

# Résolution numérique de l'équation de la diffusion

## I Méthode des différences finies avec pas de temps explicite

Sous des hypothèses étudiées en cours, l'évolution de la température  $T(M, t)$  dans un matériau est régie par l'équation aux dérivées partielles

$$\Delta T(M, t) - \frac{1}{D} \frac{\partial T(M, t)}{\partial t} = -\frac{p(M, t)}{\lambda} \quad \text{ou encore} \quad \frac{\partial T}{\partial t}(M, t) = D \Delta T(M, t) + \frac{D}{\lambda} p(M, t) \quad (1)$$

où  $\lambda$  désigne la conductivité thermique,  $D$  le coefficient de diffusion thermique et où le terme source  $p(M, t)$  représente une puissance volumique. Cette edp est en général assortie de conditions de bord et de conditions initiales qui assurent l'unicité de sa solution. Malheureusement, exprimer cette solution au moyen de fonctions mathématiques usuelles s'avère souvent difficile, voire hors de notre portée. On recourt donc à une *résolution numérique* fournissant des *valeurs approchées* du champ de température. Conformément au programme, nous nous limitons à des situations unidimensionnelles pour lesquelles  $T(M, t) = T(x, t)$  (figure 1). Il s'agit typiquement de déterminer la température le long d'une barre de longueur  $L$  ou dans un mur.

Au lieu de déterminer le champ  $T$  pour tout  $x \in [0, L]$ , on le calcule seulement en  $N$  points équidistants d'abscisses  $x_i$ , séparés de  $\delta x = L/(N-1)$ . À un instant donné  $t$ , le champ de température est ainsi représenté par un ensemble de  $N$  valeurs  $\{T_i(t) = T(x_i, t)\}$  avec  $x_i = i\delta x$  et  $i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ .

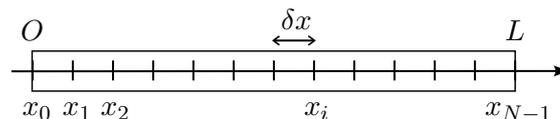


FIGURE 1 – Discrétisation spatiale pour un problème unidimensionnel

Par des développements de Taylor<sup>1</sup>, on montre que la dérivée seconde par rapport à  $x$  s'obtient approximativement par

$$\frac{\partial^2 T(x_i, t)}{\partial x^2} \simeq \frac{T_{i+1}(t) + T_{i-1}(t) - 2T_i(t)}{\delta x^2} \quad \text{pour } i \in \{1, N-2\} \quad . \quad (2)$$

Cette relation revient à approximer une dérivée, mathématiquement définie comme une limite, par un quotient faisant intervenir des différences entre points voisins. Pour cette raison, la technique présentée ici se somme *méthode des différences finies*.

Après cette discrétisation spatiale, on discrétise aussi le temps en ne calculant le champ de température qu'aux instants  $t_0 = 0, t_1 = \delta t, t_2 = 2\delta t$ , etc. Notons  $t_k = k\delta t$  et  $T_i^k = T_i(t_k)$ . L'entier placé en indice se réfère à la position alors que celui placé en exposant se réfère au temps. Les valeurs  $\{T_i^0, i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket\}$  décrivent la situation initiale et sont supposées connues. À partir de ces données, nous allons calculer successivement  $\{T_i^1, i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket\}$ , puis  $\{T_i^2, i \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket\}$ , etc., c'est à dire le champ de température aux dates successives. On appelle *pas de temps* l'opération<sup>2</sup> qui permet le passage des  $\{T_i^k\}$  aux  $\{T_i^{k+1}\}$ , c'est à dire l'obtention des températures à l'instant  $t_{k+1}$  à partir de celles à l'instant  $t_k$ .

Pour effectuer un pas de temps, on applique la méthode d'Euler concernant les équations différentielles. Pour  $i$  donné (c'est à dire en un point donné), considérons la fonction

$$f : t \longrightarrow T_i(t) \quad \text{dont la dérivée est} \quad f'(t) = \frac{dT_i}{dt} = \frac{\partial T(x_i, t)}{\partial t} \quad .$$

L'équation de la chaleur (1) appliquée en  $x_i$  donne

$$f'(t) = D \frac{\partial^2 T(x_i, t)}{\partial x^2} + \frac{D}{\lambda} p(x_i, t)$$

