

Calcul du potentiel dans un milieu conducteur bidimensionnel

1 - Objectif

L'objectif est de retrouver par un calcul sur ordinateur les résultats expérimentaux de conduction électrique entre 2 électrodes plongées dans une solution ionique. Ce calcul va donner la valeur du potentiel en tout point, c'est à dire l'équivalent de la valeur mesurée V_{SM} .

On pourra alors utiliser gnuplot pour tracer les équipotentielles comme cela a été fait avec le fichier expérimental "mesures_01.txt".

Le calcul permettra aussi de trouver les lignes de courant, c'est à dire les trajectoires des ions depuis l'électrode P vers l'électrode N (pour les ions positifs). On utilise pour cela le fait que les lignes de courant sont partout perpendiculaires (orthogonales) aux équipotentielles. Il s'agit donc d'un calcul basé sur des propriétés géométriques.

2 - Discrétisation

A notre échelle, la solution ionique dans laquelle on fait passer du courant apparaît continue. Le potentiel (la tension V_{SM}) est donc une fonction définie en tout point du domaine :

$$-13 \text{ cm} < x < +13 \text{ cm} \quad \text{et} \quad -13 \text{ cm} < y < +13 \text{ cm}$$

Ceci correspond à un nombre infini de point.

Trouver une telle fonction (le potentiel), lorsque c'est possible, relève de "l'analyse mathématique". Dans le cas présent, ce n'est pas possible et on a recours à un calcul par ordinateur, en un nombre important, mais fini de points. On fera ici un calcul sur un quadrillage de 130 points par 130 points, soit 16900 points, qui seront séparés d'un millimètre.

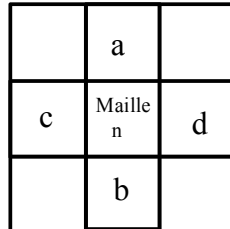
Ces 16900 points représentent 1/4 du domaine, et par symétrie, on reconstituera le domaine entier, soit 67600 points. On peut comparer ce nombre aux 196 points mesurés expérimentalement.

On parle de maillage ou de discrétisation du domaine, et ce traitement est du ressort de "l'analyse numérique".

Plus le maillage est fin, plus le résultat est précis et se rapproche de la réalité, mais plus le temps de calcul est long : déjà avec un maillage de 130 X 130 mailles, la durée calcul est de l'ordre d'une minute.

3 - Equation physique à résoudre

L'équation à résoudre a comme inconnue le potentiel électrique (la tension V_{SM}) en chaque point du maillage. Les physiciens et les numériciens ont montré que le potentiel en une maille doit être la moyenne du potentiel dans les 4 mailles adjacentes.



Ainsi, le potentiel dans la maille n doit être la moyenne du potentiel dans les 4 mailles a, b, c et d.

$$V_n = \frac{V_a + V_b + V_c + V_d}{4}$$

Ceci doit être vérifié pour toutes les mailles du domaine, avec leurs 4 mailles adjacentes. Lorsqu'une maille appartient à une électrode, le potentiel est fixé par le générateur relié à l'électrode. On utilise ce potentiel imposé pour calculer par la moyenne le potentiel des mailles voisines.

Pour les mailles qui sont à la périphérie du domaine, soit on fixe la valeur du potentiel si la frontière est conductrice, soit la frontière est isolante et on montre que cette condition est prise en compte en ajoutant une maille extérieure au domaine et en fixant le potentiel de cette maille extérieure égal à celui de la maille considérée.

