Devoir 1 - Vérification de code

Lien github: MEC8211_Devoir1_Equipe667

Matricule 1:
Tilde Thurfjell Emilsson 2508175
Matricule 2
Kodjo N'tsougan 2167356
Matricule 3
Anick Langlois, 2192679

Partie A: Simplifier et établir le problème stationnaire

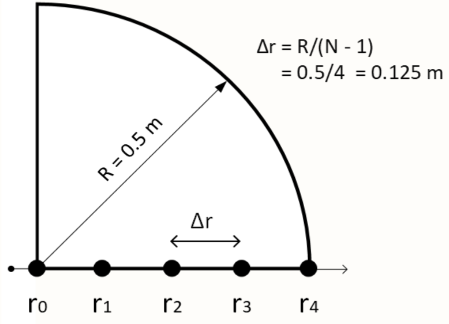
a. Problème de type elleptique

b. Système de cordonnées cylindriques axisymetrique

- Variable spatiale unique: r

c. Simplifications:

- Double symétrie;
- Hauteur infinie: auncune évolution de la concentration selon l'axe z.;
- Cylindre submergé et symétrique: aucune évolution de la concentration selon théta.
- Terme source constant



e. Conditions frontières

- Dirichlet: $C(R) = C(0.5) = C_e = 20\ mol/m^3$
- Neumann: $\frac{\partial C}{\partial r}|_{r=0} = 0$ (centre du cercle)
- Condition initiale non applicable (problème stationnaire)

Partie B: Solution analytique

$$\nabla^2 C = \frac{S}{D_{eff}}$$

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

$$\frac{d}{dr}\left(r\frac{dC}{dr}\right) = \frac{S}{D_{eff}}r$$

$$r\frac{dC}{dr} = \int \frac{S}{D_{eff}} r dr = \frac{S}{2D_{eff}}r^2 + A$$

$$\frac{dC}{dr} = \frac{S}{2D_{eff}}r + \frac{A}{r}$$

$$C(r) = \int \left(\frac{S}{2D_{eff}}r + \frac{A}{r}\right) dr = \frac{S}{4D_{eff}}r^2 + A\ln r + B$$

Conditions frontières:

Neumann: $$r\frac{dC}{dr} = \frac{S}{2D_{eff}}r^2 + A$$

$$r\frac{dC}{dr}\bigg|_{r=0} = \frac{S}{2D_{eff}}0^2 + A \Rightarrow A = 0$$

Dirichlet: $$C(R) = \frac{S}{2D_{eff}}R^2 + B = C_e$$

$$B = C_e - \frac{S}{2D_{eff}}R^2$$

Donc: $$C(r) = \frac{S}{4D_{eff}}r^2 + C_e - \frac{S}{2D_{eff}}R^2$$

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

C.Q.F.D.

Partie C: Équations à résoudre

- $\boldsymbol{Pour\ i = N-1}$: $\quad C_i = C_e$

- $\boldsymbol{Pour\ i = 0}$:

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

- $\boldsymbol{Pour\quad i \in [1, N-2]}$:

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

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

$$\gamma = \frac{1}{\Delta r^2} \quad ; \quad \beta = -\frac{2}{\Delta r^2} - \frac{1}{r_i \Delta r} \quad ; \quad \alpha = \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i \Delta r}$$

$\boldsymbol{Procédure\ de\ résolution}$:

$$A\vec{C} = \vec{b} \Rightarrow \vec{C} = A^{-1}\vec{b}$$

$$\vec{C} = [C_0 \quad C_1 \quad C_2 \quad C_3 \quad C_4]^T$$

$$\vec{b} = \left[0 \quad \frac{S}{D_{eff}} \quad \frac{S}{D_{eff}} \quad \frac{S}{D_{eff}} \quad C_e\right]^{\mathrm{T}}$$

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma & \beta & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & \beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & \beta & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Erreur de troncature et précision

est :

$$L_h(C|_i) = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i}\left(\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r}\right) - \frac{S}{D_{eff}} = 0 \tag{1}$$

Développons les termes C_{i+1} et C_{i-1} en série de Taylor autour du nœud central i :

