# Équation de diffusion : méthode des différences finies

## 1. Introduction

Ce document montre comment résoudre numériquement l'équation de diffusion en géométrie unidirectionnelle, par la méthode des différences finies avec un schéma explicite.
Ce document est une copie du notebook

`cours/diffusion/diffusion-explicite.ipynb`

## 2. Définition du problème

On considère l'équation de diffusion (par exemple diffusion thermique) pour un problème unidirectionnel. La fonction $T(x,t)$ obéit à l'équation aux dérivées partielles suivante :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{1}$$

La résolution se fait pour $x \in [a,b]$. La condition initiale est supposée donnée par la fonction $T(x,0)$ pour $x \in [a,b]$. On considère le cas où les conditions limites en $x=a$ et $x=b$ consistent à imposer les valeurs de $T$ aux bornes :

$$T(a,t) = T_a,\ \forall t \geq 0$$
$$T(b,t) = T_b,\ \forall t \geq 0$$

## 3. Variables réduites

Pour faire la résolution numérique de l'équation de diffusion, il est intéressant d'introduire des *variables réduites*, c'est-à-dire des variables sans dimensions. Posons tout d'abord

$$x' = \frac{x-a}{b-a}$$

$x'$ est une abscisse sans dimensions, appartenant à l'intervalle $[0,1]$. On a :

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x'}\frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x'}\frac{1}{b-a}$$
$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2}\frac{1}{(b-a)^2}$$

Soit le temps $\tau$ défini par :

$$\tau = \frac{(b-a)^2}{D}$$

Introduisons le temps sans dimension :

$$t' = \frac{t}{\tau}$$

On a :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t'}\frac{\partial t'}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t'}\frac{1}{\tau}$$

En reportant ces expressions des dérivées partielles dans l'équation de diffusion, on obtient l'équation de diffusion exprimée avec les variables sans dimensions $x'$ et $t'$, pour la fonction $T(x', t')$ :

$$\frac{\partial T}{\partial t'} = \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2}$$

La condition initiale est donnée par la fonction $T(x', 0)$ pour $x' \in [0, 1]$. Les conditions limites s'écrivent :

$$T(0, t') = T_a,\ \forall t' \geq 0$$
$$T(1, t') = T_b,\ \forall t' \geq 0$$

## 4. Différences finies

L'équation de diffusion est :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{2}$$

Si les variables $x$ et $t$ sont les variables sans dimensions $x'$ et $t'$ définies ci-dessus, on posera $D = 1$.
On doit commencer par discrétiser les variables $x$ et $t$. La discrétisation de $x$ consiste à poser :

$$\Delta x = \frac{1}{N-1}$$
$$x_n = n\Delta x \text{ pour } n = 0, 1, \ldots N-1$$

$\Delta x$ est le pas d'espace.
La discrétisation du temps consiste à poser :

$$t_k = k\Delta t \text{ pour } k = 0, 1, 2, \ldots$$

$\Delta t$ est le pas de temps.
L'indice $n$ est donc un nombre entier (compris entre $0$ et $N-1$) représentant la variable d'espace alors que $k$ est un nombre entier positif ou nul représentant le temps.
Une résolution numérique de l'équation de diffusion consiste à rechercher une approximation de $T(x_n, t_k)$ pour tout $n$ compris entre $0$ et $N-1$ et pour $k = 0, 1, \ldots$. Notons $T_{n,k}$ cette approximation.
Considérons le développement de Taylor par rapport à la variable $t$ :

$$T(x_n, t_k + \Delta t) = T(x_n, t_k) + \frac{\partial T}{\partial t}(x_n, t_k)\Delta t + O((\Delta t)^2)$$

La notation $O((\Delta t)^2)$ désigne un terme dont la valeur absolue est inférieure à $K(\Delta t)^2$ si $\Delta t$ est assez petit (où $K$ est une constante).

