \lambda)t} \tag{7}$$

Nous effectuons ensuite le calcul de la transformée de Fourier inverse pour revenir dans l'espace initial. Nous avons donc :

$$c_1(t,x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(4\pi^2 k^2 D_1 + \lambda)t} e^{2ikx\pi} dk$$

soit

$$c_1(t,x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{(-4\pi^2 k^2 D_1 t + 2ikx\pi)} e^{-\lambda t} dk.$$

Posons le changement de variable :

$$u^2 = 4\pi^2 D_1 k^2 t$$

$$u = \sqrt{4\pi^2 D_1 t}k$$

$$du = \sqrt{4\pi^2 D_1 t}dk$$

ce qui donne :

$$c_1(t,x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi^2 D_1 t}} e^{-\lambda t} e^{-u^2 + \frac{2iux\pi}{\sqrt{4\pi^2 D_1 t}}} \quad du.$$

Posons à nouveau un changement de variable :

$$X = \frac{2x\pi}{\sqrt{4\pi^2 D_1 t}}; \quad X^2 = \frac{x^2}{D_1 t}.$$

Or nous savons que :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2+uiX} du = \sqrt{\pi} \quad e^{\frac{-X^2}{4}} \tag{8}$$

$$= \sqrt{\pi} \quad e^{\frac{-x^2}{4D_1 t}} \tag{9}$$

donc

$$c_1(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_1 t}} e^{-\lambda t} e^{\frac{-x^2}{4D_1 t}} \tag{10}$$

Cette solution peut être interprétée comme le produit de deux fonctions :

– une fonction de désintégration $e^{-\lambda t}$. Cette fonction en exponentielle négative qui dépend de λ correspond à une décroissance radioactive et plus précisément ici à la perte de l'espèce 1, c'est-à-dire que la concentration de cette espèce décroît $\forall x$ au cours du temps.

– une fonction de diffusion $\frac{1}{\sqrt{4\pi D_1 t}} e^{\frac{-x^2}{4D_1 t}}$ qui dépend de la diffusivité D1 de l'espèce 1. Le premier terme de cette fonction correspond à un terme que l'on pourrait qualifier d'« étalement » diffusif en temps : en effet, la concentration de l'espèce 1 a tendance à diminuer par diffusion de cette espèce dans le milieu. Le deuxième terme, toujours lié à la diffusion, donne la forme du profil de concentration de l'espèce 1 le long de la barre.

  D'après ces deux fonctions, nous voyons clairement qu'il n'y a pas de couplage entre désintégration et diffusion dans notre solution.

2 Premier schéma numérique

Considérons le schéma numérique suivant :

$$c_{1,n+1,j} = c_{1,n,j} + \alpha_1 \left(c_{1,n,j+1} + c_{1,n,j-1} - 2c_{1,n,j}\right) - \alpha_0 c_{1,n,j} \quad \forall n \in \{0..n_{max}-1\}, \forall j \in \{0..j_{max}\} \tag{11}$$

$$c_{2,n+1,j} = c_{2,n,j} + \alpha_2 \left(c_{2,n,j+1} + c_{2,n,j-1} - 2c_{2,n,j}\right) + \alpha_0 c_{1,n,j} \quad \forall n \in \{0..n_{max}-1\}, \forall j \in \{0..j_{max}\} \tag{12}$$

avec pour conditions initiales

$$c_{1,0,j},\ c_{2,0,j} \quad \text{donnés} \quad \forall j \in \{0..j_{max}\} \tag{13}$$

et pour conditions aux limites

$$c_{1,n,-1} = c_{1,n,1},\ c_{1,n,j_{max}+1} = c_{1,n,j_{max}-1},\ c_{2,n,-1} = c_{2,n,1},\ c_{2,n,j_{max}+1} = c_{2,n,j_{max}-1} \quad \forall n \in \{0..n_{max}-1\} \tag{14}$$

où $\alpha_1 = \dfrac{D_1 \Delta t}{\Delta x^2}$, $\alpha_2 = \dfrac{D_2 \Delta t}{\Delta x^2}$ et $\alpha_0 = \lambda \Delta t$.

Pour calculer l'erreur globale de troncature dans le domaine de ce schéma, nous avons commencé par faire un développement limité de $c_\nu(t+\Delta t, x)$ au second ordre comme suit :

$$c_\nu(t+\Delta t, x) = c_\nu(t,x) + \Delta t \frac{\partial c_\nu}{\partial t}(t,x) + \frac{\Delta t^2}{2!}\frac{\partial^2 c_\nu}{\partial t^2}(t,x) + \Theta(\Delta t^3)$$

soit

$$\frac{\partial c_\nu}{\partial t}(t,x) = \frac{c_\nu(t+\Delta t, x) - c_\nu(t,x)}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2!}\frac{\partial^2 c_\nu}{\partial t^2}(t,x) + \Theta(\Delta t^2) \tag{15}$$

Procédons de même pour $c_\nu(t, x+\Delta x)$ et $c_\nu(t, x-\Delta x)$, mais jusqu'au quatrième ordre :

$$c_\nu(t, x+\Delta x) = c_\nu(t,x) + \Delta x \frac{\partial c_\nu}{\partial x}(t,x) + \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 c_\nu}{\partial x^2}(t,x) + \frac{\Delta x^3}{3!}\frac{\partial^3 c_\nu}{\partial x^3}(t,x) + \frac{\Delta x^4}{4!}\frac{\partial^4 c_\nu}{\partial x^4}(t,x) + \Theta(\Delta x^6) \tag{16}$$

et

$$c_\nu(t, x-\Delta x) = c_\nu(t,x) - \Delta x \frac{\partial c_\nu}{\partial x}(t,x) + \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{\partial^2 c_\nu}{\partial x^2}(t,x) - \frac{\Delta x^3}{3!}\frac{\partial^3 c_\nu}{\partial x^3}(t,x) + \frac{\Delta x^4}{4!}\frac{\partial^4 c_\nu}{\partial x^4}(t,x) + \Theta(\Delta x^6) \tag{17}$$