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

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

$$\begin{aligned}\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} &= \frac{\left(2C_i + \Delta r^2 \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\big|_i + \frac{\Delta r^4}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial r^4}\big|_i + \dots\right) - 2C_i}{\Delta r^2} \\ &= \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\Big|_i + \underbrace{\frac{\Delta r^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial r^4}\Big|_i}_{O(\Delta r^2)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} &= \frac{\left(C_i + \Delta r \frac{\partial C}{\partial r}\big|_i + \frac{\Delta r^2}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\big|_i + \dots\right) - C_i}{\Delta r} \\ &= \frac{\partial C}{\partial r}\Big|_i + \underbrace{\frac{\Delta r}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\Big|_i}_{O(\Delta r)}\end{aligned}$$

L'erreur de troncature est la différence $TE = L_h(C) - L(C)$. En soustrayant l'équation (1) de l'équation (2) développée :

$$\begin{aligned}TE = &\left[\left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + O(\Delta r^2)\right) + \frac{1}{r_i}\left(\frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\Delta r}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \dots\right) - \frac{S}{D_{eff}}\right] \\ &- \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r_i}\frac{\partial C}{\partial r} - \frac{S}{D_{eff}}\right]\end{aligned}$$

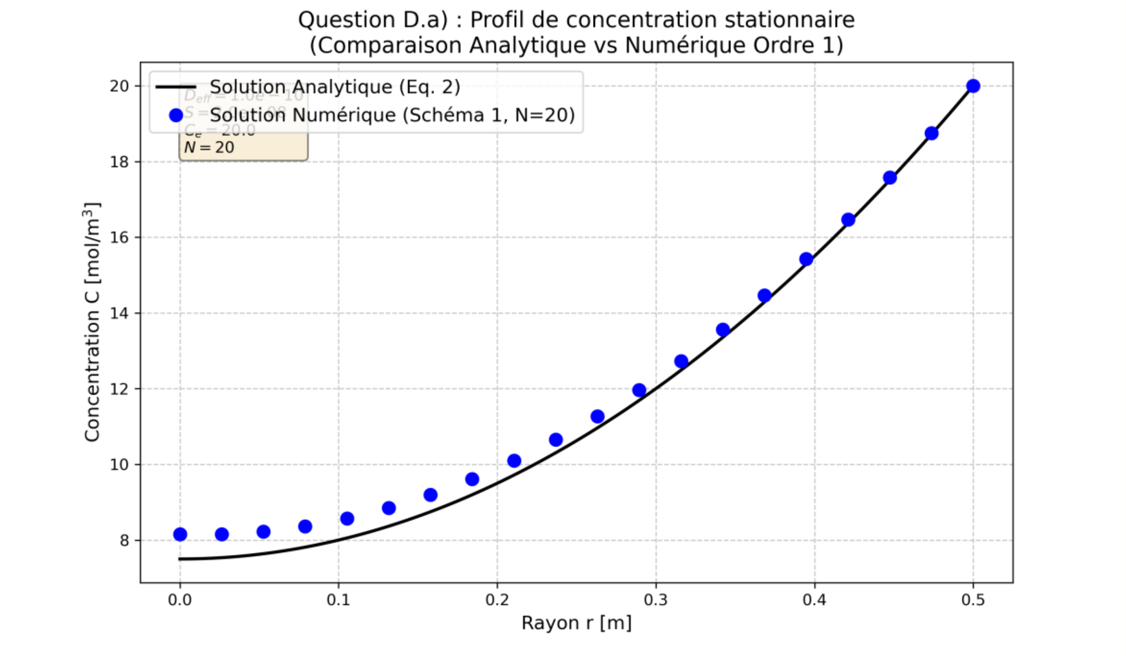
Les termes exacts s'annulent, il ne reste que les termes d'erreur :

$$TE \approx \frac{1}{r_i}\left(\frac{\Delta r}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\Big|_i\right) + O(\Delta r^2) \tag{4}$$

L'erreur de troncature est dominée par le terme provenant de la discrétisation de la dérivée première (schéma forward).
L'erreur est proportionnelle à Dr.
L'ordre de précision global du schéma est donc d'Ordre 1

