



Devoir 1 – Vérification de code

Yusuf-Islam Dadi (2221097)

Issam Meriem (2207845)

Juliette Grisel (2491244)



GitHub Repo

- URL : <https://github.com/Kameleonn/MEC8211>
- Précisions sur le contenu du repo:
 1. “**Devoir_1/module.py**”: Ce fichier contient l’implémentation du code pour la solution analytique et la méthode des différences finies.
 2. “**Devoir_1/Reponse_Dev1.ipynb**”: Ce fichier est un Jupyter Notebook contenant l’ensemble de nos réponses aux questions. Il constitue la version préliminaire du document PDF soumis pour la remise. De plus, il inclut le code utilisé pour la génération des graphiques des profils de concentration ainsi que des erreurs. Il fait donc appel au premier fichier Python.

A) Simplifier et établir le problème stationnaire

a) Le problème résultant en stationnaire est **elliptique**:

$$D_{\text{eff}} \nabla^2 C - S = 0$$

b) Puisque la géométrie du problème est cylindrique, on a choisi un système de **coordonnées cylindrique** : $C(r, \theta, z)$

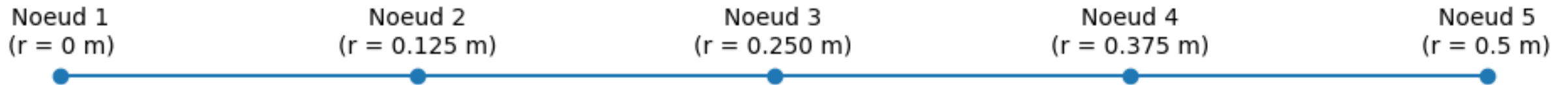
c) Simplifications :

1. Dû à l'hypothèse de la hauteur infinie, le problème ne dépend pas de la hauteur z .
2. Dû à l'hypothèse d'uniformité de la structure (pas de structure métallique) et de la géométrie circulaire, le problème devient radialement symétrique, et ne dépend pas de l'angle θ .

Le problème initialement 3D est réduit à un **problème 1D**: $C(r)$

A) Simplifier et établir le problème stationnaire – suite

d) Voici le domaine du modèle en 5 nœuds avec $\Delta r = \frac{R}{N} = \frac{0.5}{5} = 0.125 \text{ m}$



e) Conditions frontières :

1. À $r = 0$, condition de Neumann, pour imposer une symétrie :

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

2. À $r = 0.5$, condition de Dirichlet, pour imposer une concentration C_e :

$$C(0.5) = C_e$$

B) Résoudre analytiquement

- a) Voici la résolution de l'EDO ($\frac{\partial C}{\partial t} = D_{\text{eff}} \nabla^2 C - S$):
1. Simplification stationnaire et dim. $\Rightarrow \frac{d}{dr} \left(r \frac{dC}{dr} \right) = \frac{S}{D_{\text{eff}}} r$
 2. Intégration #1 $\Rightarrow r \frac{dC}{dr} = \frac{S}{2D_{\text{eff}}} r^2 + C_1$
 3. Condition de Neumann $\Rightarrow C_1 = 0 \Rightarrow r \frac{dC}{dr} = \frac{S}{2D_{\text{eff}}} r^2$
 4. Intégration #2 $\Rightarrow C(r) = \frac{S}{4D_{\text{eff}}} r^2 + C_2$
 5. Condition de Dirichlet $\Rightarrow C_2 = C_e - \frac{S}{4D_{\text{eff}}} R^2 \Rightarrow C(r) = \frac{S}{4D_{\text{eff}}} R^2 \left(\frac{r^2}{R^2} - 1 \right) + C_e$

C) Approximation de l'Éq. (1)

a) Avant d'implémenter les schémas, il faut changer simplifier l'EDO :

$$\frac{d}{dr} \left(r \frac{dC}{dr} \right) = \frac{S}{D_{\text{eff}}} r \Rightarrow \frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dC}{dr} = \frac{S}{D_{\text{eff}}}$$

1. Nœud 1 : Condition Neumann de symétrie discrétisée

$$\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} = 0 \Rightarrow \frac{C_2 - C_1}{\Delta r} = 0 \Rightarrow C_2 - C_1 = 0$$

2. Nœud 5 : Condition de Dirichlet discrétisée

$$C_i = C_e \Rightarrow C_5 = C_e$$

3. Nœud 2-3-4 : Seconde loi de Fick discrétisée

$$\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} = \frac{S}{D_{\text{eff}}} \Rightarrow \left(1 + \frac{\Delta r}{r_i} \right) C_{i+1} + \left(\frac{\Delta r}{r_i} - 2 \right) C_i + C_{i-1} = \frac{S \Delta r^2}{D_{\text{eff}}}$$