D'après les équations (16) et (17), on en déduit que :

$$\frac{\partial^2 c_\nu}{\partial x^2}(t,x) = \frac{c_\nu(t, x+\Delta x) + c_\nu(t, x-\Delta x) - 2c_\nu(t,x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 c_\nu}{\partial x^4}(t,x) + \Theta(\Delta x^2) \tag{18}$$

Nous pouvons donc écrire l'erreur globale de troncature sous la forme :

$$\epsilon = \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 c_\gamma}{\partial t^2}(t,x) + \frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 c_\gamma}{\partial x^4}(t,x) + \Theta(\Delta t^2, \Delta x^2) \tag{19}$$

Intéressons-nous dès lors à la consistance du schéma numérique définit par les équations (18) et (19). Pour cela, regardons vers quoi tend l'erreur globale de troncature quand $\Delta t \longrightarrow 0$ et $\Delta x \longrightarrow 0$.
Lorsque :

- $\Delta t^2 \longrightarrow 0$ et $\Delta x^2 \longrightarrow 0$, $\Theta(\Delta t^2, \Delta x^2) \longrightarrow 0$, par définition.

De plus, sachant que les fonctions $c_1(t,x)$ et $c_2(t,x)$ sont continues et que leurs dérivées successives ne divergent pas, on a :

- $\Delta t \longrightarrow 0$, $\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 c_\gamma}{\partial t^2}(t,x) \longrightarrow 0$.
- $\Delta x \longrightarrow 0$, $\frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 c_\gamma}{\partial x^4}(t,x) \longrightarrow 0$.

Ainsi, nous avons bien montré que $\epsilon \longrightarrow 0$ quand $\Delta t \longrightarrow 0$ et $\Delta x \longrightarrow 0$, donc que notre schéma numérique est bien consistant.

Plus précisément pour c_1 et c_2, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Delta t}(c_{1,n+1,j} - c_{1,n,j}) - \frac{D_1}{\Delta x^2}(c_{1,n,j+1} + c_{1,n,j-1} - 2c_{1,n,j}) + \lambda c_{1,n,j} = \\ \frac{\partial c_1}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} - \frac{D_1}{\Delta x^2}(\Delta x^2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^4}{12}\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4}) + \lambda c_1.\end{aligned}$$

Il s'agit d'un ordre 1 en temps et d'un ordre 2 en espace.

A partir de la troncature, nous trouvons la consistance de l'équation :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t}\Big|_n^j - D_1\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}\Big|_n^j + \lambda c_1 = \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2}\Big|_n^j - \frac{\Delta x^2 D_1}{12}\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4}\Big|_n^j + \Theta(\Delta t^3, \Delta x^6). \tag{20}$$

Or nous avons vu que l'équation physique s'écrivait sous la forme :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} - D_1\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \lambda c_1 = 0, \tag{21}$$

ce qui s'écrit en dérivant une fois par rapport au temps :

$$\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} = D_1\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - \lambda\frac{\partial c_1}{\partial t}. \tag{22}$$

Injectons l'équation (21) dans (22) et nous obtenons :

$$\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} = D_1^2\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4} - \lambda D_1\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - \lambda\frac{\partial c_1}{\partial t}, \tag{23}$$

qui s'écrit en utilisant l'équation (21) :

$$\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} = D_1^2 \frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4} - D_1 \lambda \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - \lambda D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} + \lambda^2 c_1. \tag{24}$$

Sans négliger les termes d'ordre 4 en x, nous trouvons finalement que :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t}\Big|_n^j - D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}\Big|_n^j + \lambda c_1 = \frac{\Delta t}{2}(-\lambda D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - \lambda D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \lambda^2 c_1) + \frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4}(\frac{6\Delta t D_1^2 - D_1 \Delta x^2}{12}) + \Theta(\Delta t^3, \Delta x^6), \tag{25}$$

ce qui revient à écrire :

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = c_1(-\lambda + \frac{\lambda^2 \Delta t}{2}) + D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}(1 - \lambda \Delta t) + \frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4}(\frac{6\Delta t D_1^2 - D_1 \Delta x^2}{12}). \tag{26}$$

Nous pouvons donc en conclure que le problème est consistant pour :

$$\lambda > \frac{2}{\Delta t} \qquad \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{6D_1} \tag{27}$$

Effectuons les mêmes calculs pour c_2 dans l'équation (22) en utilisant les équations (15), (16) et (17) :

$$c_{2,n,j} + \Delta t \frac{\partial c_2}{\partial t}\Big|_n^j + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 c_2}{\partial t^2}\Big|_n^j = c_{2,n,j} + \alpha_2 \big(\Delta x^2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}\Big|_n^j + \frac{\Delta x^4}{12} \frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4}\Big|_n^j\big) + \alpha_0 c_{1,n,j} + \theta(\Delta t^3, \Delta x^6),$$

qui s'écrit également :

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}\Big|_n^j + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 c_2}{\partial t^2}\Big|_n^j = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}\Big|_n^j + \frac{D_2 \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4}\Big|_n^j + \lambda c_{1,n,j} + \theta(\Delta t, \Delta x^6)$$

soit

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}\Big|_n^j - D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}\Big|_n^j - \lambda c_{1,n,j} = \frac{D_2 \Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4}\Big|_n^j - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 c_2}{\partial t^2}\Big|_n^j. \tag{28}$$

