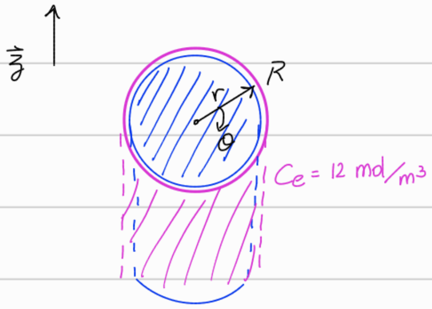
Données:



$R = 1$ m $\quad z = \infty \quad C(t_0) = 0$

Explicite: derivées spatiales au temps t
Implicite: derivées spatiales au temps $t+\Delta t$

C= Concentration de sel dans la structure [mol / m³]

$D_{eff} = 10^{-10}$ m²/s $\quad S = KC \quad K = 4 \cdot 10^{-9}$

Demandé: - Probleme transitoire $\partial/\partial t \neq 0$ - Methode differences finies - Verification du code

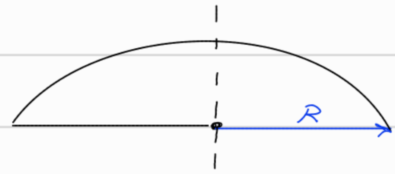
Hypotheses: - terme source constant $S = 8 \cdot 10^{-9}$ mol / m³s

Équation à resoudre: $\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff} \nabla^2 C - S \qquad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} =$

A) Simplification: a) Équation de type parabolique (degré 1 en temps, degré 2 en espace)

b) le domaine est axisymetrique et infiniment long => negliger les changements en z => $\partial/\partial z = 0$

Le cylindre est homogene et soumit aux memes c.l sur tout son contour, on neglige les changements en θ => $\partial/\partial\theta = 0$. Le probleme devient 1D axisymetrique:



c) Discretisation a 5 noeuds

minimiser la taille des intervalles pour maximiser la precision ?

$i =$	1	2	3	4	5
	0	0,25	0,5	0,75	1

$\Delta x = 0{,}25$ m

d) Conditions frontieres: $\partial C/\partial x(x=0, t) = 0$ Neumann $\qquad C(x=1, t) = Ce$ Dirichlet

condition initiale: $C(x, t=0) = 0$

B) Discretisation de l'équation: $\nabla^2 C = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) + \cancel{\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2}} + \cancel{\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}}$

$$\Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) - S = \frac{D_{eff}}{r}\left[r\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{\partial C}{\partial r}\right] - S$$

forme demandée

à discretiser: $$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{D_{eff}}{r}\frac{\partial C}{\partial r} - S$$

Euler implicite: $\left.\frac{\partial C}{\partial t}\right|_{i,t} = \frac{C_i^t - C_i^{t+1}}{\Delta t} \quad \left.\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\right|_{i,t} = \frac{C_{i+1}^{t+1} - 2C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2} \quad \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{i,t} = \frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta r}$

a) Aux noeuds internes:

$$\Rightarrow \frac{C_i^t - C_i^{t+1}}{\Delta t} = D_{eff}\frac{C_{i+1}^{t+1} - 2C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2} + \frac{D_{eff}}{r_i}\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta r} - S$$

Noeud de gauche $\partial C/\partial r = 0$ => approximation avant d'ordre un:

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{i,t} = \frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta r} = 0$$

! Pas sure. utiliser un schema d'ordre 1 ou 2

Noeud de droite: nous avons la valeur de C en ce point

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta r} = 0 & i = 1 \\ \frac{C_i^t - C_i^{t+1}}{\Delta t} = D_{eff}\frac{C_{i+1}^{t+1} - 2C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2} + \frac{D_{eff}}{r_i}\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{\Delta r} - S & i = 2, 3, 4 \\ C_i^{t+1} = Ce & i = 5 \end{cases}$$

b) La methode pour resoudre le systeme d'équations : 1) Réécrire le systeme d'éq pour faire sortir les inconnus :

$$\begin{cases} C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1} = 0 & i = 1 \\ \dfrac{D}{\Delta r^2}\left[C_{i+1}^{t+1} - 2C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1}\right] + \dfrac{D}{r_i \Delta r}\left[C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}\right] - \dfrac{1}{\Delta t}\left[C_i^t - C_i^{t+1}\right] = S & i = 2, 3, 4 \\ C_i^{t+1} = Ce & i = 5 \end{cases}$$

