

Modélisation de la diffusion chimique dans un film

Technique de différences finies, utilisation de matplotlib

```
<sxh python; title : Diffusion-chimique-finitediff-01.py> #!/usr/bin/env python # -*- coding: utf-8 -*-
from math import * # pour utiliser la librairie graphique matplotlib from pylab import *

# simulation de la diffusion chimique par différence finie # on considère un problème à une
dimension correspondant à la diffusion # au sein d'un film mince d'un constituant (par immersion
dans un # solvant par exemple) # cf. en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference #

# initialisations ni= 101 # nombre d'abscisses n=range(0,ni,1) # les "numéros" des abscisses # print
n x=[] # la liste des abscisses c=[] # la liste des concentrations cnew=[] # une liste intermédiaire
pour l'évolution des concentrations for i in n:
```

```
    x.append(float(n[i]))
    c.append(0.) #concentration initiale nulle au sein du film
    cnew.append(0.)
```

```
c[0]=10. # conditions aux bords : forte concentration imposée c[ni-1]=10. cnew[0]=10.
cnew[ni-1]=10. # print c
```

```
t=0. # temps ite=0 # compteur d'itérations endt=2000. #temps final dx=1. # intervalle spatial
dtsurdx2=0.1 # constante liée à la méthode des différences finies dt=dx*dx*dtsurdx2 # intervalle
temporel
```

```
while t < endt: # boucle temporelle
```

```
    i=1
    while i < ni-1: # actualisation des concentrations
        cnew[i]=c[i]+dtsurdx2*(c[i-1]-2.*c[i]+c[i+1])
        i=i+1
    c=cnew
    if ite % 250 == 0: # affichage périodique
        #print t
        #print x
        #print c
        plot(x,c) # affichage de la concentration en fonction de l'épaisseur
#show()
    t=t+dt
    ite=ite+1
```

```
show() </sxh>
```

Last update: 2012/12/14 07:36 teaching:progappchim:diffusion_chimique_1d https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:diffusion_chimique_1d?rev=1355467016

From: <https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link: https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:diffusion_chimique_1d?rev=1355467016

Last update: **2012/12/14 07:36**