1. Le professeur conduit ce calcul au tableau

2. Il y a là un léger abus de langage puisque  $\delta t$  est lui aussi appelé « pas de temps ».

puis, en utilisant la dérivée seconde discrète (2), on obtient

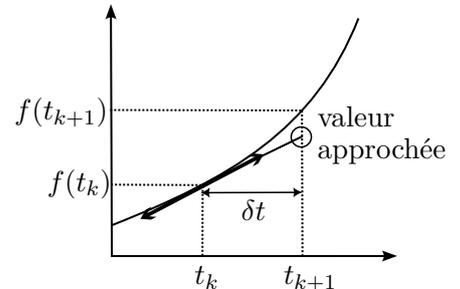
$$f'(t) \simeq D \frac{T_{i+1}(t) + T_{i-1}(t) - 2T_i(t)}{\delta x^2} + \frac{D}{\lambda} p(x_i, t)$$

Évaluée à l'instant  $t_k$ , cette relation permet de calculer numériquement  $f'(t_k)$  :

$$f'(t_k) \simeq D \frac{T_{i+1}^k + T_{i-1}^k - 2T_i^k}{\delta x^2} + \frac{D}{\lambda} p_i^k \quad \text{avec} \quad p_i^k = p(x_i, t_k) \quad .$$

La méthode d'Euler consiste à obtenir approximativement  $f(t_{k+1}) = T_i^{k+1}$  en confondant localement le graphe de  $f$  et sa tangente pour écrire, selon un développement de Taylor au premier ordre

$$f(t_{k+1}) = f(t_k + \delta t) \simeq f(t_k) + \delta t f'(t_k) \quad .$$



Cette relation devient ici

$$\boxed{T_i^{k+1} \simeq T_i^k + \frac{D\delta t}{\delta x^2} (T_{i+1}^k + T_{i-1}^k - 2T_i^k) + \frac{D\delta t}{\lambda} p_i^k} \quad . \quad (3)$$

Connaissant l'ensemble des températures à l'instant  $t_k$ , la relation (3) permet de les obtenir à l'instant  $t_{k+1}$  comme le montre le schéma de la figure (2). Il faut cependant noter que la relation d'itération (3) ne s'applique ni pour  $i = 0$  ( $T_{i-1}$  n'est alors pas défini), ni pour  $i = N - 1$  ( $T_{i+1}$  n'est alors pas défini). Les extrémités doivent donc faire l'objet d'un traitement particulier de manière à exprimer les conditions de bord, qui jouent comme dans une résolution exacte un rôle fondamental.

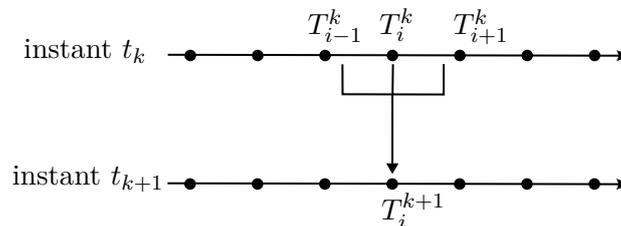


FIGURE 2 – Schéma de discrétisation de la méthode explicite

La méthode des différences finies exposée ici ne concerne pas seulement l'équation de la chaleur, mais plus généralement tout phénomène régi par l'équation de la diffusion (comme la diffusion de particules). Moyennant quelques adaptations, on peut même l'appliquer à une vaste classe d'edp. Néanmoins, tous les exemples traités dans la suite concerneront la thermique.

La méthode présentée ici est dite *explicite*, au sens où  $T_i^{k+1}$  s'exprime par la relation très simple (3). Il existe des méthodes « implicites », ne figurant pas au programme, dans lesquelles les  $\{T_i^{k+1}\}$  s'obtiennent de manière moins directe. Nous ne les étudierons pas.