Revenons à l'équation initiale (2) en la dérivant par rapport au temps, ce qui nous permet d'écrire :

$$\frac{\partial^2 c_2}{\partial t^2} = D_2 \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial c_1}{\partial t} = D_2^2 \frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4} + \lambda D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial c_1}{\partial t}. \tag{29}$$

Injectons l'équation (29) dans (28) et nous obtenons :

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}\Big|_n^j - D_2\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}\Big|_n^j - \lambda c_{1,n,j} = -\frac{\Delta t D_2^2}{2}\frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4} - \frac{\lambda D_2 \Delta t}{2}\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - \frac{\lambda \Delta t}{2}\frac{\partial c_1}{\partial t} + \frac{D_2 \Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4}$$

soit

$$\frac{\partial c_2}{\partial t}\Big|_n^j - D_2\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2}\Big|_n^j - \lambda c_{1,n,j} = \frac{\partial^4 c_2}{\partial x^4}\Big(D_2\frac{\Delta x^2}{12} - \frac{\Delta t D_2^2}{2}\Big) - \frac{\lambda \Delta t}{2}\Big(D_2\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - \frac{\partial c_1}{\partial t}\Big). \tag{30}$$

Nous voyons apparaître dans la consistance de c_2 l'équation de la diffusion de c_1 avec comme coefficient de diffusion celui de l'élément 2.

3 Stabilité et dispersion du problème

Etant donné les conditions limites de l'équation (4), montrons que le problème continu est symétrisable-périodisable en x en trouvant la symétrie et la période P du problème.

Au vu de la symétrie du problème et des conditions aux bords suivantes :

$$\frac{\partial c_1(t,0)}{\partial x} = \frac{\partial c_1(t,L)}{\partial x} = 0 \quad x = L, \tag{31}$$

nous trouvons :

$$P = 2L. \tag{32}$$

La fonction obtenue est donc une fonction paire, définie sur $]-L, L[$. Les conditions limites sont toutes les deux des conditions de Neumann. Il y a donc bien une période de $2L$. En reproduisant ce motif sur $]-\infty, \infty[$ (en périodisant suivant cette même période), nous obtenons la solution générale du problème continu. Celle-ci est paire et périodique de période 2L.

L'écriture en série de Fourier de la solution générale sous forme d'ondes planes s'écrit alors :

$$c_\nu^*(t,x) = \sum_{m=0}^{\infty} \quad f_{\nu,m}^*(t)cos(2m\pi\frac{x}{2L}) + g_{\nu,m}^*(t)sin(2m\pi\frac{x}{2L}). \tag{33}$$

Prenons la dérivée première en x de l'expression (33) :

$$\frac{\partial c_\nu^*(t,0)}{\partial x} = \sum_{m=0}^{\infty} \quad -f_{\nu,m}^*(t)\frac{m\pi}{L}sin(m\pi\frac{x}{L}) + g_{\nu,m}^*(t)\frac{m\pi}{L}cos(m\pi\frac{x}{L}) = 0. \tag{34}$$

L'équation (34) implique qu'en $x = 0$ le sinus est nul et nous avons donc :

$$\sum_{m=0}^{\infty} \quad g^*_{\nu,m}(t) \frac{m\pi}{L} cos(m\pi \frac{x}{L}) = 0,$$

soit :

$$g^*_{\nu,m}(t) = 0 \tag{35}$$

et donc :

$$c^*_\nu(t,x) = \sum_{m=0}^{\infty} \quad f^*_{\nu,m}(t) cos(2m\pi \frac{x}{2L}).$$

En posant $P = 2L = 2\Delta x j_{max}$, nous avons :

$$c^*_\nu(t,x) = \sum_{m=0}^{\infty} \quad f^*_{\nu,m}(t) cos(\frac{m\pi}{j_{max}} \frac{x}{\Delta x}).$$

En posant finalement $p = \frac{m\pi}{j_{max}}$, nous obtenons :

$$c^*_\nu(t,x) = \sum_{p=0,\frac{\pi}{j_{max}},2\frac{\pi}{j_{max}},3\frac{\pi}{j_{max}},\ldots}^{\infty} f^*_{\nu,\frac{p j_{max}}{\pi}}(t) \cos(p\frac{x}{\Delta x}). \tag{36}$$

Nous pouvons faire de même pour le problème discret pour lequel la solution générale s'écrit alors :

$$c_{\nu,n,j} = \sum_{p=0,\frac{\pi}{j_{max}},2\frac{\pi}{j_{max}},3\frac{\pi}{j_{max}},\ldots}^{\pi} f_{\nu,\frac{p j_{max}}{\pi}}(n\Delta t) \cos(pj) \tag{37}$$

3.1 Solution ondes planes du problème continu

Nous cherchons à montrer que :

$$c^*_1(t,x) = \cos\left(p\frac{x}{\Delta x}\right) a_1 {\xi^*_1}^{\frac{t}{\Delta t}} \tag{38}$$

$$c^*_2(t,x) = \cos\left(p\frac{x}{\Delta x}\right)\left(a_2 {\xi^*_2}^{\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1}{\beta^*}\left({\xi^*_2}^{\frac{t}{\Delta t}} - {\xi^*_1}^{\frac{t}{\Delta t}}\right)\right) \tag{39}$$

Avec p, a_1, a_2 réels et $\xi^*_1 = e^{-(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)}$, $\xi^*_2 = e^{-\alpha_2 p^2}$, $\beta^* = \frac{\alpha_0 + (\alpha_1 - \alpha_2)p^2}{\alpha_0}$ est solution du problème (1,2,3,4).