Partie D: Tracés et vérifications

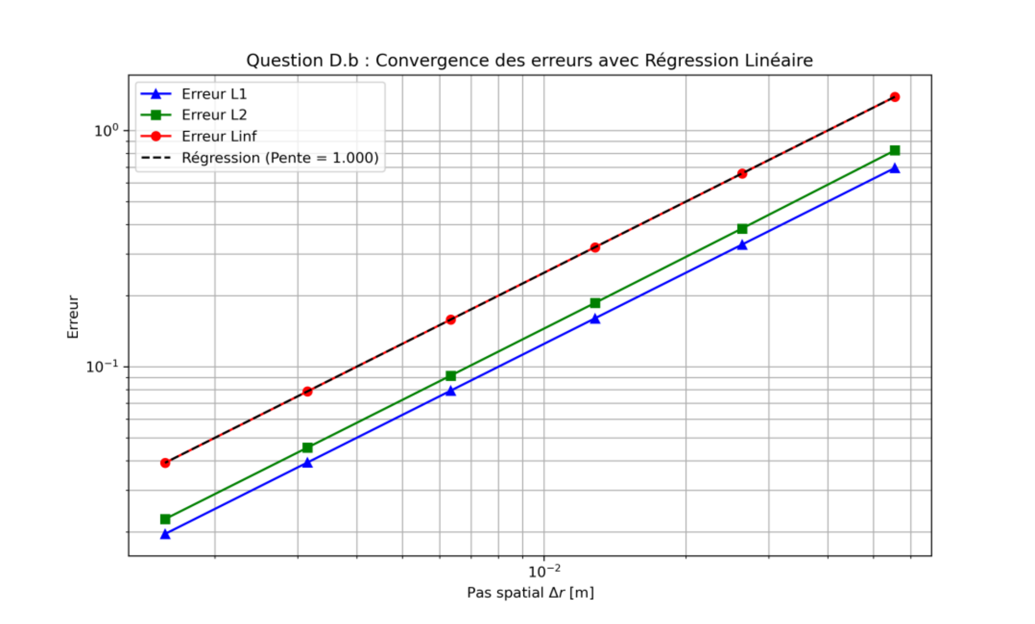
a) Tracé du profil de concentration et comparaison à la solution analytique



PARAMÈTRES DE SIMULATION
==
Coefficient diffusion (Deff) : 1.0e-10 m^2/s
Terme source (S) : 2.0e-08 mol/m^3/s
Concentration surface (Ce) : 20.0 mol/m^3
Rayon du pilier (R) : 0.5 m
Nombre de nœuds (N) : 20
Pas spatial (dr) : 0.0263 m

Partie D: Tracés et vérifications

b) Tracé des différentes erreurs L1, L2 et Linf



On voit bien que la pente de la régression linéaire est de 1, ce qui indique bien une convergence d'ordre 1 à cause du schéma de différenciation utilisé.
La pente est calculée avec la formule ci-dessous.

$$\hat{p} = \frac{\log\left(\frac{E_{coarse}}{E_{fine}}\right)}{\log\left(\frac{\Delta x_{coarse}}{\Delta x_{fine}}\right)}$$

Partie E: Avec un schéma d'ordre 2

a) Erreur de troncature et ordre de précision attendu

$$L_h(C|_i) = \underbrace{\frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2}}_{\text{Dérivée seconde (inchangée)}} + \frac{1}{r_i}\underbrace{\left(\frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta r}\right)}_{\text{Dérivée première (Centrée)}} - \frac{S}{D_{eff}} = 0 \qquad (5)$$

$$C_{i+1} - C_{i-1} = 2\Delta r \frac{\partial C}{\partial r}\bigg|_i + \frac{2\Delta r^3}{6}\frac{\partial^3 C}{\partial r^3}\bigg|_i + O(\Delta r^5)$$

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

L'erreur de troncature $TE = L_h(C) - L(C)$ rassemble maintenant deux termes d'ordre 2 :

