

Capacité numérique : résolution numérique de l'équation de diffusion

L'idée de discrétisation temporelle vue dans la méthode d'Euler peut être étendue à la discrétisation spatiale quand il s'agit de résoudre une équation aux dérivées partielles. Nous allons voir le principe de la méthode sur l'exemple de l'équation de diffusion thermique unidimensionnelle.

I Problème étudié

1) Équation de diffusion

- On étudie la diffusion thermique dans un solide de longueur L , de section S . L'équation de diffusion à une dimension thermique s'écrit, en l'absence de terme de source, $D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$, où $T(M, t) = T(x, t)$ est le champ de température, et $D = \frac{\lambda}{\rho c}$ la diffusivité thermique (λ est la conductivité thermique, ρ la masse volumique, c la capacité thermique massique, supposées uniformes).
- Dans le cas où il y a un terme de source interne (effet Joule, radioactivité,...), caractérisé par une puissance thermique volumique $q(M, t)$, l'équation s'écrit $D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + s = \frac{\partial T}{\partial t}$ avec $s = \frac{q}{\rho c}$.
- Hormis dans des situations simples, cette équation n'a pas de solution analytique. On se propose donc de la résoudre numériquement, par une double discrétisation spatiale et temporelle. Les conditions initiales $T(x, 0) = T_{ini}(x)$ sont supposées connues.

2) Conditions aux limites

- On envisagera trois types de conditions aux limites aux extrémités du domaine d'étude $0 \leq x \leq L$:
 - condition « de Dirichlet »: valeur de T imposée à une ou aux deux des extrémités du domaine d'étude $0 \leq x \leq L$, valeurs éventuellement dépendantes du temps: $T(0, t) = T_0(t)$ et/ou $T(L, t) = T_L(t)$; par exemple, en diffusion thermique, extrémités d'une barre en contact avec deux thermostats
 - condition « de Neumann »: valeur de $\frac{\partial T}{\partial x}$ imposée à une ou aux deux des extrémités du domaine d'étude $0 \leq x \leq L$, valeurs éventuellement dépendantes du temps: $\frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = \phi_0(t)$ et/ou $\frac{\partial T}{\partial x}(L, t) = \phi_L(t)$; par exemple, en diffusion thermique, extrémité d'une barre en contact avec une résistance chauffante qui impose un flux thermique surfacique P_{surf} en $x=0$: $P_{surf} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(0, t)$, donc $\phi_0(t) = -P_{surf} / \lambda$
 - condition mixte, issue par exemple de la loi de Newton à une interface solide/fluide en $x=L$: $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(L, t) = h(T(L, t) - T_f)$ où h est le coefficient d'échange et T_f la température du fluide en contact; on peut aussi envisager que l'extrémité du solide rayonne comme un corps noir vers l'extérieur, et on

a alors $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(L, t) = \sigma T(L, t)^4$ où σ est la constante de Stefan.

3) Adimensionnement

- Le problème possède une longueur caractéristique L , et un temps caractéristique $\tau = \frac{L^2}{D}$.
- Il peut être pratique d'introduire alors les variables sans dimension $x^* = \frac{x}{L}$ et $t^* = \frac{t}{\tau}$. L'équation de diffusion s'écrit alors, en l'absence de terme de source: $\frac{\partial^2 T}{\partial x^{*2}} = \frac{\partial T}{\partial t^*}$: alors que le problème de départ faisait intervenir comme paramètres λ , la conductivité thermique, ρ , la masse volumique, c , la capacité thermique massique, et L , cette équation-ci n'en fait plus intervenir aucun.
- Les conditions aux limites de type Dirichlet sont inchangées. En revanche, celles de type Neumann doivent être réécrites.
- Nous n'utiliserons pas cette équation adimensionnée, mais les méthodes exposées dans la suite lui sont facilement transposables

II Principe de la méthode des différences finies

1) Discrétisations

- Discrétisation spatiale: au lieu d'étudier T en tout point du domaine d'étude $[0, L]$, on va l'étudier en des points discrets d'abscisses $x_i = i \frac{L}{N-1} = i \delta$, $i \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ avec N entier choisi par l'utilisateur. $\delta = \frac{L}{N-1}$ est le pas spatial.
- Discrétisation temporelle: au lieu d'étudier T pour toute date de l'intervalle d'étude $[0, t_{max}]$, on va l'étudier pour des dates $t_j = j \frac{t_{max}}{M} = j \epsilon$, $j \in \{0, 1, 2, \dots, M\}$, avec M un entier choisi par l'utilisateur; $\epsilon = \frac{t_{max}}{M}$ est le pas temporel.