Calculons dans un premier temps les dérivées de $c^*_1(t,x)$:

$$\frac{\partial c^*_1}{\partial t}(t,x) = -\frac{(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)}{\Delta t} cos(p\frac{x}{\Delta x}) a_1 e^{-(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)\frac{t}{\Delta t}} \tag{40}$$

et

$$\frac{\partial^2 c_1^*}{\partial x^2}(t,x) = -(\frac{p}{\Delta x})^2 cos(p\frac{x}{\Delta x}) a_1 e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}} \tag{41}$$

En substituant les expressions (40) et (41) dans l'équation (5), nous trouvons que :

$$-\frac{(\alpha_1 p^2+\alpha_0)}{\Delta t} cos(p\frac{x}{\Delta x}) e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}} + D_1(\frac{p}{\Delta x})^2 cos(p\frac{x}{\Delta x}) e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}} + \lambda cos(p\frac{x}{\Delta x}) e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}} = 0$$

$$-\frac{(\alpha_1 p^2+\alpha_0)}{\Delta t} + D_1(\frac{p}{\Delta x})^2 + \lambda = 0$$

soit

$$-(\alpha_1 p^2+\alpha_0) + D_1(\frac{p}{\Delta x})^2 \Delta t + \lambda \Delta t = -(\alpha_1 p^2+\alpha_0) + \alpha_0 + \alpha_1 p^2 = 0.$$

$c_1^*(t,x)$ est donc bien solution du problème continu (1,2,3,4).

Nous faisons la même chose pour $c_2^*(t,x)$ en utilisant l'équation (2). La solution est de la forme :

$$c_2^*(t,x) = cos(p\frac{x}{\Delta x})\Big((a_2 e^{-\alpha_2 p^2 \frac{t}{\Delta t}}) + \frac{a_1\alpha_0}{\alpha_0+(\alpha_1-\alpha_2)p^2}(e^{-\alpha_2 p^2\frac{t}{\Delta t}} - e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}})\Big) \tag{42}$$

Calculons ses dérivées :

$$\frac{\partial c_2^*}{\partial t} = cos(p\frac{x}{\Delta x})\Big((-a_2\frac{\alpha_2 p^2}{\Delta t} e^{-\alpha_2 p^2\frac{t}{\Delta t}}) + \frac{a_1\alpha_0}{\alpha_0+(\alpha_1-\alpha_2)p^2}(-\frac{\alpha_2 p^2}{\Delta t} e^{-\alpha_2 p^2\frac{t}{\Delta t}} + \frac{(\alpha_1 p^2+\alpha_0)}{\Delta t} e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}})\Big) \tag{43}$$

(43) se réécrit :

$$\frac{\partial c_2^*}{\partial t} = cos(p\frac{x}{\Delta x})\Big((-a_2\frac{\alpha_2 p^2}{\Delta t}\xi_2^{*\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1\alpha_0}{\alpha_0+(\alpha_1-\alpha_2)p^2}(-\frac{\alpha_2 p^2}{\Delta t}\xi_2^{*\frac{t}{\Delta t}} + \frac{(\alpha_1 p^2+\alpha_0)}{\Delta t}\xi_1^{*\frac{t}{\Delta t}})\Big) \tag{44}$$

Nous avons aussi :

$$\frac{\partial^2 c_2^*}{\partial x^2} = -(\frac{p}{\Delta x})^2 cos(p\frac{x}{\Delta x})\Big((a_2 e^{-\alpha_2 p^2\frac{t}{\Delta t}}) + \frac{a_1\alpha_0}{\alpha_0+(\alpha_1-\alpha_2)p^2}(e^{-\alpha_2 p^2\frac{t}{\Delta t}} - e^{-(\alpha_1 p^2+\alpha_0)\frac{t}{\Delta t}})\Big) \tag{45}$$

(45) se réécrit :

$$\frac{\partial^2 c_2^*}{\partial x^2} = -(\frac{p}{\Delta x})^2 cos(p\frac{x}{\Delta x})\Big((a_2\xi_2^{*\frac{t}{\Delta t}}) + \frac{a_1\alpha_0}{\alpha_0+(\alpha_1-\alpha_2)p^2}(\xi_2^{*\frac{t}{\Delta t}} - \xi_1^{*\frac{t}{\Delta t}})\Big) \tag{46}$$

Nous pouvons maintenant retrouver la solution à partir de :

$$-a_2\alpha_2 p^2 {\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1}{\beta^*}\Big(-\alpha_2 p^2 {\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + (\alpha_1 p^2+\alpha_0){\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}\Big) + p^2\frac{D_2\Delta t}{\Delta x^2}(a_2{\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1}{\beta^*}({\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} - {\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}})) - a_1\Delta t\lambda {\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}} =$$

$$-a_2\alpha_2 p^2 {\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1}{\beta^*}\Big(-\alpha_2 p^2 {\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + (\alpha_1 p^2+\alpha_0){\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}\Big) + p^2\alpha_2(a_2{\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} + \frac{a_1}{\beta^*}({\xi_2^*}^{\frac{t}{\Delta t}} - {\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}})) - a_1\alpha_0 {\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}} =$$

$$\frac{a_1}{\beta^*}(\alpha_1 p^2+\alpha_0){\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}} - \frac{a_1{\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}}{\beta^*}(\alpha_0\beta^* + p^2\alpha_2).$$