C) Approximation de l'Éq. (1) – suite

3. Nœud 2-3-4 (suite):

i. Nœud 2 : $\left(1 + \frac{\Delta r}{r_2}\right) C_3 + \left(\frac{\Delta r}{r_2} - 2\right) C_2 + C_1 = \frac{S\Delta r^2}{D_{\text{eff}}}$

ii. Nœud 3 : $\left(1 + \frac{\Delta r}{r_3}\right) C_4 + \left(\frac{\Delta r}{r_3} - 2\right) C_3 + C_2 = \frac{S\Delta r^2}{D_{\text{eff}}}$

iii. Nœud 4 : $\left(1 + \frac{\Delta r}{r_4}\right) C_5 + \left(\frac{\Delta r}{r_4} - 2\right) C_4 + C_3 = \frac{S\Delta r^2}{D_{\text{eff}}}$

b) Problème à N inconnus et N équations pouvant être résolu par un système matriciel:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Les coefficients a_{ij} et b_i sont déterminés par les équations se trouvant ci-dessus

C) Approximation de l'Éq. (1) – suite

c) Le développement de Taylor pour chaque variable discrète est :

$$C_{i+1} = C_i + \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_i \Delta r + \left. \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right|_i \frac{(\Delta r)^2}{2} + \left. \frac{\partial^3 C}{\partial r^3} \right|_i \frac{(\Delta r)^3}{6} + O(\Delta r^4)$$
$$C_{i-1} = C_i - \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_i \Delta r + \left. \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right|_i \frac{(\Delta r)^2}{2} - \left. \frac{\partial^3 C}{\partial r^3} \right|_i \frac{(\Delta r)^3}{6} + O(\Delta r^4)$$

Ainsi,

$$\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} = \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_i + \left. \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right|_i \frac{\Delta r}{2} + \left. \frac{\partial^3 C}{\partial r^3} \right|_i \frac{(\Delta r)^2}{6} + O(\Delta r^3) = \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_i + O(\Delta r)$$
$$\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{(\Delta r)^2} = \left. \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right|_i + O(\Delta r^2)$$

Alors, $\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i} \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} = \frac{S}{D_{\text{eff}}}$ est un schéma **d'ordre 1**.

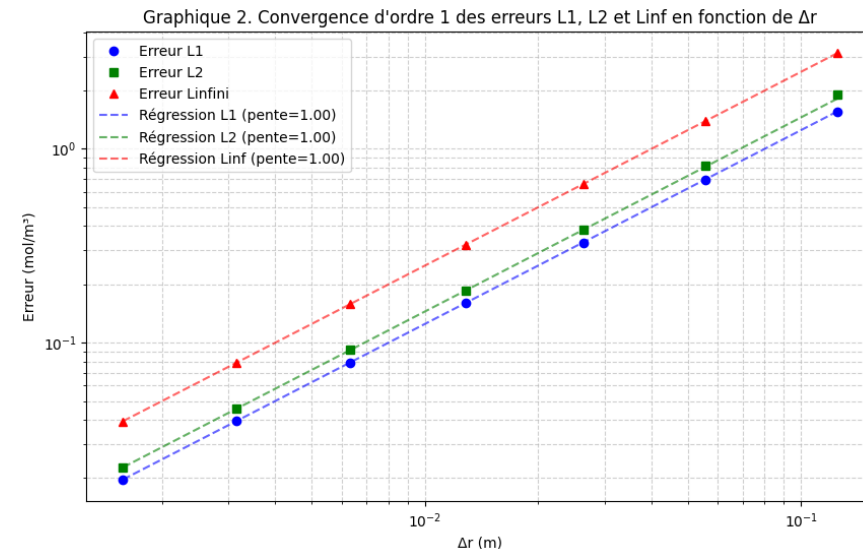
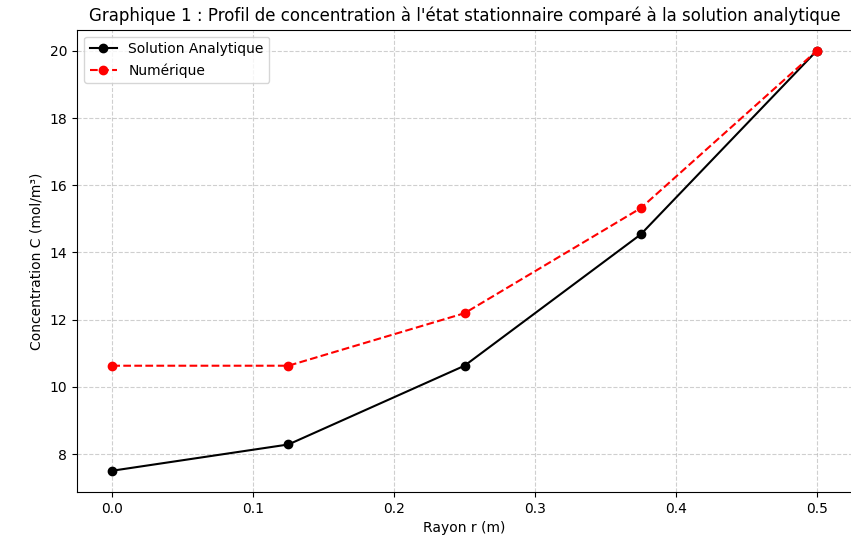
D) Code de calcul générique pour l'Éq. (1)

a) Paramètres de simulation :