2) Approximation des dérivées par des différences finies

- La méthode des différences finies consiste à approximer les dérivées au moyen de développements de Taylor, en tronquant ceux-ci.

a) Dérivée première

- Par exemple, soit à approximer $\frac{\partial T}{\partial t}$: on sait que par définition de la dérivée: $\frac{\partial T}{\partial t} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{T(x, t+\epsilon) - T(x, t)}{\epsilon}$. Or le développement de Taylor temporel s'écrit

$T(x, t+\epsilon) = T(x, t) + \epsilon \frac{\partial T}{\partial t} + o(\epsilon)$. On a donc $\frac{T(x, t+\epsilon) - T(x, t)}{\epsilon} = \frac{\partial T}{\partial t} + O(\epsilon)$: on dit que $\frac{T(x, t+\epsilon) - T(x, t)}{\epsilon}$ est une approximation d'ordre 1 de la dérivée $\frac{\partial T}{\partial t}$. Plus généralement, l'ordre n

de l'approximation est la puissance de ϵ avec laquelle l'erreur de troncature tend vers zéro: $O(\epsilon^n)$. D'autre part, comme on a utilisé ici $T(x, t+\epsilon)$ et $T(x, t)$, on dit qu'on utilise une différence finie « progressive » ou « avant » (« forward difference approximation » dans la littérature anglo-saxonne), d'ordre 1.

- Finalement, $\frac{T(x, t+\epsilon) - T(x, t)}{\epsilon}$ est une approximation de la dérivée $\frac{\partial T}{\partial t}$ par une différence finie progressive (ou avant) d'ordre 1.

- Notons $T_i^n = T(x_i = i\delta, t_n = n\epsilon)$. On pourra donc remplacer $\frac{\partial T}{\partial t}(x_i, t_n)$ par $\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\epsilon}$

- On peut aussi écrire que $\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T(x, t) - T(x, t-\epsilon)}{\epsilon}$: c'est une différence finie « rétrograde » (« backward difference approximation ») d'ordre 1.

- On peut aussi faire des différences « centrées »: $\frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T(x, t+\epsilon) - T(x, t-\epsilon)}{2\epsilon}$: celle-ci est centrée, et on peut vérifier facilement qu'elle est d'ordre 2.

b) Dérivée seconde

- De même, soit à déterminer une approximation de $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$.

- On a
$$\begin{cases} T(x+\delta, t) = T(x, t) + \frac{\partial T}{\partial x} \delta + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\delta^2}{2} + \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \frac{\delta^3}{6} + o(\delta^4) \\ T(x-\delta, t) = T(x, t) - \frac{\partial T}{\partial x} \delta + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \frac{\delta^2}{2} - \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} \frac{\delta^3}{6} + o(\delta^4) \end{cases}$$
 , d'où l'on tire
$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T(x+\delta, t) + T(x-\delta, t) - 2T(x, t)}{\delta^2} + O(\delta^2)$$
.

- On dira donc que $\frac{T(x+\delta, t) + T(x-\delta, t) - 2T(x, t)}{\delta^2}$ est une approximation de $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$ par une différence finie centrée d'ordre 2.

- En notant toujours $T_i^n = T(x_i = i\delta, t_n = n\epsilon)$, on pourra donc remplacer $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_i, t_n)$ par $\frac{T_{i+1}^n + T_{i-1}^n - 2T_i^n}{\delta^2}$

- Là aussi, il existe des différences progressive, rétrograde, d'ordres 1, 2, 4...