Or nous savons que :

$$\beta^* = \frac{\alpha_0 + (\alpha_1-\alpha_2)p^2}{\alpha_0}.$$

Nous trouvons immédiatement que :

$$\frac{a_1}{\beta^*}(\alpha_1 p^2+\alpha_0){\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}} - \frac{a_1{\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}}{\beta^*}(\alpha_0\beta^* + p^2\alpha_2) = \frac{a_1{\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}}{\beta^*}(\alpha_1 p^2+\alpha_0) - \frac{a_1{\xi_1^*}^{\frac{t}{\Delta t}}}{\beta^*}(\alpha_1 p^2+\alpha_0) = 0.$$

Nous venons de démontrer que $c_2^*(t,x)$ est aussi solution du problème continu (1,2,3,4).

c_1^* et c_2^* sont des fonctions paires et périodiques de période $\frac{2\pi\Delta x}{p}$. Ces deux solutions sont des exponentielles décroissantes modulées par un cosinus. Si α_1 et α_0 sont positifs, l'exponentielle est toujours décroissante. Donc $|\xi_1|^*$ et $|\xi_2^*|$ sont toujours infèrieures à 1. La solution du problème continu va converger.

3.2 Solution ondes planes du problème discret

Nous cherchons à montrer que :

$$c_{1,n,j} = \cos(pj)a_1\xi_1^n \tag{47}$$

$$c_{2,n,j} = \cos(pj)\left(a_2\xi_2^n + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^n - \xi_1^n)\right) \tag{48}$$

Avec p, a_1, a_2 réels et $\xi_1 = 1-\alpha_0-2\alpha_1(1-\cos(p))$, $\xi_2 = 1-2\alpha_2(1-\cos(p))$, $\beta = \frac{\alpha_0+2(\alpha_1-\alpha_2)(1-\cos(p))}{\alpha_0}$ est solution du problème (11, 12, 13, 14).

Nous procédons de la même manière que précédemment. Nous avons :

$$c_{1,n+1,j} = cos(pj)a_1\xi_1^{n+1}$$

$$c_{1,n,j+1} = cos(p(j+1))a_1\xi_1^n$$
$$c_{1,n,j-1} = cos(p(j-1))a_1\xi_1^n$$

L'équation (11) s'écrit alors :

$$cos(pj)a_1\xi_1^{n+1} = cos(pj)a_1\xi_1^n + \alpha_1 a_1\xi_1^n(cos(p(j+1)) + cos(p(j+1)) - 2cos(pj)) - \alpha_0 cos(pj)a_1\xi_1^n.$$

En utilisant les égalités :

$$cos(a+b) = cosa.cosb - sina.sinb$$
$$cos(a-b) = cosa.cosb + sina.sinb$$

nous trouvons en simplifiant par ξ^n :

$$\xi_1 = 1 + 2\alpha_1(cos(p) - 1) - \alpha_0 = 1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - cos(p)). \tag{49}$$

Ceci vérifie bien l'égalité d'après la définition de ξ_1.

Nous opèrons de la même manière pour trouver ξ_2 à partir des équations (12) et (48) :

$$a_2\xi_2^{n+1} + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1}) = (a_2\xi_2^n + \frac{a_1}{\beta})(\xi_2^n - \xi_1^n) + 2\alpha_2(cos(p) - 1)\Big(a_2\xi_2^n + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^n - \xi_1^n)\Big) + a_1\alpha_0\xi_1^n,$$

ce qui revient à écrire :

$$\xi_2^{n+1}\big(a_2 + \frac{a_1}{\beta}\big) - \frac{a_1}{\beta}\xi_1^{n+1} = \xi_2^n\big(a_2 + \frac{a_1}{\beta}\big)\big(1 + 2\alpha_2(cos(p) - 1)\big) + \xi_1^n\big(-\frac{a_1}{\beta} + a_1\alpha_0 - 2\alpha_2(cos(p) - 1)\frac{a_1}{\beta}\big).$$

En regroupant les termes en ξ_1 et en ξ_2, nous obtenons les solutions suivantes :

$$\xi_2 = 1 - 2\alpha_2(1 - cos(p)). \tag{50}$$

Pour ξ_1, il y a un peu plus de calcul :

$$-\frac{a_1}{\beta}\xi_1^{n+1} = a_1\xi_1^n\big(-\frac{1}{\beta} + \alpha_0 - 2\frac{1}{\beta}\alpha_2(cos(p) - 1)\big)$$

soit

$$\xi_1 = 1 - \alpha_0\beta + 2\alpha_2(cos(p) - 1).$$

En utilisant le résultat :

$$\beta = \frac{\alpha_0 + 2(\alpha_1 - \alpha_2)(1 - cos(p))}{\alpha_0},$$

nous pouvons alors écrire :

$$\xi_1 = 1 - \alpha_0 + 2\alpha_1(cos(p) - 1). \tag{51}$$

Nous retrouvons bien les résultats demandés puisque l'égalité des équations est à chaque fois bien vérifiée.

Les solutions trouvées pour le problème discret sont aussi des fonctions paires et périodiques de période $\frac{2\pi\Delta x}{p}$. Cependant elles sont différentes de celles du problème continu dans le sens où déjà elles ne sont pas en exponentielles. Selon les cas, la solution sera stable ou non. Comme α_1 et α_2 sont des valeurs positives, il faut étudier $cos(p)$.

3.3 Analyse de stabilité

Nous avons vu que la stabilité de la solution ondes planes du problème discret dépendait de ξ_1 et de ξ_2. C'est l'étude de $cos(p)$ qui va nous permettre de connaître les conditions de stabilité du schéma 1.
Pour cela, nous allons nous intéresser aux solutions trouvées en 3.2. La stabilité du schéma 1 est assurée si ξ_ν^n ne diverge pas quand $n \longrightarrow \infty$, c'est-à-dire qu'il s'agit de vérifier que $-1 < \xi_\nu < 1$ puisque n est strictement positif.