On déduit de cette relation :

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x_n, t_k) = \frac{T(x_n, t_k + \Delta t) - T(x_n, t_k)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

Il s'en suit qu'une approximation de la dérivée partielle par rapport au temps est donnée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t}(x_n, t_k) \approx \frac{T_{n,k+1} - T_{n,k}}{\Delta t}$$

et que l'erreur de cette approximation (erreur de troncature) est $O(\Delta t)$. On sait donc que, si $\Delta t$ est assez petit, il existe une constante $K$ telle que l'erreur de troncature est inférieure à $K\Delta t$ (en valeur absolue).
Dans cette expression, la dérivée est remplacée par une *différence finie*.
Afin d'obtenir une différence finie pour la dérivée seconde par rapport à $x$, considérons les développement de Taylor suivants :

$$T(x_n + \Delta x, t_k) = T(x_n, t_k) + \frac{\partial T}{\partial x}(x_n, t_k)\Delta x + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_n, t_k)\frac{(\Delta x)^2}{2} + \frac{\partial^3 T}{\partial x^3}(x_n, t_k)\frac{(\Delta x)^3}{6} + O((\Delta x)^4)$$
$$T(x_n - \Delta x, t_k) = T(x_n, t_k) - \frac{\partial T}{\partial x}(x_n, t_k)\Delta x + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_n, t_k)\frac{(\Delta x)^2}{2} - \frac{\partial^3 T}{\partial x^3}(x_n, t_k)\frac{(\Delta x)^3}{6} + O((\Delta x)^4)$$

La différence de ces deux relations conduit à :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_n, t_k) = \frac{T(x_n + \Delta x, t_k) - 2T(x_n, t_k) + T(x_n - \Delta x, t_k)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2)$$

Une expression de la dérivée seconde sous forme de différence finie est donc :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_n, t_k) \approx \frac{T_{n+1,k} - 2T_{n,k} + T_{n-1,k}}{(\Delta x)}$$

L'erreur de troncature de cette approximation est $O((\Delta x)^2)$.
On dispose ainsi d'une expression de chaque dérivée partielle sous la forme d'une différence finie, que l'on reporte dans l'équation de diffusion :

$$\frac{T_{n,k+1} - T_{n,k}}{\Delta t} = D\frac{T_{n+1,k} - 2T_{n,k} + T_{n-1,k}}{(\Delta x)^2} \tag{3}$$

## 5. Schéma numérique explicite

Un *schéma numérique* est une relation qui permet de calculer les valeurs de $T_{n,k}$ en partant de $k = 0$ (instant $t = 0$).
La relation (3) fournit immédiatement un moyen de calculer les $T_{n,k+1}$ (pour $n = 0, \dots N-1$) explicitement si les $T_{n,k}$ sont connus :

$$T_{n,k+1} = T_{n,k} + \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}(T_{n+1,k} - 2T_{n,k} + T_{n-1,k})$$

Soit le coefficient sans dimensions :

$$\alpha = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{4}$$

Le schéma explicite s'écrit :

$$T_{n,k+1} = T_{n,k} + \alpha(T_{n+1,k} - 2T_{n,k} + T_{n-1,k}) \tag{5}$$

Cette relation de récurrence est valable pour tout $k \geq 0$ et pour $n = 1, 2, \dots N-2$.
La condition initiale consiste en la donnée de $T_{n,0}$ pour $n = 0, 1, \dots N-1$. Les deux conditions limites sont :

$$T_{0,k} = T_a, \ \forall k \geq 0$$
$$T_{N-1,k} = T_b, \ \forall k \geq 0$$

Le schéma explicite et les conditions limites permettent de calculer $T_{n,1}$ pour $n = 0, 1, \cdots N-1$, puis $T_{n,2}$, etc.
Le schéma explicite est stable à condition que :

$$\alpha < \frac{1}{2} \tag{6}$$

Pour un pas d'espace $\Delta x$ donné, le pas de temps devra donc vérifier :