III Schéma numérique explicite

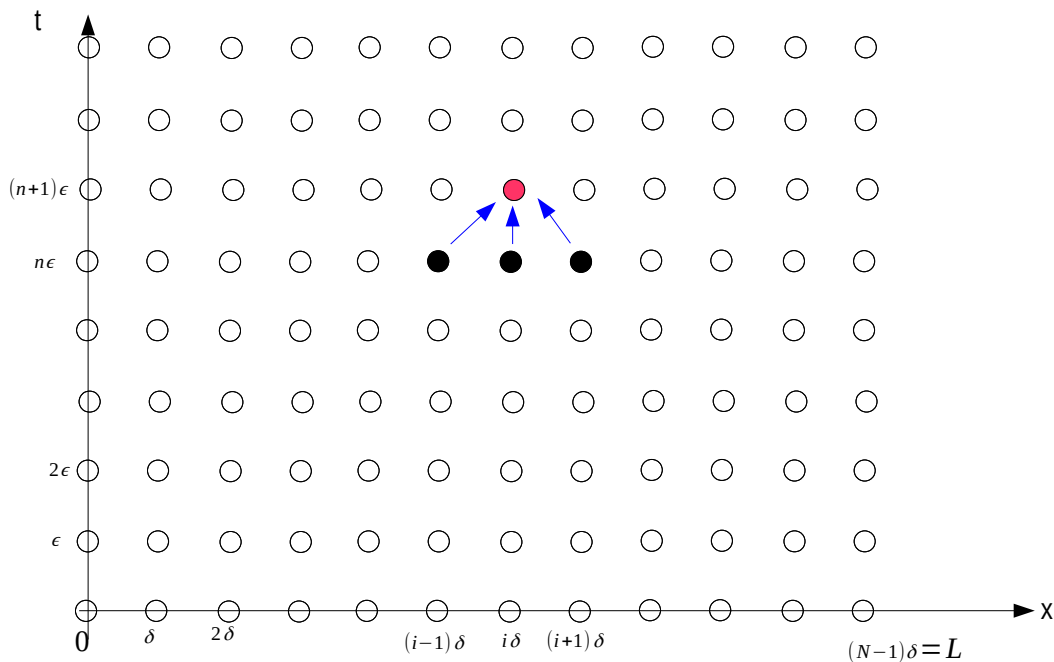
1) Schéma pour les points « intérieurs »

- Notons toujours $T_i^n = T(x_i = i\delta, t_n = n\epsilon)$.

- On se propose d'utiliser le schéma explicite suivant: la dérivée temporelle est approchée par une différence finie progressive d'ordre 1, la dérivée seconde spatiale par une différence finie centrée d'ordre 2. On considère l'équation de diffusion sans terme de source. Vérifier que dans ces conditions:

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha(T_{i-1}^n + T_{i+1}^n - 2T_i^n) \text{ pour } 1 \leq i \leq N-2, \text{ avec } \alpha = D \frac{\epsilon}{\delta^2}.$$

- On peut représenter le schéma numérique ainsi:



Connaissant les températures à la date t_n , on peut ainsi les calculer à la date t_{n+1}

- Il existe d'autres schémas numériques, implicite, Crank-Nicholson, etc..., mais le schéma explicite est le plus simple à mettre en œuvre, en particulier quand les deux conditions aux limites sont du type Dirichlet.

- En revanche, il présente un inconvénient, c'est qu'il n'est stable que si $\alpha \leq \frac{1}{2}$, condition qu'il faudra vérifier.

- Travail à effectuer: rédiger l'obtention du schéma numérique explicite pour résoudre l'équation de diffusion par une méthode de différence finie.

2) Prise en compte des conditions aux limites, algorithme complet

Le schéma précédent permet de calculer les températures T_i^n pour $1 \leq i \leq N-2$, autrement dit à l'exception des bords gauche ($i=0$) et droit ($i=N-1$): là vont intervenir les conditions aux limites.

a) Conditions aux limites de type Dirichlet aux deux extrémités

- C'est la situation où on impose $T(0,t)=T_0(t)$ et $T(L,t)=T_L(t)$.

- Cela se traduit par $T_0^n=T_0(t_n)$ et $T_{N-1}^n=T_L(t_n)$.

- On a alors l'algorithme complet suivant:

- initialisation avec les conditions initiales: $T_i^0=T_{ini}(x_i)$ pour $0 \leq i \leq N-1$
- pour n variant de 0 à M-2:
 - calcul de $T_0^{n+1}=T_0(t_{n+1})$ et $T_{N-1}^{n+1}=T_L(t_{n+1})$
 - calcul de $T_i^{n+1}=T_i^n+\alpha(T_{i-1}^n+T_{i+1}^n-2T_i^n)$ pour $1 \leq i \leq N-2$

b) Conditions aux limites de type Neumann

- Les choses sont plus compliquées. Supposons donc qu'on impose $\frac{\partial T}{\partial x}(0,t)=\phi_0(t)$: il nous faut approximer cette dérivée partielle.