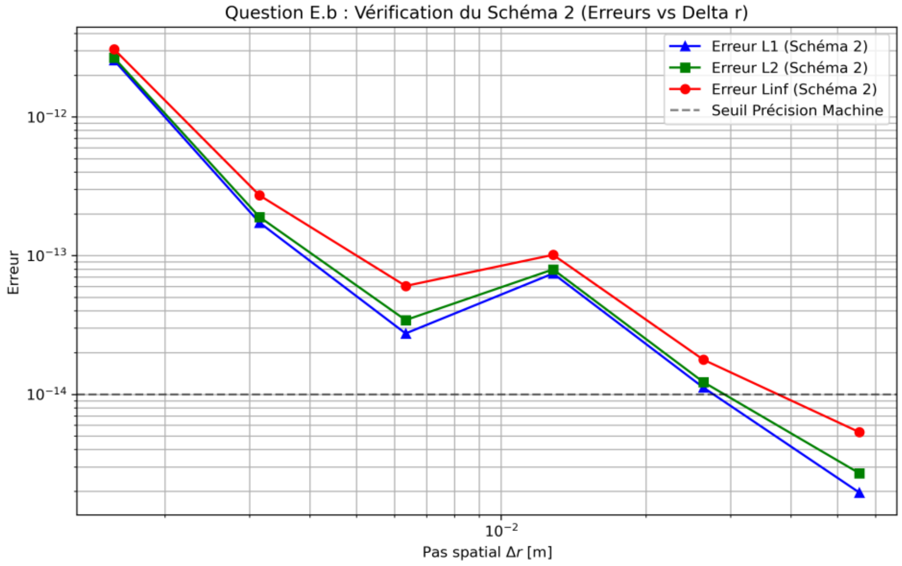
1. L'erreur de la dérivée seconde (calculée en C.c) : $O(\Delta r^2)$.
2. L'erreur de la dérivée première (calculée ci-dessus) : $O(\Delta r^2)$.

$$TE \approx \left(\frac{\Delta r^2}{12}\frac{\partial^4 C}{\partial r^4}\right) + \frac{1}{r_i}\left(\frac{\Delta r^2}{6}\frac{\partial^3 C}{\partial r^3}\right)$$
$$TE = O(\Delta r^2)$$

En utilisant un schéma centré pour la dérivée première, l'erreur dominante est désormais proportionnelle au carré du pas Dr^2.
L'ordre de précision global du Schéma 2 est donc d'Ordre 2.

Partie E: Avec un schéma d'ordre 2

b) Vérification du code

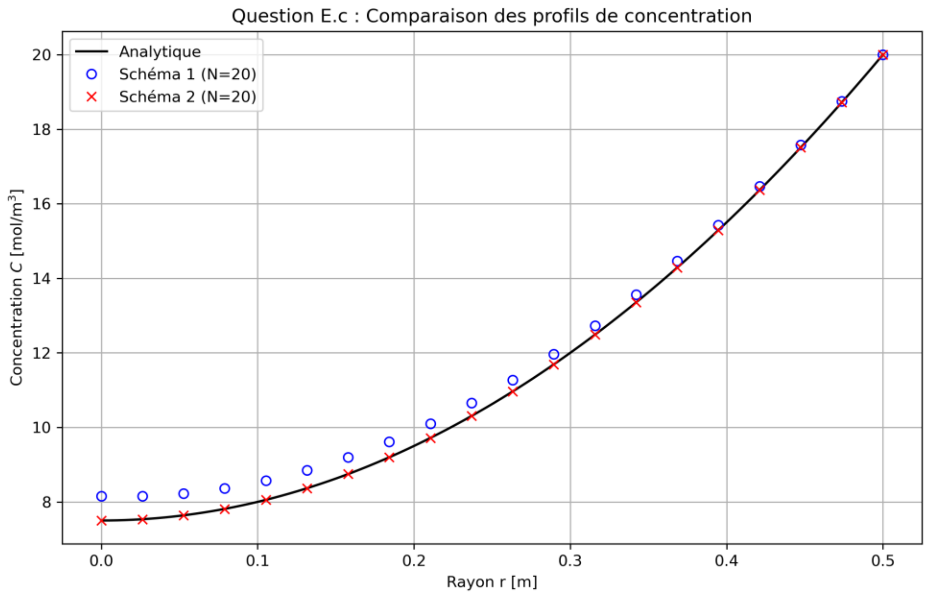


- Les erreurs L1 ,L2 et L∞ ne suivent pas une pente logarithmique mais stagnent à un niveau très bas (≈10^−14)."
- La solution analytique est un polynôme de degré 2 (r^2). Le schéma aux différences finies centrées (ordre 2) est mathématiquement exact pour les dérivées de polynômes jusqu'au degré 3. Par conséquent, l'erreur de discrétisation est nulle. L'erreur visible est uniquement due à la précision machine (erreurs d'arrondi flottant)."