2) En chaque point : on pose : $\dfrac{D}{\Delta r^2} = a$ $\quad \dfrac{D}{\Delta r} = b$ $\quad \dfrac{1}{\Delta t} = e$

$$\begin{array}{ll} i=1 & C_2^{t+1} - C_1^{t+1} = 0 \\ i=2 & a\,C_3^{t+1} - 2a\,C_2^{t+1} + a\,C_1^{t+1} + \frac{b}{r_2}C_3^{t+1} - \frac{b}{r_2}C_2^{t+1} + e\,C_2^{t+1} = S + e\,C_2^t \\ i=3 & a\,C_4^{t+1} - 2a\,C_3^{t+1} + a\,C_2^{t+1} + \frac{b}{r_3}C_4^{t+1} - \frac{b}{r_3}C_3^{t+1} + e\,C_3^{t+1} = S + e\,C_3^t \\ i=4 & a\,C_5^{t+1} - 2a\,C_4^{t+1} + a\,C_3^{t+1} + \frac{b}{r_4}C_5^{t+1} - \frac{b}{r_4}C_4^{t+1} + e\,C_4^{t+1} = S + e\,C_4^t \\ i=5 & C_5^{t+1} = Ce \end{array}$$

$$\begin{cases} -C_1^{t+1} + C_2^{t+1} + 0\,C_3^{t+1} + 0\,C_4^{t+1} + 0\,C_5^{t+1} = 0 \\ a\,C_1^{t+1} + \left[-2a - \frac{b}{r_2} + e\right] C_2^{t+1} + \left[a + \frac{b}{r_2}\right] C_3^{t+1} + 0\,C_4^{t+1} + 0\,C_5^{t+1} = S + e\,C_2^t \\ 0\,C_1^{t+1} + a\,C_2^{t+1} + \left[-2a - \frac{b}{r_3} + e\right] C_3^{t+1} + \left[a + \frac{b}{r_3}\right] C_4^{t+1} + 0\,C_5^{t+1} = S + e\,C_3^t \\ 0\,C_1^{t+1} + 0\,C_2^{t+1} + a\,C_3^{t+1} + \left[-2a - \frac{b}{r_4} + e\right] C_4^{t+1} + \left[a + \frac{b}{r_4}\right] C_5^{t+1} = S + e\,C_4^t \\ 0\,C_1^{t+1} + 0\,C_2^{t+1} + 0\,C_3^{t+1} + 0\,C_4^{t+1} + C_5^{t+1} = Ce \end{cases}$$

3) Systeme matriciel a resoudre :

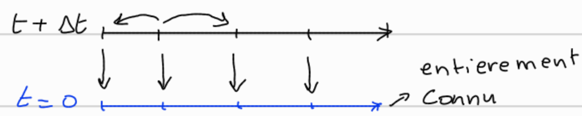
$$\begin{array}{c} \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ N\text{-}2 \\ N\text{-}1 \end{array}
\begin{array}{c} A \\ \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & -2a + b/r_2 + e & a + b/r_2 & 0 & 0 \\ 0 & a & -2a + b/r_3 + e & a + b/r_3 & 0 \\ 0 & 0 & a & -2a + b/r_4 + e & a + b/r_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{array}
\begin{array}{c} C \\ \begin{bmatrix} C_1^{t+1} \\ C_2^{t+1} \\ C_3^{t+1} \\ C_4^{t+1} \\ C_5^{t+1} \end{bmatrix} \end{array}
=
\begin{array}{c} B \\ \begin{bmatrix} 0 \\ S + eC_2^t \\ S + e\,C_3^t \\ S + e\,C_4^t \\ Ce \end{bmatrix} \end{array}$$

$\Rightarrow$ 1 systeme matriciel a resoudre pour chaque pas de temps

4) Algorithme : (A partir des notes de cours de GCH)