$$\Delta t < \frac{(\Delta x)^2}{2D}$$

## 6. Implémentation

```
import numpy as np
from matplotlib.pyplot import *
rcParams['figure.figsize'] = [13, 6]
```

Les $T_{n,k}$ (instant $k$) sont stockés dans un tableau à $N$ éléments ($n = 0, 1, \ldots N-1$). L'itération consiste à calculer le tableau des $T_{n,k+1}$ (instant $k+1$) à partir du tableau des $T_{n,k}$ et à appliquer les conditions limites. Il est nécessaire de créer un nouveau tableau pour faire ce calcul. La fonction `iteration` effectue ce calcul et renvoie le nouveau tableau.

```
def iteration(T,N,alpha,Ta,Tb):
    # tableau contenant T(n,k) pour n=0,1,.. N-1
    # N : taille du tableau
    # alpha
    # Ta,Tb : températures aux frontières
    T1 = np.zeros(N)
    T1[0] = Ta
    T1[N-1] = Tb
    for n in range(1,N-1):
        T1[n] = T[n] +alpha*(T[n+1]-2*T[n]+T[n-1])
    return T1
```

Il n'est pas nécessaire de garder en mémoire les $T_{n,k}$ pour tout $k$. La fonction `calcul` effectue les itérations pour $t$ variant de $t_i$ à $t_f$. La variable $t$ n'apparaît pas explicitement dans ce calcul mais elle pourrait apparaître dans un problème où les conditions limites seraient variables. La fonction renvoie l'instant final (qui peut être différent de $t_f$), le tableau des $T_{n,k}$ pour cet instant et le nombre d'itérations.

```
def calcul(T,N,ti,tf,delta_t,alpha,Ta,Tb):
    t = ti
    niter = 0
    while t<tf:
        T = iteration(T,N,alpha,Ta,Tb)
        t += delta_t
        niter += 1
    return (t,T,niter)
```

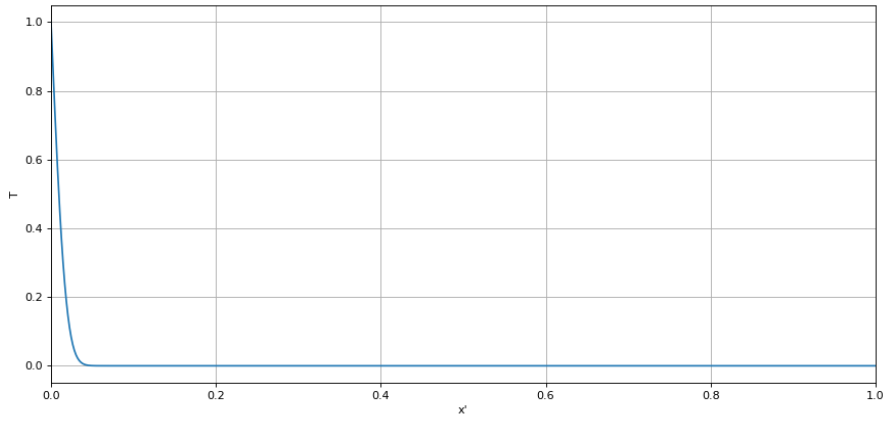
Voici un exemple où $x \in [0, 1]$ désigne $x'$ (abscisse sans dimension) et $t$ désigne $t'$ (temps sans dimensions). La condition initiale est $T(x, 0) = 0$ pour $x \in [0, 1]$. Les conditions limites sont $T(0, t) = 1$ et $T(1, t) = 0$.

Le choix de $\Delta x$ dépend de la pente maximale de la fonction $x \to T(x, t)$ sur l'intervalle $[0, 1]$. Plus cette pente maximale est grande, plus $\Delta x$ doit être petit. Dans le problème de diffusion étudié ici, la pente est très forte au voisinage de $x = 0$ pour les instants petits. Le pas de temps est choisi à $90\,\%$ de sa valeur maximale. Essayons avec $N = 2^{10}$ :

```
N=2**10
delta_x = 1/(N-1)
x = np.arange(N)*delta_x
T = np.zeros(N)
Ta = 1
Tb = 0
D = 1
delta_t_max = delta_x**2/(2*D) # valeur maximale pour garantir la stabilité
delta_t = 0.9*delta_t_max
alpha = D*delta_t/delta_x**2
```