Pour ξ_1, nous avons donc :

$$-1 < \xi_1 < 1$$

$$-1 < 1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - \cos(p)) < 1$$

$$-\frac{\alpha_0}{2(1 - cos(p))} < \alpha_1 < \frac{1}{1 - cos(p)}(1 - \frac{\alpha_0}{2})$$

Le terme $-\frac{\alpha_0}{2(1-cos(p))}$ étant forcément négatif, α_1 lui est toujours supérieur puisque positif. De plus, $\forall p \in] - \infty, \infty[$, on a :

$$\frac{1}{2} < \frac{1}{1 - cos(p)} < +\infty$$

Le meilleure façon de remplir la condition de stabilité du schéma 1 vis-à-vis de ξ_1 est donc de choisir α_1 tel que :

$$\alpha_1 < \frac{1}{2} - \frac{\alpha_0}{4} \tag{52}$$

Pour ce qui est de ξ_2, nous raisonnons de la même façon à savoir qu'il doit être borné entre -1 et 1 :

$$-1 < \xi_2 < 1$$

$$-1 < 1 - 2\alpha_2(1 - \cos(p)) < 1$$

$$0 < \alpha_2 < \frac{1}{1 - cos(p)}$$

En utilisant les mêmes conditions que pour ξ_1, nous obtenons donc :

$$\alpha_2 < \frac{1}{2} \tag{53}$$

Si nous reprenons le fait que $\forall p \in]-\infty, \infty[$, $\frac{1}{2} < \frac{1}{1-cos(p)} < +\infty$, cela signifie que ξ_1 et ξ_2 doivent être strictement inférieurs à 1. L'instabilité ne peut alors apparaître que quand ξ_1 et ξ_2 sont strictement inférieurs à -1, c'est-à-dire quand :

$$1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - \cos(p)) < -1$$

soit

$$cos(p) < 1 - \frac{1}{\alpha_1} + \frac{\alpha_0}{2\alpha_1}$$

pour ξ_1, et quand :

$$1 - 2\alpha_2(1 - \cos(p)) < -1$$

soit

$$cos(p) < 1 - \frac{1}{\alpha_2}$$

pour ξ_2.

Quand p remplira l'une de ces conditions, les solutions du problème discret données par les expressions (47) et (48) divergeront vers l'infini au bout d'un certain temps relativement grand.

A partir de l'expression (52), nous pouvons trouver Δt tel qu'en remplacant α_0 et α_1 par leurs expressions respectives, nous obtenons :

$$\frac{D_1 \Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2} - \frac{\lambda \Delta t}{4}$$

soit

$$\Delta t < \frac{1}{2(\frac{D_1}{\Delta x^2} + \frac{\lambda}{4})} \tag{54}$$

Ainsi, si D_1 et Δx sont fixés, nous voyons clairement que Δt dépend forcément de λ.

Nous avons illustré ces résultats de stabilité du schéma 1 par l'intermédiaire d'un programme Matlab.

Lorsque le schéma est stable la solution tend vers 0 au bout d'un certain temps. Lorsqu'il ne l'est pas, la solution diverge. Nous pouvons illustrer ceci grâce au programme fourni et aux conditions de stabilité trouvées antérieurement. Si $\alpha_1 > \frac{1}{2} - \frac{\alpha_0}{4}$ et $\alpha_2 > \frac{1}{2}$ pour un α_0 fixé, le schéma diverge. La stabilité est

Ce que nous pouvons constater à partir de ces simulations est qu'en 0 la concentration en c_2 est nulle alors que ce n'est pas le cas pour c_1. Le maximum de concentration pour c_1 se trouve en 0. Celui de c_2 est un peu plus loin (la dérivée est nulle). C'est une fonction croissante (due à la désintégration de c_1), qui décroit ensuite comme c_1 pour devenir nulle. Nous voyons également la représentation de la fonction cosinus d'un point de vue spatial. Plus précisément, nous retrouvons bien les conditions aux bords.

Intéressons-nous maintenant à la différence entre le modèle continu et le modèle discret. Pour cela, calculons dans un premier temps $c_1^*(n\Delta t, j\Delta x)$:

$$c_1^*(n\Delta t, j\Delta x) = cos(pj)a_1\xi_1^{*n}.$$

Nous obtenons un résultat similaire pour $c_2^*(n\Delta t, j\Delta x)$, à savoir :

$$c_2^*(n\Delta t, j\Delta x) = cos(pj)(a_2\xi_2^{*n} + \frac{a_1}{\beta^*}(\xi_2^{*n} - \xi_1^{*n})).$$

Nous avons vu que :

$$\xi_1^* = e^{-(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)}$$
$$\xi_2^* = e^{-\alpha_2 p^2}$$
$$\beta^* = \frac{\alpha_0 + (\alpha_1 - \alpha_2)p^2}{\alpha_0}$$

et que :

$$\xi_1 = 1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - cos(p))$$
$$\xi_2 = 1 - 2\alpha_2(1 - cos(p))$$
$$\beta = \frac{\alpha_0 + 2(\alpha_1 - \alpha_2)(1 - cos(p))}{\alpha_0}.$$