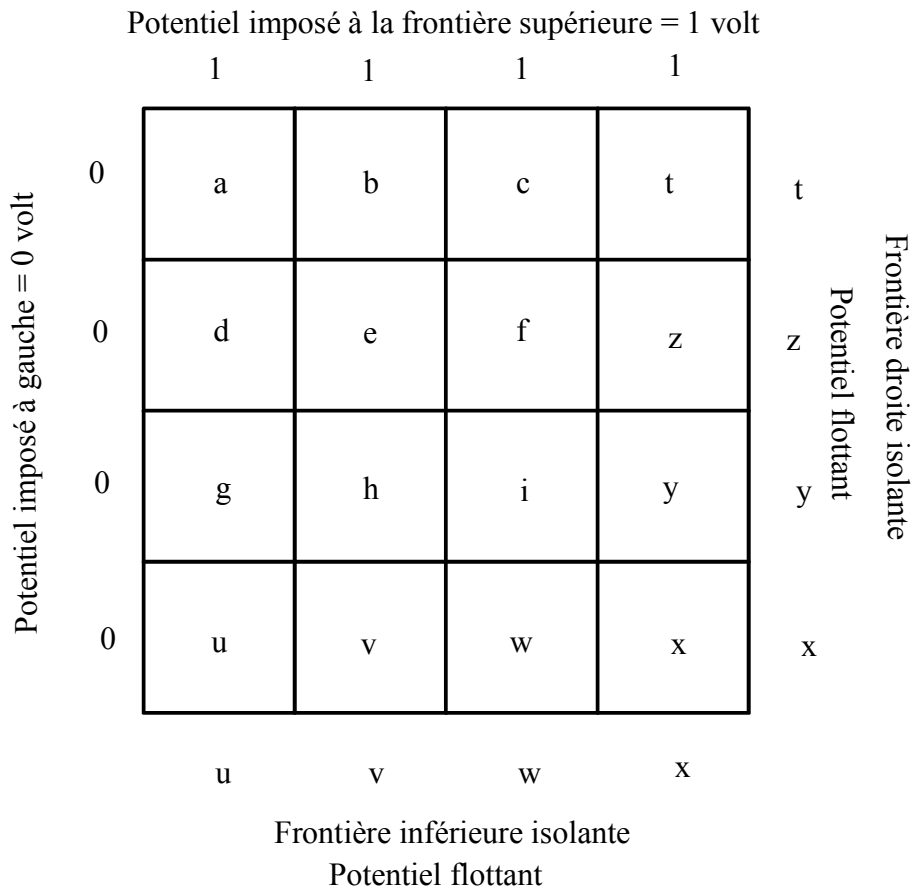
Un exemple simple permet récapituler ce paragraphe. Dans la figure ci-dessous, on cherche le potentiel dans les 16 mailles a, b, c, d, e, f, g, h, i, u, v, w, x, y, z et t.

Le potentiel dans la maille e doit être la moyenne du potentiel dans les mailles b, h, d et f.
Le potentiel dans la maille b doit être la moyenne du potentiel dans les mailles a, c et e et de la valeur imposée 1 au dessus de la maille b.

Le potentiel dans la maille a doit être la moyenne du potentiel dans les mailles b et d et des valeurs imposées 1 et 0 au dessus et à gauche de la maille a.

Le potentiel dans la maille w doit être la moyenne des potentiels dans les mailles i, v, x et de la valeur flottante w elle-même.

Le potentiel dans la maille x doit être la moyenne des potentiels dans les mailles w et y et de deux fois la valeur flottante x (au dessous et à droite de la maille x)



4 - Résolution par itération

De ce qui précède, on dispose d'autant d'équations qu'il y a de maille dans le domaine (dans l'exemple simple, 16 mailles, dans le problème réel, 16900 mailles). On sait résoudre directement en une seule étape un tel système de 16900 équations à 16900 inconnues avec un ordinateur, mais la mémoire requise peut être réduite et la précision du résultat améliorée en procédant par itérations. Cela signifie qu'on procède par approximations successives, et que la précision du résultat s'améliore petit à petit pendant que l'ordinateur travaille.

En reprenant l'exemple simple avec 16 mailles, on fixe d'abord arbitrairement une valeur pour le potentiel initial de chaque maille (étape d'initialisation). Le plus simple est de prendre la valeur 0.

	1	1	1	1
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

Tableau 0

Les valeurs imposées à gauche (0 volt) et au dessus (1 volt) sont également indiquées dans la première colonne et la première ligne du tableau.

On calcule à partir de ces valeurs initiales pour chaque maille les moyennes et on les reporte dans le tableau 1 :

	1	1	1	1
0	0,25	0,25	0,25	0,25
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

Tableau 1

On a bien pour la maille a : $(1 + 0 + 0 + 0) / 4 = 0,25$. Il en est de même pour les 15 autres mailles.

On refait de même en calculant les moyennes à partir du tableau 1 pour obtenir un tableau 2 :

	1	1	1	1
0	0,3125	0,375	0,375	0,375
0	0,0625	0,0625	0,0625	0,0625
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

Tableau 2

On continue ce processus itératif (on refait à chaque fois le même calcul) pour passer d'un tableau au suivant. On constate et on peut montrer qu'on s'approche progressivement d'un tableau dans lequel chaque case est la moyenne des 4 cases adjacentes.