Faisons un premier calcul de l'instant $t' = 0$ à $t' = 10^{-4}$ puis traçons la courbe de $x' \to T(x', t')$ :

```
(t1,T1,niter1) = calcul(T,N,0,1e-4,delta_t,alpha,Ta,Tb)

figure()
plot(x,T1)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```



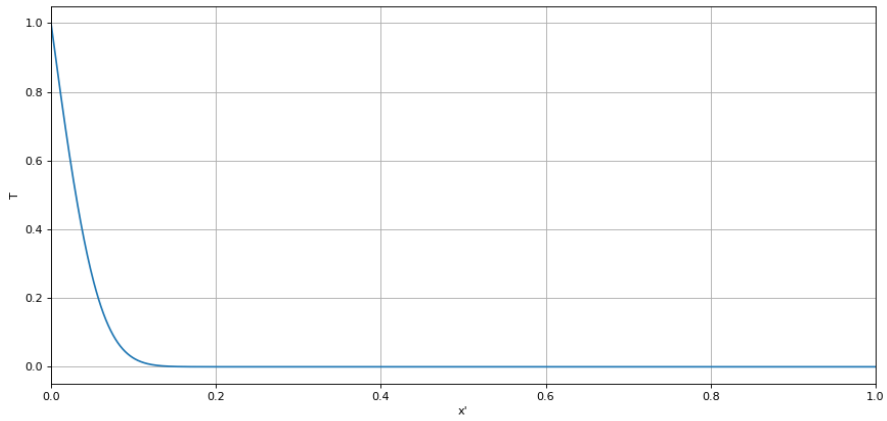

Voici le pas de temps qui a été utilisé pour ce calcul et le nombre d'itérations

```
print((delta_t,niter1))
--> (4.2999286211848885e-07, 233)
```

L'évolution du profil de température est rapide lorsque $t$ est petit puis devient de plus en plus lente.

Nous cherchons à présent à calculer l'évolution de $t' = 10^{-4}$ à $t' = 10^{-3}$. Si $\Delta x$ reste inchangé, la valeur de $\Delta t$ ne peut pas être augmentée car elle a été choisie à $90\,\%$ de la limite de stabilité. Or l'intervalle de temps du calcul de $t' = 10^{-4}$ à $t' = 10^{-3}$ est environ 10 fois plus grand que le précédent. Il y aura donc 10 fois plus de calculs.

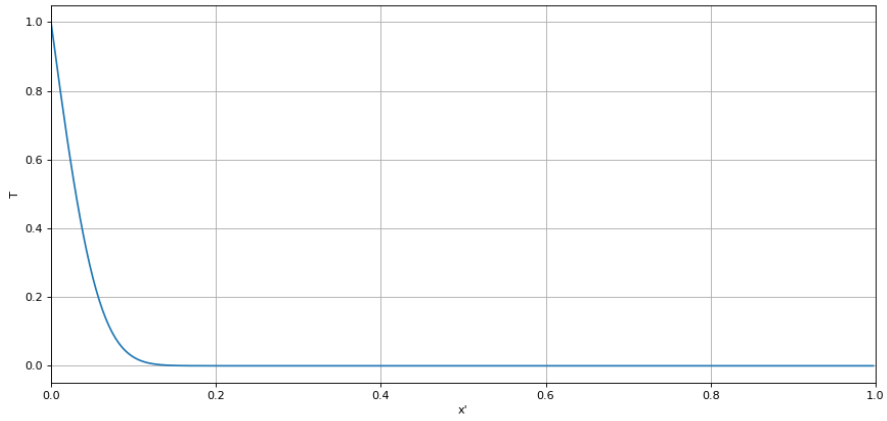
```
(t2,T2,niter2) = calcul(T1,N,1e-4,1e-3,delta_t,alpha,Ta,Tb)

figure()
plot(x,T2)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```




```
print(niter2)
--> 2094
```