Nous effectuons ensuite un développement limité de $cos(p)$ et de l'exponentielle jusqu'aux ordres en p et α_0 non nuls, pour les fonctions $\xi_1^{*n} - \xi_1^n$, $\xi_2^{*n} - \xi_2^n$ et $\beta^* - \beta$. Nous obtenons alors pour $\xi_1^{*n} - \xi_1^n$, en développant $e^{-(\alpha_1 p^2)^n}$ et $cos(p)$ à l'ordre 0 en p et $e^{-(\alpha_0)^n}$ à l'ordre 0 en α_0 :

$$\xi_1^{*n} - \xi_1^n = e^{-(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)^n} - (1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - cos(p)))^n$$

soit

$$\xi_1^{*n} - \xi_1^n \simeq 1 - (1 - \alpha_0)^n. \tag{55}$$

En procédant de la même manière, mais en développant cette fois-ci $e^{-\alpha_2 p^2 n}$ à l'ordre 1 en p et $cos(p)$ à l'ordre 0 en p (de façon à ce que le résultat ait un intérêt), nous obtenons pour $\xi_2^{*n} - \xi_2^n$:

$$\xi_2^{*n} - \xi_2^n = e^{-\alpha_2 p^2 n} - (1 - 2\alpha_2(1 - cos(p)))^n$$

soit

$$\xi_2^{*n} - \xi_2^n \simeq -\alpha_2 p^2 n. \tag{56}$$

Calulons aussi le développement limité de $\frac{\xi_2^{*n} - \xi_1^{*n}}{\beta^*}$, en développant ξ_1^{*n} et ξ_2^{*n} à l'ordre 1 en p :

$$\frac{\xi_2^{*n} - \xi_1^{*n}}{\beta^*} = \frac{\alpha_0(e^{-\alpha_2 p^2 n} - e^{-(\alpha_1 p^2 + \alpha_0)^n})}{\alpha_0 + (\alpha_1 - \alpha_2)p^2}$$

soit

$$\frac{\xi_2^{*n} - \xi_1^{*n}}{\beta^*} \simeq n\alpha_0 \tag{57}$$

Faisons de même pour $\frac{\xi_2^n - \xi_1^n}{\beta}$ en développant ξ_1, ξ_2 et β à l'ordre 0 en p :

$$\frac{\xi_2^n - \xi_1^n}{\beta} = \frac{\alpha_0((1 - 2\alpha_2(1 - cos(p)))^n - (1 - \alpha_0 - 2\alpha_1(1 - cos(p)))^n)}{\alpha_0 + 2(\alpha_1 - \alpha_2)(1 - cos(p))}$$

soit

$$\frac{\xi_2^n - \xi_1^n}{\beta} \simeq 1 - (1 - \alpha_0)^n \tag{58}$$

Enfin, à partir des équations (38), (39), (47) et (48), ainsi que les développements limités donnés par les expressions (55), (56), (57) et (58), nous obtenons :

$$c_{1,n,j}^* - c_{1,n,j} = cos(pj)a_1(\xi_1^{*n} - \xi_1^n)$$

soit

$$c_{1,n,j}^* - c_{1,n,j} \simeq cos(pj)a_1(1 - (1 - \alpha_0)^n) \tag{59}$$

$$c_{2,n,j}^* - c_{2,n,j} = cos(pj)(a_2(\xi_2^{*n} - \xi_2^n) + a_1(\frac{\xi_2^{*n} - \xi_1^{*n}}{\beta^*} - \frac{\xi_2^n - \xi_1^n}{\beta}))$$

soit

$$c_{2,n,j}^* - c_{2,n,j} \simeq cos(pj)(-a_2\alpha_2 p^2 n + a_1(-n\alpha_0 - (1 - (1 - \alpha_0)^n))) \tag{60}$$

avec $a_1 = 1$ et $a_2 = 0$ (condition initiale en onde plane).

Nous remarquons dans un premier temps que si $\alpha_0 \longrightarrow 0$, $c^*_{1,n,j} - c_{1,n,j} \longrightarrow 0$. Ceci traduit le fait que dans notre étude de la différence modèle continu-modèle discret, un terme important est $\alpha_0 = \lambda\Delta t$. Celui-ci joue un rôle clef notamment si le temps de demi-vie de l'espèce 1 est court, donc si λ est grand. Ceci imlique qu'il nous faut un Δt d'autant plus petit pour minimiser α_0 et donc minimiser une dipsersion trop rapide de l'espèce 1. Le terme $-a2\alpha_2 p^2 n$ quant à lui augmente de façon linéaire avec n. Il faudra donc encore une fois minimiser ce terme si l'on veut éviter une dispersion trop rapide de l'espèce 1.

3.4 Analyse de dispersion

Pour illustrer numériquement les questions relatives à la dispersion, nous avons décidé dans un premier temps de programmer sous Matlab la solution ondes planes du problème continu (équations (38) et (39)). Il est ensuite intéressant de rentrer dans le programme les équations (59) et (60) qui traduisent la différence entre le modèle continu et le modèle discret. En jouant sur le paramètre p, nous pouvons constater que plus sa valeur est grande, plus la solution onde plane du problème continu est mauvaise. Nous trouvons une solution pour $p = \frac{\pi}{j_{max}}$. Si p est trop grand, la solution du problème continu n'est plus bonne.

4 Simulation

Il s'agit de reproduire numériquement la solution analytique impulsionelle pour un domaine infini, connaissant son expression pour l'espèce 1 (équation (10)). Nous avons pris $L = 1$, $D_1 = 1$, $D_2 = 2$, $\lambda = 1$ et $j_{max} = 100$.