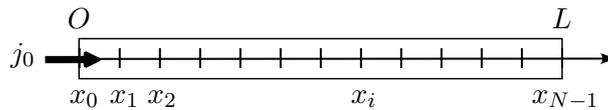
### Choix des pas de temps et d'espace

Par nature, la méthode exposée ici ne fournit pas exactement la température, mais en donne des valeurs approchées, d'autant plus précises que  $\delta t$  et  $\delta x$  sont petits. En particulier, si  $\delta t$  est trop grand, les erreurs s'amplifient au fil des itérations et on finit par obtenir des résultats absurdes et des températures tendant vers l'infini. On dit dans ce cas que la méthode est *instable*. On évite cet écueil et on assure *la stabilité du schéma numérique*, si

$$\frac{D\delta t}{\delta x^2} < \frac{1}{2} \quad \text{ou} \quad \delta t < \frac{\delta x^2}{2D} \quad (\text{condition CFL pour Courant, Friedrichs et Lewy}).$$



5. Considérons maintenant une condition de bord dans laquelle la température est fixée à l'extrémité droite ( $i = N - 1$ ). À l'extrémité gauche ( $i = 0$ ), un flux thermique constant, pénétrant la matière avec une densité surfacique  $j_0$ , est imposé.



D'après la loi de Fourier, on a

$$\forall t \geq 0, -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = j_0 \quad .$$

Dans le cadre des différences finies,

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0, t_k) \simeq \frac{T_1^k - T_0^k}{\delta x} \quad \text{et la condition de bord ci-dessous s'écrit} \quad T_0^k = T_1^k + \frac{j_0 \delta x}{\lambda} \quad .$$

Coder la procédure `impose_j_gauche(T_anc, T_nouv)` qui ne renvoie rien, mais qui modifie le tableau `T_anc` de manière à exprimer ces conditions de bord.

6. Le champ de température initial est stocké dans un tableau `T_init` contenant les  $N$  valeurs  $T_i^0$ . On note  $N_{\text{pas}}$  le nombre de pas de temps à effectuer, c'est à dire le nombre d'itérations des relations (3). Les dates  $t_k$ , au nombre de  $N_{\text{pas}} + 1$ , s'étendent de  $t_0 = 0$  à  $t_{N_{\text{pas}}} = N_{\text{pas}} \delta t$ . Le champ de température évolue au fil des itérations et nous choisissons de stocker toutes les valeurs qu'il prend successivement. Pour cela, on utilise un tableau `champ_T` de taille  $(N_{\text{pas}} + 1) \times N$ ; `champ_T[k, i]` est la valeur flottante de  $T_i^k$ . De cette manière,

- `champ_T[k, :]` contient les  $N$  températures à l'instant  $t_k$ ; `champ_T[0, :]` représente en particulier la condition initiale;
- `champ_T[:, i]` contient les  $(N_{\text{pas}} + 1)$  valeurs de la température au point d'abscisse  $x_i$ .

Coder la fonction `evolution(T_init, N_pas, fonction_pdt, fonction_bords)` qui calcule et renvoie le tableau `champ_T`. Ses deux derniers paramètres désignent eux-mêmes des fonctions :

- `fonction_pdt` est la fonction choisie pour traduire les relations (3) (à l'appel, l'utilisateur aura le choix entre `pdt_naif`, `pdt_vecto` et `pdt_matrice`);
- `fonction_bords` est la fonction choisie pour exprimer les conditions de bord (à l'appel, l'utilisateur devra la choisir selon le type de problème qu'il traite).

### III Applications directes

Le fichier destiné aux élèves contient des fonctions permettant de générer diverses conditions initiales, divers termes sources et solutions exactes de l'équation de la chaleur. Il comporte aussi une fonction permettant de représenter commodément le champ de température, et même une fonction `studio_poinca` pour produire un dessin animé.

En complétant le code, traiter les différents problèmes proposés dans le fichier. Lorsque c'est possible, comparer le résultat à celui connu par une résolution exacte. En général, un régime permanent finit par s'établir et dans ce cas, l'expression stationnaire de  $T(x)$  est facile à trouver, ce qui permet de vérifier que la méthode numérique ne donne pas n'importe quoi. Comparer aussi le temps d'exécution selon que l'on utilise `pdt_naif`, `pdt_vecto` ou `pdt_matrice`.

## IV Applications plus élaborées

### IV.1 Stabilité d'un réacteur chimique

La feuille de TD sur les transferts thermiques comporte un exercice intitulé « explosion thermique ». Il concerne un réacteur de longueur  $L = 2\ell$  dont les extrémités sont maintenues à la température  $T_0$  et dans lequel se dégage une puissance thermique dépendant de la température selon

$$p = p_0 \exp(\alpha(T - T_0)) \quad \text{avec} \quad p_0 > 0.$$

On pose  $\gamma = p_0 \alpha \ell^2 / \Lambda$  et on établit les résultats suivants.