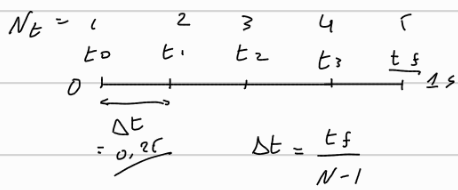
Note : La matrice A est fonction de la geometrie elle reste donc constante

Construire A



$t = 0$

tant que $t < t$ final



Construire B en fonction de la concentration au temps precedent

$C = A^{-1} B$

$t = t + \Delta t$

c) Ordres de precision attendus : $\left.\dfrac{dT}{dx}\right|_i \underset{\text{ordre } 1}{\longrightarrow} + \mathcal{O}(\Delta x)$ $\quad \left.\dfrac{d^2T}{dx^2}\right|_i \underset{\text{Ordre } 2}{\longrightarrow} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ $\quad \left.\dfrac{dT}{dt}\right|_i \underset{\text{ordre } 1}{\longrightarrow} + \mathcal{O}(\Delta t)$

Le schema utilisé est d'ordre 1 en temps et ordre 2 en espace

Question : nous avons dans notre discretisation (Δx) et Δx^2 lequel on choisit ?

d) Euler implicite $\rightarrow$ Pas de critere de stabilité sur Δt

c) On passe en regime stationnaire $\partial/\partial t = 0$

Équation à resoudre : $D_{eff} \nabla^2 C - S = 0$

EDP d'ordre 2 : $D_{eff} \dfrac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \dfrac{D_{eff}}{r} \dfrac{\partial c}{\partial r} - S = 0$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial c}{\partial r} - S/D = 0$$

changement de variable : $y = \dfrac{\partial c}{\partial r}$ $\quad y' = \dfrac{\partial^2 C}{\partial r^2}$

EDP d'ordre 1 : $y' + \dfrac{1}{r} y = S/D$ avec $p(r) = \dfrac{1}{r}$ $\quad g(r) = S/D$

On multiplie par un facteur integrant $\mu = e^{\int p(r) dr} = e^{\int \frac{1}{r} dr} = e^{\ln(r)} = r$

$$\Rightarrow \quad \mu y' + \mu \frac{1}{r} y = r y' + y = r\, S/D$$

$$\Rightarrow \quad \mu y' + \mu' y = r\, S/D$$

$$\Rightarrow \quad \int \mu y' + \mu' y \, \partial r = \int r\, S/D \, \partial r$$

$$\Rightarrow \quad \mu y + C = \frac{1}{2} r^2 S/D \Rightarrow y = \frac{1}{2} r\, S/D - \frac{c}{r}$$

$$y = \frac{\partial c}{\partial r} = \frac{1}{2} r \left(\frac{S}{D}\right) - \frac{c_1}{r} \Rightarrow C(r) = \int \frac{1}{2} r\, S/D \, \partial r - \int \frac{C}{r} \partial r$$

$C(r) = \dfrac{1}{4} r^2 S/D - c_1 \ln r + C_2$ $\quad$ C.l : $\left.\dfrac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$ $\quad C|_R = C_e$

$$\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right|_{r=0} =$$

$$D_{eff}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right)\right] - S = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right) - r\, S/D = 0$$

$$\int \frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right) \partial r - \int r\, S/D \, \partial r = 0$$

$$r\frac{\partial c}{\partial r} - \frac{1}{2} r^2 S/D + C = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial r} = \frac{1}{2} r\, S/D - \cancel{C_1/r} \qquad C_1 = 0$$

$$C(r) = \frac{1}{4} r^2 (S/D) + C_2 \qquad C(R) = C_e$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4} R^2 (S/D) + C_2 = C_e \Rightarrow C_2 = C_e - \frac{1}{4} R^2 (S/D)$$

$$\Rightarrow \quad C(r) = \frac{1}{4} r^2 (S/D) + C_e - \frac{1}{4} R^2 (S/D)$$

$$C(r) = \frac{1}{4}(S/D)\left(r^2 - R^2\right) + C_e = \frac{1}{4}\frac{S}{D_{eff}} R^2 \left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right) + C_e$$