Reprenons le schéma numérique 1 et changeons les conditions initiales. Pour une solution impulsionnelle, nous pouvons définir un dirac en mettant une valeur quelconque en t=0 et valable sur tout l'espace. Néanmoins cette solution ne va pas pouvoir illustrer la dispersion car elle se diffuse trop rapidement par rapport au temps de diffusion en $\frac{1}{\sqrt{t}}$. Pour voir une diffusion, il nous faut une solution qui soit suffisamment étalée en espace et qui puisse se propager. Une gaussienne normalisée semble assez bien appropriée dans notre cas. Nous pouvons alors faire varier son écart type. Nous pouvons ainsi illustrer l'étalement de

5 Deuxième schéma numérique

Remplaçons l'équation (11) par :

$$c_{1,n+1,j} = \frac{1}{1+\frac{\alpha_0}{2}} \left(c_{1,n,j} + \alpha_1 \left(c_{1,n,j+1} + c_{1,n,j-1} - 2c_{1,n,j} \right) - \frac{\alpha_0}{2} c_{1,n,j} \right) \tag{61}$$
$$\forall n \in \{0..n_{max}-1\}, \forall j \in \{0..j_{max}\}$$

Nous avons procédé de la même manière que pour le schéma 1 en utilisant les développements limités des expressions (15), (16) et (17) :

$$c_{1,n,j} + \Delta t \frac{\partial c_1}{\partial t}\Big|_n^j + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2}\Big|_n^j = \frac{1}{1+\frac{\alpha_0}{2}}\Big((1-\frac{\alpha_0}{2})c_{1,n,j} + \alpha_1(\Delta x^2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}\Big|_n^j + \frac{\Delta x^4}{12}\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4})\Big|_n^j\Big) + \Theta(\Delta t^3, \Delta x^6),$$

ce qui s'écrit en regroupant les termes :

$$\begin{aligned}\frac{2\alpha_0}{2+\alpha_0}c_{1,n,j} + \Delta t \frac{\partial c_1}{\partial t}\Big|_n^j &= \frac{2\alpha_1}{2+\alpha_0}(\Delta x^2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}\Big|_n^j + \frac{\Delta x^4}{12}\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4})\Big|_n^j + \Theta(\Delta t^2, \Delta x^6)\\ &= \frac{2D_1\Delta t}{2+\lambda\Delta t}\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2}\Big|_n^j + \frac{\Delta x^2 D_1 \Delta t}{6(2+\lambda\Delta t)}\frac{\partial^4 c_1}{\partial x^4}\Big|_n^j + \Theta(\Delta t^2, \Delta x^4).\end{aligned}$$

Nous sommes à l'ordre 1 en Δt et à l'ordre 2 en Δx.

Calculons la stabilité du schéma 2 à partir de la solution ondes planes du problème discret :

$$cos(pj)\xi_1^{n+1} = \frac{\xi_1^n}{1+\frac{\alpha_0}{2}}\Big(cos(pj) + \alpha_1(cosp(j+1) + cosp(j-1) - 2cos(pj)) - cos(pj)\frac{\alpha_0}{2}\Big).$$

En utilisant les définitions du cosinus, nous obtenons :

$$\xi_1 = \frac{2}{2+\alpha_0}\Big(1 + 2\alpha_1(cos(p)-1) - \frac{\alpha_0}{2}\Big). \tag{62}$$

La relation (12) ne change pas dans ce schéma. ξ_2 sera le même que dans le schéma 1. Néanmoins β va changer. Nous utilisons donc la relation (12) pour le retrouver. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}cos(pj)\big(a_2\xi_2^{n+1} + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1})\big) = \big(a_2\xi_2^n + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^n - \xi_1^n)\big)\Big(cos(pj) + \alpha_2(2cos(p)cos(pj) - 2cos(pj))\Big)\\ +\alpha_0 cos(pj) a_1 \xi_1^n.\end{aligned}$$

En simplifiant par $cos(pj)$, nous trouvons :

$$\big(a_2\xi_2^{n+1} + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1})\big) = \big(a_2\xi_2^n + \frac{a_1}{\beta}(\xi_2^n - \xi_1^n)\big)\Big(1 + 2\alpha_2(cos(p)-1)\Big) + \alpha_0 a_1 \xi_1^n.$$

Nous séparons ensuite les variables et nous trouvons :

$$\xi_1 = \frac{\beta}{a_1}\big(-\alpha_0 a_1 + \frac{a_1}{\beta}(1 + 2\alpha_2(cos(p)-1)\big) = 1 - \alpha_0\beta + 2\alpha_2(cos(p)-1).$$

En utilisant la nouvelle valeur de ξ_1, nous obtenons :

$$\frac{2}{2+\alpha_0}\Big(1+2\alpha_1(cos(p)-1)-\frac{\alpha_0}{2}\Big)=1-\alpha_0\beta+2\alpha_2(cos(p)-1),$$

donc :

$$\beta=\frac{1+2\alpha_2(cos(p)-1)}{\alpha_0}-\frac{2}{\alpha_0(2+\alpha_0)}\Big(1+2\alpha_1(cos(p)-1)-\frac{\alpha_0}{2}\Big).$$

Analyse de stabilité du schéma 2

Nous savons que :

$$-1<\xi_1<1$$

donc

$$-1<\frac{2}{2+\alpha_0}\Big(1+2\alpha_1(cos(p)-1)-\frac{\alpha_0}{2}\Big)<1$$

$$\frac{-1}{cos(p)-1}<\alpha_1<\frac{\alpha_0}{2(cos(p)-1)}$$

En minorant à partir de l'égalité $cos(p)=1$, nous obtenons la condition de stabilité suivante :

$$\alpha_1<\frac{1}{2}$$

Nous avons la même condition de stabilité pour c_1 et pour c_2 dans ce schéma, alors que dans le schéma précédent nous avions des conditions de stabilité différentes qui dépendaient du paramètre α_0. Ce n'est plus le cas ici.

Nous avons illustré ceci numériquement à l'aide du programme utilisé sous Matlab fourni plus loin.

Comme le montrent les deux figures obtenues, nous pouvons voir que les solutions divergent en espace lorsque la condition de stabilité n'est plus respectée et qu'a contrario la solution tend vers 0 lorsque le schéma est stable.

Le programme sous Matlab