On ne peut pas faire une régression linéaire pour trouver une pente sur ce graphique, le résultat serait aléatoire et mathématiquement faux.

Partie E: Avec un schéma d'ordre 2

c) Tracé des profils de concentrations et comparaison



On voit bien que le schéma d'ordre 2 et la solution analytique sont superposés, on peut alors supposer que l'erreur est minuscule, ce qui confirme l'exactitude.

Partie E: Avec un schéma d'ordre 2

e) Que constatons-nous maintenant ?

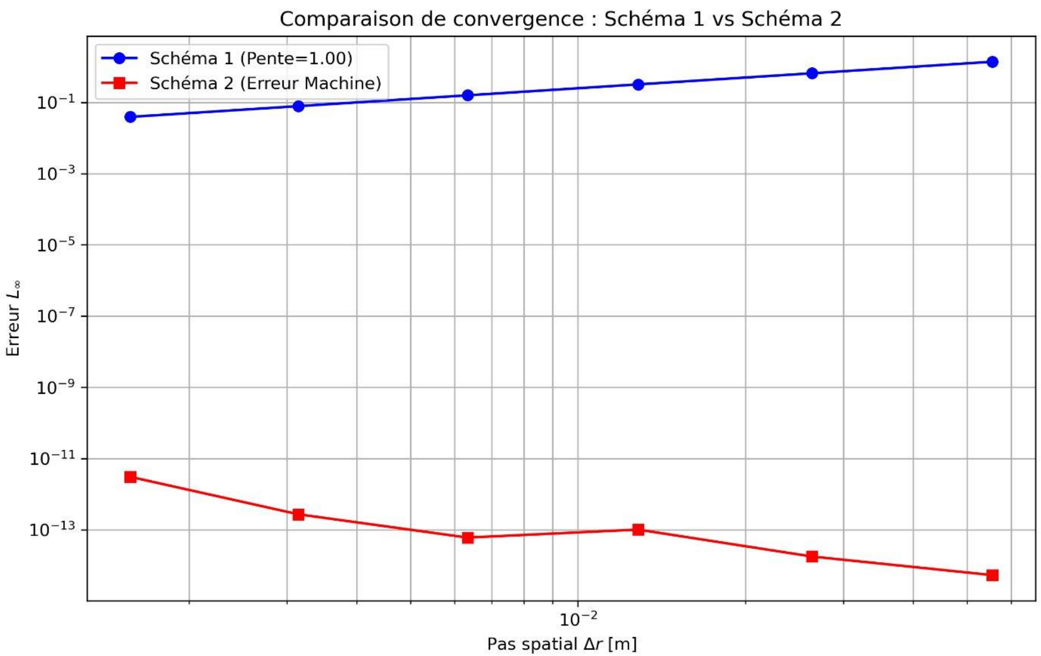


Schéma 1 - Pente Linf observée : 1.000 (Attendu : 1.0)
Schéma 1 - Erreur Linf finale : 3.92e-02
Schéma 2 - Pente Linf observée : -3.484
Schéma 2 - Erreur Linf finale : 3.07e-12 (Précision Machine)

La solution analytique du problème est une parabole (C(r)∝r^2). Or, un schéma numérique d'ordre 2 (différences centrées) est mathématiquement exact pour tout polynôme de degré 2.

- L'erreur de discrétisation est donc théoriquement nulle.
- Ce que le graphique ci-contre affiche, c'est uniquement le bruit numérique (erreurs d'arrondi de l'ordinateur vers 10−12), qui s'accumule de façon aléatoire. Essayer de calculer une pente sur du bruit donne des résultats absurdes (comme -3.48), mais cela prouve que le code est parfait pour ce cas test.