- Pour ce faire, on peut introduire provisoirement un point fictif d'abscisse $x_{-1}=-\delta$, et approximer $\frac{\partial T}{\partial x}(0,t)$ par une différence finie centrée d'ordre 2: $\frac{\partial T}{\partial x}(0,t) \approx \frac{T_1^n - T_{-1}^n}{2\delta}$, donc

$$T_{-1}^n = T_1^n - 2\delta\phi_0(t_n) \quad \text{Or:} \quad T_0^{n+1} = T_0^n + \alpha(T_{-1}^n + T_1^n - 2T_0^n) \quad \text{Donc:}$$

$$T_0^{n+1} = T_0^n + 2\alpha(T_1^n - T_0^n - \delta\phi_0(t_n))$$

- Si on a une condition du même type à l'autre extrémité, c'est-à-dire $\frac{\partial T}{\partial x}(L,t)=\phi_L(t)$, le même travail conduit à: $T_{N-1}^{n+1} = T_{N-1}^n + 2\alpha(T_{N-2}^n - T_{N-1}^n + \delta\phi_L(t_n))$.

- L'algorithme complet est donc cette fois:

- initialisation avec les conditions initiales: $T_i^0=T_{ini}(x_i)$ pour $0 \leq i \leq N-1$
- pour n variant de 0 à M-2:
 - calcul de $T_0^{n+1} = T_0^n + 2\alpha(T_1^n - T_0^n - \delta\phi_0(t_n))$ et $T_{N-1}^{n+1} = T_{N-1}^n + 2\alpha(T_{N-2}^n - T_{N-1}^n + \delta\phi_L(t_n))$
 - calcul de $T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha(T_{i-1}^n + T_{i+1}^n - 2T_i^n)$ pour $1 \leq i \leq N-2$

- On peut aussi évidemment mixer: Dirichlet à gauche et Neumann à droite par exemple.

c) Autre type de conditions aux limites

- Supposons qu'on a en $x=0$ des échanges conducto-convectifs donnés par la loi de Newton $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(0,t) = h(T_f - T(0,t))$, où h est le coefficient d'échange et T_f la température du fluide en contact. On peut approximer comme dans le cas de Neumann $\frac{\partial T}{\partial x}(0,t)$, par la différence finie centrée d'ordre 2 $\frac{T_1^n - T_{-1}^n}{2\delta}$, donc $-\lambda \frac{T_1^n - T_{-1}^n}{2\delta} = h(T_f - T_0^n)$, d'où $T_1^n = T_{-1}^n - 2\frac{h\delta}{\lambda}(T_f - T_0^n)$. Comme en outre $T_0^{n+1} = T_0^n + \alpha(T_{-1}^n + T_1^n - 2T_0^n)$, on en tire $T_0^{n+1} = T_0^n + 2\alpha(T_{-1}^n - \frac{h\delta}{\lambda}(T_f - T_0^n) - T_0^n)$
- De même, si la loi de Newton à une interface solide/fluide s'applique en $x=L$: $-\lambda \frac{\partial T}{\partial x}(L,t) = h(T(L,t) - T_f)$, il vient $T_{N-1}^{n+1} = T_{N-1}^n + 2\alpha(T_{N-2}^n - \frac{\delta h}{\lambda}(T_{N-1} - T_f) - T_{N-1}^n)$.

- D'où l'algorithme complet si on a des échanges régis par la loi de Newton aux deux extrémités:

- initialisation avec les conditions initiales: $T_i^0 = T_{ini}(x_i)$ pour $0 \leq i \leq N-1$
- pour n variant de 0 à $M-2$:
- calcul de $T_0^{n+1} = T_0^n + 2\alpha(T_{-1}^n - \frac{h\delta}{\lambda}(T_f - T_0^n) - T_0^n)$ et $T_{N-1}^{n+1} = T_{N-1}^n + 2\alpha(T_{N-2}^n - \frac{\delta h}{\lambda}(T_{N-1} - T_f) - T_{N-1}^n)$
- calcul de $T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha(T_{i-1}^n + T_{i+1}^n - 2T_i^n)$ pour $1 \leq i \leq N-2$

IV Implémentation et applications

Charger dans l'éditeur le fichier equation_diffusion.py.