- Si  $\gamma < 0,88$ , un régime stationnaire s'établit peu à peu. La température est maximale au centre et atteint  $T_{1\max} = T_0 + \theta_1/\alpha$  où  $\theta_1$  est la plus petite solution de l'équation

$$e^{-\theta_1/2} \operatorname{argch} \left( e^{\theta_1/2} \right) = \sqrt{\gamma/2} \quad .$$

- Si  $\gamma > 0,88$ , la température croît sans cesse et tend vers l'infini, ce qui correspond à une explosion.

1. Coder la fonction `evolution_reacteur(T_init)` qui joue le même rôle que `evolution`. Attention : le terme source se modifie au fil du temps donc il convient de le recalculer à chaque itération. Il a été traité comme une variable globale et pour que ses modifications se répercutent hors de la fonction, y compris dans l'exécution des autres fonctions, il faut utiliser le mot clé `global`.

2. Calculer et observer l'évolution de la température pour diverses valeurs de  $\gamma$  (par exemple en modifiant  $p_0$ ). Observer le changement de régime selon que  $\gamma < 0,88$  ou que  $\gamma > 0,88$ .

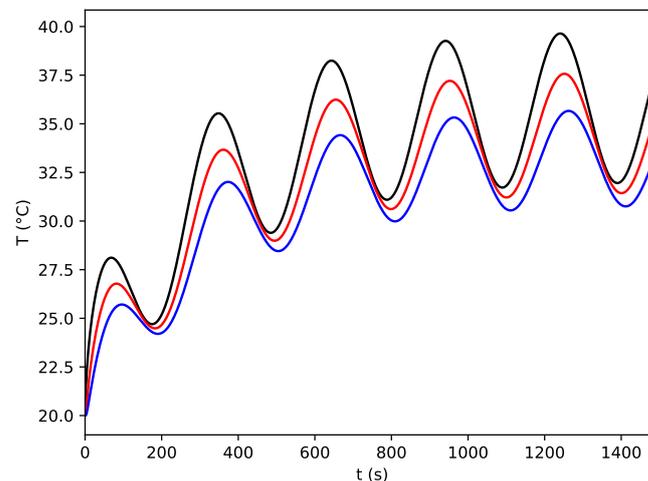
## IV.2 Chauffage alternatif d'une barre, onde thermique

En travaux pratique, nous utiliserons une barre de cuivre dont l'extrémité d'abscisse  $x = L$  est maintenue à température constante  $T_0$  par une circulation d'eau, alors qu'un flux réglable est imposé en  $x = 0$ . Pour produire des ondes thermiques, nous choisirons un flux alternatif de période  $T$  :

$$j(0, t) = \frac{\Phi_0}{S} \left( \frac{1 + \cos(2\pi t/T)}{2} \right) \quad .$$

1. Coder la fonction `evolution_onde_flux(T_init)` jouant le même rôle que `evolution`. Attention :  $j_0$  se modifie au fil du temps donc il convient de le recalculer à chaque itération. Il a été traité comme une variable globale et pour que ses modifications se répercutent hors de la fonction, y compris dans l'exécution des autres fonctions, il faut utiliser le mot clé `global`.

2. Calculer et représenter l'évolution de la température sur 40 minutes. Le dessin animé est particulièrement instructif. Je vous demande aussi de tracer  $T(x_i, t)$  en fonction du temps, pour diverses valeurs de  $x_i$ . Vous devriez ainsi obtenir des courbes du type de celle ci-dessous, en accord avec les relevés expérimentaux en travaux pratiques.



## IV.3 Passage en dimension 2

Le programme prévoit que nous nous limitons à des problèmes unidimensionnels, mais l'extension de la méthode en dimension 2 ne pose pas de difficulté de principe. Dans ce cas, la discrétisation de l'espace se fait à la fois selon  $(Ox)$  et selon  $(Oy)$ , ce qui amène à représenter le champ de température à un instant donné par un tableau à deux indices  $T[i, j] = T(x_i, y_j)$  et son évolution spatio-temporelle par un tableau à 3 indices `champ_T` de taille  $(N_{\text{pas}} + 1) \times N \times N$ . Dans ce cas, le laplacien intervenant dans l'équation de la diffusion s'écrit

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad .$$

Je vous demande simplement de réfléchir à ce que devient la relation d'itération (3) en dimension 2 et à la manière dont il convient de l'implémenter dans les fonctions `pdt_naif` et `pdt_vecto`.