	1	1	1	1
0	0,359375	0,4375	0,453125	0,453125
0	0,09375	0,125	0,125	0,125
0	0,015625	0,015625	0,015625	0,015625
0	0	0	0	0

Tableau 3

	1	1	1	1
0	0,3828125	0,484375	0,50390625	0,5078125
0	0,125	0,16796875	0,1796875	0,1796875
0	0,02734375	0,0390625	0,0390625	0,0390625
0	0,00390625	0,00390625	0,00390625	0,00390625

Tableau 4

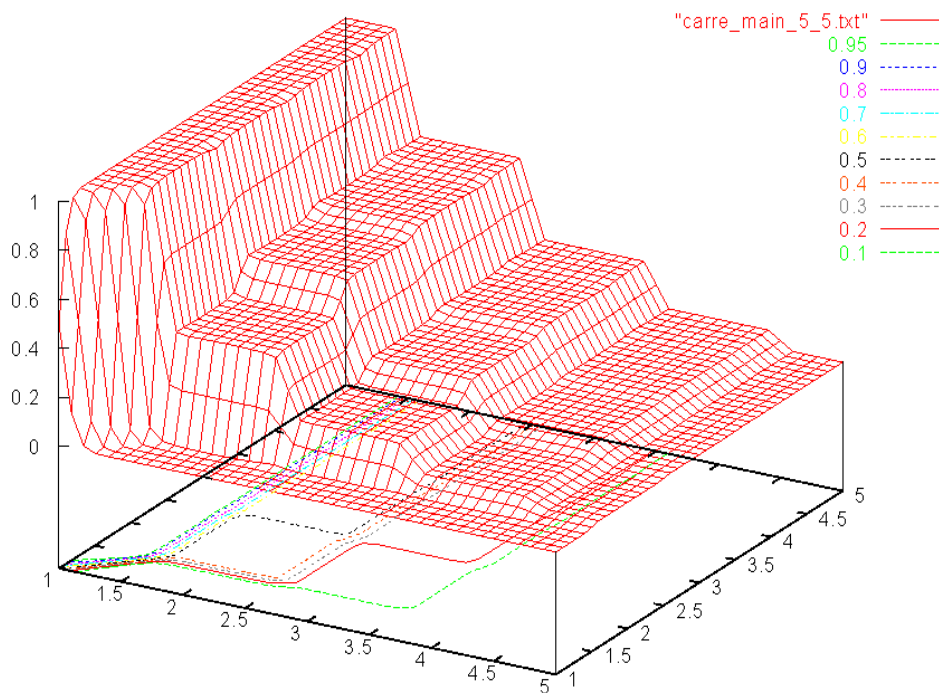
	1	1	1	1
0	0,40234375	0,513671875	0,54296875	0,54781563
0	0,14453125	0,20703125	0,22265625	0,2265625
0	0,041992188	0,059570313	0,065429988	0,065429688
0	0,008789063	0,012695313	0,012695313	0,012695313

Tableau 5

	1	1	1	1
0	0,414550781	0,538085938	0,571044922	0,579345703
0	0,162841797	0,235107422	0,260498047	0,265625
0	0,053222798	0,08178711	0,090087891	0,092529297
0	0,015869141	0,023437501	0,025878907	0,0225878907

Tableau 6

On peut visualiser le potentiel obtenu dans le tableau 6 avec gnuplot :



On poursuit ainsi les itérations jusqu'au moment où on considère que les résultats n'évoluent que d'une quantité jugée suffisamment petite.

Remarque 1 : on vérifie bien sur la figure ci-dessus que les conditions aux limites de potentiel imposé à 1 et à 0 sont satisfaites.

Remarque 2 : il faudrait un maillage plus fin (ici 4 mailles X 4 mailles pour le calcul) pour obtenir une bonne approximation du problème continu.

Remarque 3 : Seules 6 itérations ont été effectuées pour obtenir ce résultat. Quand l'ordinateur effectue les itérations, leur nombre peut être de 100000 à plusieurs millions : le calcul à chaque itération est très simple, mais il doit être répété un grand nombre de fois.

Remarque 4 : Dans ce cas simple, on résout facilement de façon exacte le système de 16 équations vérifiées par le potentiel aux mailles a, b, c, d, e, f, g, h, i, u, v, w, x, y, z, t. On trouve :

$$\left\{ x = \frac{1}{2}, w = \frac{403}{901}, v = \frac{308}{901}, b = \frac{626}{901}, a = \frac{1}{2}, h = \frac{352}{901}, t = \frac{732}{901}, f = \frac{549}{901}, z = \frac{593}{901}, e = \frac{1}{2}, u = \frac{169}{901}, \right.$$