1. $N = 5$ nœuds
2. $R = 0.5$ m
3. $S = 2 * 10^{-8} \frac{\text{mol}}{\text{m}^3 \frac{\text{s}}{\text{m}^2}}$
4. $D_{\text{eff}} = 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
5. $C_e = 20 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$

b) Erreurs L_1 , L_2 et L_∞ :

Le code est vérifié puisque les erreurs varient en fonction du Δr selon un ordre 1, ce qui correspond à l'ordre du schéma numérique théorique. De plus, on peut voir que l'erreur tend vers 0 lorsque Δr tend vers 0. C'est le comportement attendu.



E) Implémentation d'un nouveau schéma

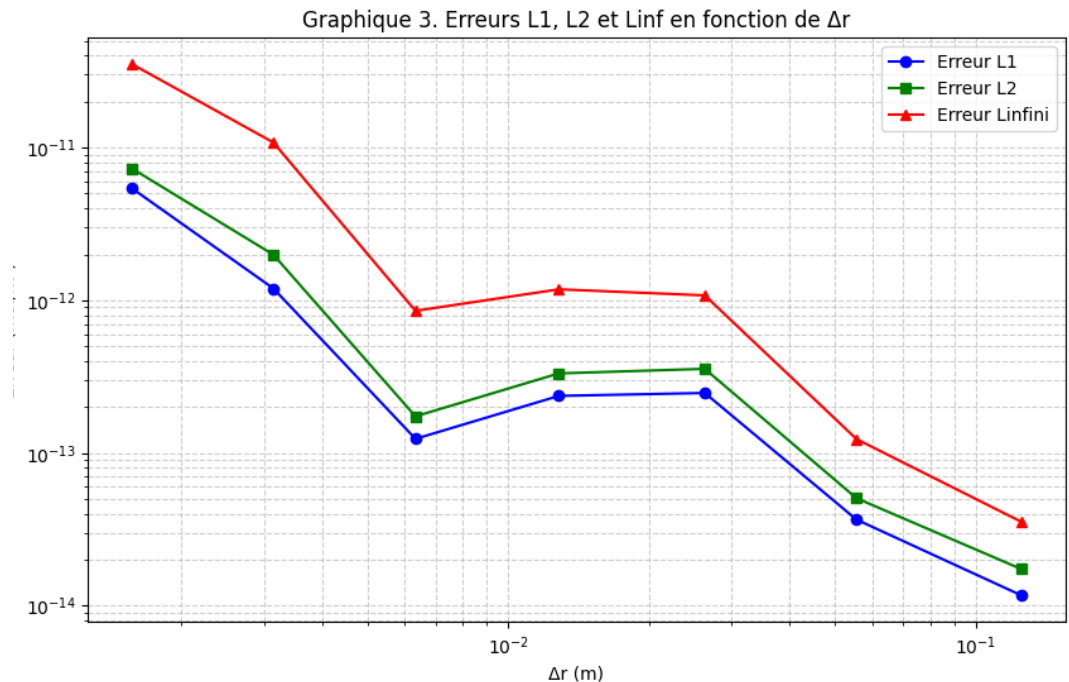
- a) Le développement de Taylor reste le même que celui de la diapo #6. Ainsi, pour le nouveau schéma de dérivé première:

$$\frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta r} = \frac{\partial C}{\partial r}\bigg|_i + \frac{\partial^3 C}{\partial r^3}\bigg|_i \frac{(\Delta r)^2}{6} + O(\Delta r^4) = \frac{\partial C}{\partial r}\bigg|_i + O(\Delta r^2)$$

Alors, le nouveau schéma global sera **d'ordre 2**.

- b) Erreurs L_1 , L_2 et L_∞ :

Les erreurs augmentent lorsque Δr tend vers 0. De plus, on peut observer que les erreurs sont très petite, soit autour de 10^{-12} . Finalement, l'ordre de l'erreur ne correspond pas du tout à l'ordre théorique du schéma ($L_1: -1.47$, $L_2: -1.44$ et $L_\infty: -1.69$ VS théo. : 2). On observe clairement que ces points ne font pas partie de la zone asymptotique.



E) Implémentation d'un nouveau schéma – suite

- c) Les paramètres de simulations sont les mêmes que ceux à la diapo #7 :
- d) Bien que les ordres de convergence observés semblent diverger de l'ordre théorique du schéma, on constate que les erreurs absolues atteignent le seuil de la précision machine ($\sim 10^{-14}$). À ce niveau de résolution, l'erreur de troncature mathématique est devenue inférieure au bruit numérique produit par l'ordinateur. L'erreur représente donc l'accumulation des erreurs d'arrondi aléatoires. Par conséquent, le schéma est considéré comme vérifié, puisqu'il atteint la limite de précision physique de l'environnement de calcul.