Le temps de calcul est encore acceptable. L'étape suivante consiste à calculer de $t' = 10^{-3}$ à $t' = 10^{-2}$. Si on ne change pas $\Delta x$, le nombre d'itérations sera 10 fois plus grand que le précédent. On remarque que la pente maximale de la courbe est plus faible que pour $t' = 10^{-4}$. Il devrait donc être possible d'augmenter $\Delta x$ afin d'augmenter $\Delta t$, donc de réduire le nombre d'itérations. Nous avons défini $N$ comme une puissance de 2. Il est donc facile de réduire la valeur de $N$ en le divisant pas 4, ce qui aura pour effet de réduire le nombre d'itérations d'un facteur 16.

```
N_1 = N//4
T2_1 = T2[0::4]
x_1 = x[0::4]
figure()
plot(x_1,T2_1)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```

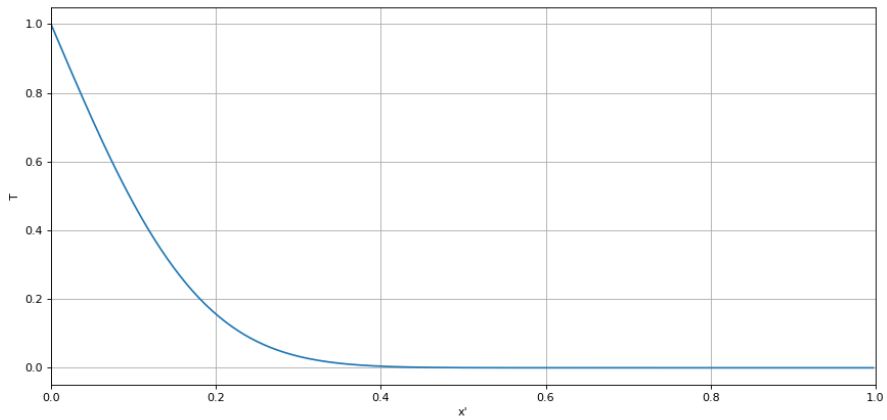



Comme on le voit sur cette figure, l'augmentation de $\Delta x$ est sans conséquence sur la bonne représentation de la fonction $x' \to T(x', t')$. Calculons les nouveaux paramètres du calcul :

```
delta_x_1 = 1/(N_1-1)
delta_t_max_1 = delta_x_1**2/(2*D) # valeur maximale pour garantir la stabilité
delta_t_1 = 0.9*delta_t_max_1
alpha_1 = D*delta_t_1/delta_x_1**2
```

Voici le calcul de $t' = 10^{-3}$ à $t' = 10^{-2}$ :

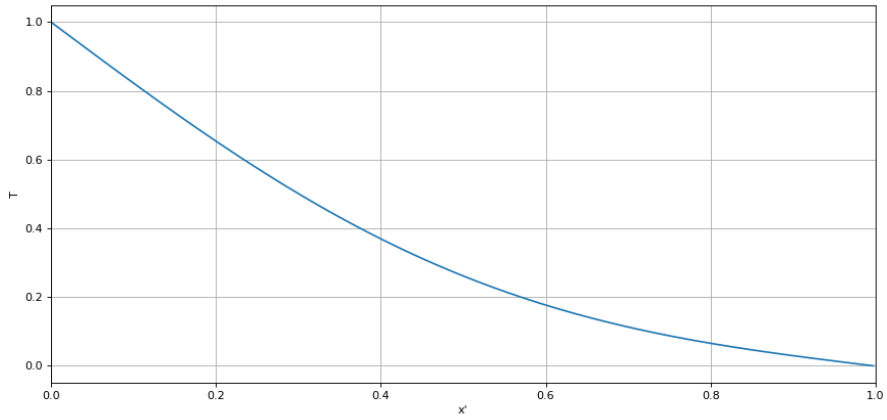
```
(t3,T3_1,niter3) = calcul(T2_1,N_1,1e-3,1e-2,delta_t_1,alpha_1,Ta,Tb)
figure()
plot(x_1,T3_1)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```




```
print(niter3)
--> 1301
```

Pour le calcul de $t' = 10^{-2}$ à $t' = 10^{-1}$, on peut garder le même $\Delta x$ car le nombre d'itérations sera encore acceptable (10 fois plus que le précédent).