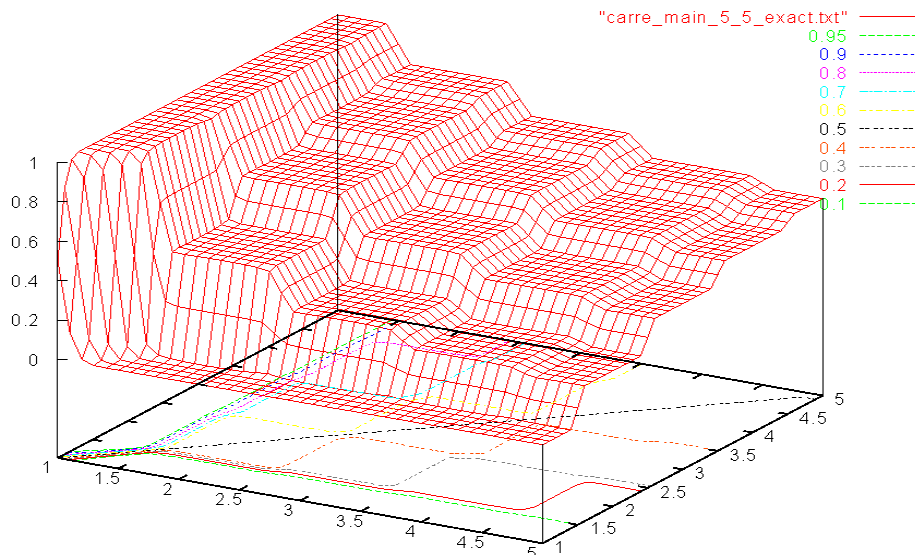
$$\left. d = \frac{275}{901}, c = \frac{702}{901}, g = \frac{199}{901}, y = \frac{498}{901}, i = \frac{1}{2} \right\}$$

On voit que le résultat exact, qui serait obtenu au bout d'un nombre infini d'itérations diffère notablement du résultat obtenu après 6 itérations :

	1	1	1	1
0	0,5	0,694783574	0,779134295	0,812430633
0	0,305216426	0,5	0,609322974	0,658157603
0	0,220865705	0,390677026	0,5	0,552719201
0	0,187569367	0,341842397	0,447280799	0,5

Tableau ∞

On visualise ce résultat exact avec gnuplot :



Ceci montre bien qu'il faut être aussi prudent et critique avec le résultat d'un calcul numérique, qu'avec des mesures expérimentales.

5 - Applications pratiques

On veut maintenant effectuer le calcul qui correspond aux conditions des mesures expérimentales : récipient de 26 cm X 26 cm contenant de l'eau salée et 2 électrodes de 3 cm de large, séparées de 14 cm. Le programme qui effectue ce calcul est "cond_02_isol.exe".

Le programme demande le nom du fichier de commande, qui contient toutes les données (nombre de mailles, position des électrodes, nombre d'équipotentiels à tracer, etc ...).

Voir la feuille séparée pour préparer le fichier de commande, qui sera nommé "datai_electro_01.txt".

Double cliquer sur l'icône du programme "cond_02_isol.exe".

L'exécution dure à peu près une minute : ne pas s'impatienter s'il semble ne rien se produire, c'est bon signe. On obtient à la fin un message du type: "Résolution en 99258 itérations".
"OK ?" Taper ok et entrée.

Le programme crée de nombreux fichiers nécessaires au tracé. Il crée en particulier le fichier "datai_electro_01.plt" (dans la mesure où le fichier de commande s'appelle "datai_electro_01.txt"). Double cliquer sur le fichier "datai_electro_01.plt" lu par gnuplot. Le traitement par gnuplot dure plusieurs secondes, ne pas s'impatienter. On voit alors les équipotentiels en 3D. Modifier avec Wordpad le fichier .plt suivant les indications données (# à retirer) pour visualiser les équipotentiels en 2D, ou pour imprimer la figure (création d'un fichier postscript intermédiaire).

On comparera le résultat du calcul aux résultats expérimentaux.

Le programme crée aussi un fichier "datai_electro_01_e.plt". Double cliquer sur ce fichier pour voir les lignes de courant : elles correspondent aux trajectoires des ions entre les électrodes. Vérifier l'orthogonalité des lignes de courant et des équipotentiels.

On peut de la même façon voir l'influence de divers paramètres en modifiant le fichier de commande et en le renommant "datai_electro_02.txt", puis _03, puis _04, etc ...

Un paramètre très important concerne la frontière isolante ou conductrice. Tester ce paramètre en modifiant la valeur 1 ou 0 en fin du fichier de commande.

On peut tester l'influence de la largeur des électrodes : 1 cm, 6 cm, 12 cm, ... et voir l'impact sur les équipotentiels et les lignes de courant. Ne pas oublier de modifier le point de départ des lignes de courant dans le fichier de commande, ainsi éventuellement que leur nombre.

On peut de la même façon tester l'écartement des électrodes : 20 cm, 10 cm, 5 cm, 1 cm.

On notera sur ce cas concret la complémentarité des mesures expérimentales et des simulations numériques sur ordinateur, et l'investissement en temps que demande chacune de ces approches.