1) Implémentation

- L'implémentation en Python se fera avec des tableaux Numpy. On choisira de stocker les températures dans un tableau T comportant N éléments, et ce tableau sera actualisé à chaque pas temporel (on ne stocke pas l'ensemble des températures pour toutes les dates). Le tracé sera effectué par exemple 10 fois au total.

- On pourrait faire l'actualisation des points intérieurs par une boucle, du type:
for j in range(1, N-1):

ajout[j] = alpha*(T[j-1]-2*T[j]+T[j+1])

T=T+ajout

Cependant, le calcul est plus rapide en travaillant directement sur le tableau global et en faisant du slicing:

ajout[1:-1] = alpha*(T[:-2]-2*T[1:-1]+T[2:])

2) Premier exemple de test

- On impose $T(0,t) = T(L,t) = 0$ et $T(x,0) = \sin(\pi \frac{x}{L})$.

- Valeurs adoptées: $L=1\text{ m}$, $D=0,5\text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $t_{\max}=0,5\text{ s}$, $N=101$, $M=10000$

- C'est un problème pour lequel on connaît la solution exacte, $T(x,t) = e^{-\pi^2 \frac{Dt}{L^2}} \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right)$.
- La superposition de la solution approchée numérique et de la solution exacte montre que dans ce cas, le schéma numérique fonctionne bien.
- La solution stationnaire $T(x)=0$ est atteinte au bout d'une durée caractéristique $\tau = \frac{L^2}{D} = 2s$. On est donc tenté d'imposer $t_{max} = 2s$ pour voir si on est alors « proche » de $T(x)=0$. Le faire. Que se passe-t-il ? Sur quel paramètre peut-on jouer pour résoudre le problème ?

3) Exemple simple avec barre initialement à température uniforme

- Les deux conditions aux limites sont de type Dirichlet, avec en plus $T(0,t)$ et $T(L,t)$ constantes.
- On peut superposer aux courbes $T(x,t_0)$ tracées à diverses dates t_0 celle du régime stationnaire.

Établir rapidement que celle-ci est $T_{statio}(x) = T_0 + (T_L - T_0) \frac{x}{L}$.

- On constate qu'à la date $1s$, le régime stationnaire est quasiment atteint alors que $\tau = \frac{L^2}{D} = 2s$: τ s'identifie à « l'ordre de grandeur du temps au bout duquel le régime stationnaire est atteint ».

4) Exemple avec conditions mixtes

- On impose la puissance surfacique à gauche P_{surf} et la température constante T_L à droite.
- On superpose la solution stationnaire.

Vérifier à la main qu'elle vaut $T_{statio}(x) = T_L + \frac{P_{surf}}{\lambda} (L - x)$.

- Là encore, on constate qu'on est très proche du régime stationnaire pour des dates de l'ordre de τ .

5) Exemple plus réaliste avec conditions mixtes

- Une barre d'aluminium de longueur $L = 12cm$, de section $S = a.b$ (avec $a = 2cm$ et $b = 1cm$), calorifugée sur les côtés, est accolé à son extrémité gauche à une résistance chauffante qui fournit une puissance $P = 11W$. À son extrémité droite, elle est en contact avec l'air à température $T_{air} = 20^\circ C$, et un ventilateur assure une convection forcée avec un coefficient d'échange h inconnu.
- Sachant qu'expérimentalement, la température obtenue en $x=0$ lorsque le régime stationnaire est atteint vaut $81,2^\circ C$, ajuster manuellement la valeur de h jusqu'à obtention de la bonne valeur de température. Sachant que dans la littérature, on trouve des valeurs de h pour l'air en convection forcée de 10 à $500 W.K^{-1}.m^{-2}$, que penser de la valeur obtenue ? Quelles hypothèses du modèle pourraient être remises en cause ?

- Vérifier que la solution stationnaire s'écrit $T_{statio}(x) = T_{air} + \frac{P}{S\lambda} (L - x) + \frac{P}{Sh}$.