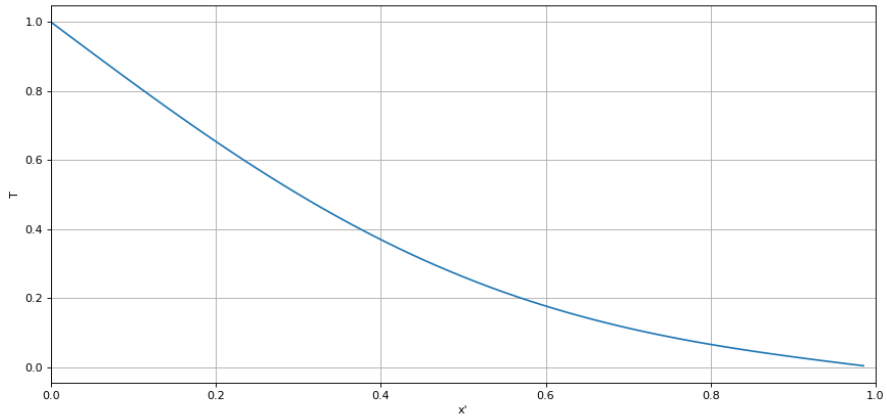
```
(t4,T4_1,niter4) = calcul(T3_1,N_1,1e-2,1e-1,delta_t_1,alpha_1,Ta,Tb)

figure()
plot(x_1,T4_1)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```



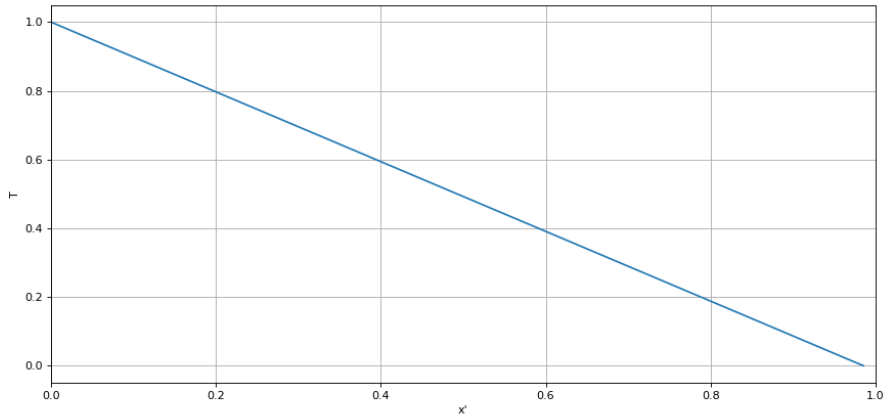

```
print(niter4)
--> 13005
```

Le régime stationnaire n'est pas encore atteint. Il faut encore calculer de $t' = 10^{-1}$ à $t' = 1$, ce qui demanderait 10 fois plus d'itérations si on ne change pas $\Delta x$. Il est donc judicieux de procéder à nouveau à une division de $N$ d'un facteur $4$ :

```
N_2 = N_1//4
T4_2 = T4_1[0::4]
x_2 = x_1[0::4]
figure()
plot(x_2,T4_2)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```




```
delta_x_2 = 1/(N_2-1)
delta_t_max_2 = delta_x_2**2/(2*D) # valeur maximale pour garantir la stabilité
delta_t_2 = 0.9*delta_t_max_2
alpha_2 = D*delta_t_2/delta_x_2**2
(t5,T5_2,niter5) = calcul(T4_2,N_2,1e-1,1,delta_t_2,alpha_2,Ta,Tb)

figure()
plot(x_2,T5_2)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
```




```
print(niter5)
--> 7939
```

Le régime stationnaire est bien atteint à $t' = 1$ (un examen plus détaillé montre qu'il est atteint pratiquement pour $t' = 0{,}2$). On voit ici l'intérêt d'avoir défini des variables $x'$ et $t'$ sans dimensions. Le temps $t'$ qu'il faut pour atteindre le régime stationnaire est de l'ordre de 1. La durée réelle correspondante est $\tau$.

Pour finir, on trace les courbes de $x' \to T(x', t')$ obtenues pour les différents instants :

```
figure()
plot(x,T1,label="t'=%0.2g"%t1)
plot(x,T2,label="t'=%0.2g"%t2)
plot(x_1,T3_1,label="t'=%0.2g"%t3)
plot(x_1,T4_1,label="t'=%0.2g"%t4)
plot(x_2,T5_2,label="t'=%0.2g"%t5)
xlabel("x'")
ylabel('T')
grid()
xlim(0,1)
legend(loc='upper right')
```