Devoir 2

Lucas Pandolphi Zini (2177706)

4 mars 2024

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

(A) Vérification de code — MNP

La procédure choisie a été la méthode des solutions proches (MNP). Le code du devoir 1 a été adapté pour inclure le terme de la réaction de première ordre ($S = kC$). Le schéma de différentiation et les paramètres se trouvent sur la diapositive suivante.
Le rayon a été discrétisé en utilisant un maillage fin ($N = 100$). Ensuite, la concentration en régime stationnaire a été calculée; ce résultat a servi de base à la construction d'une spline cubique, qui a été supposée être la solution analytique au problème.
Les concentrations correspondant à différents maillages ont été calculées et comparées à la solution analytique en déterminant les erreurs.

Les codes sont disponibles sur
`https://github.com/lucaspzini/MEC8211.git`.

(A) Schéma de différentiation

$i = 0$: schéma de Gear (condition de symétrie, Neumann).

$$-3C_0^{t+1} + 4C_1^{t+1} - C_2^{t+1} = 0.$$

$1 \leqslant i \leqslant N-2$:

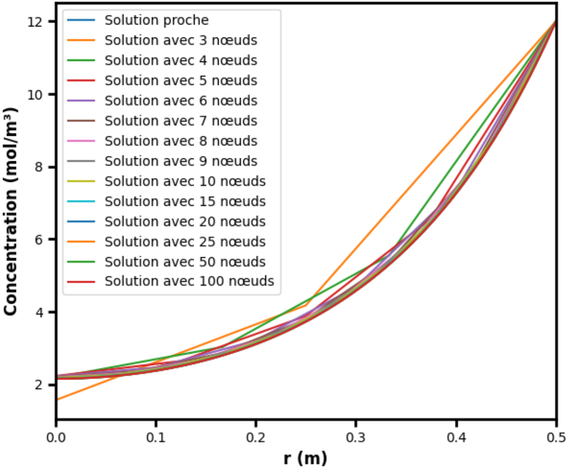
$$-D_{\text{eff}}\Delta t \left(1 - \frac{h}{2r_i}\right) C_{i-1}^{t+1} + (2D_{\text{eff}}\Delta t + h^2 + \boldsymbol{kh^2 \Delta t}) C_i^{t+1} \\ - D_{\text{eff}}\Delta t \left(1 + \frac{h}{2r_i}\right) C_{i+1}^{t+1} = h^2 C_i^t.$$

$i = N-1$:

$$C_i^t = C_i^{t+1} = C_e.$$

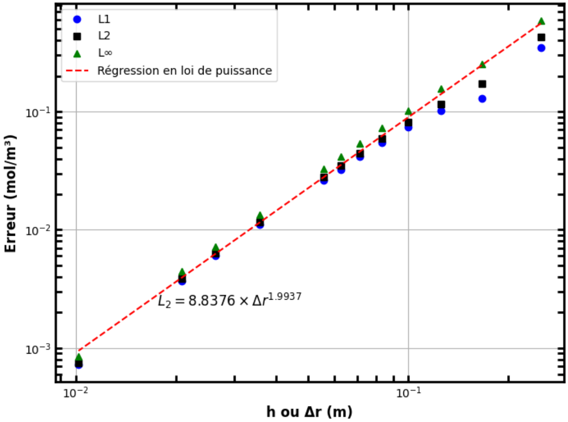
$R = 0{,}5\,\text{m}$, $D_{\text{eff}} = 1 \times 10^{-10}\,\text{m}^2\,\text{s}^{-1}$, $k = 4 \times 10^{-9}\,\text{s}^{-1}$, $C_e = 12\,\text{mol}\,\text{m}^{-3}$, $dt = 1 \times 10^6\,\text{s}$, $\epsilon = 1 \times 10^{-10}$ (critère d'arrêt).

(A) Vérification de code — MNP



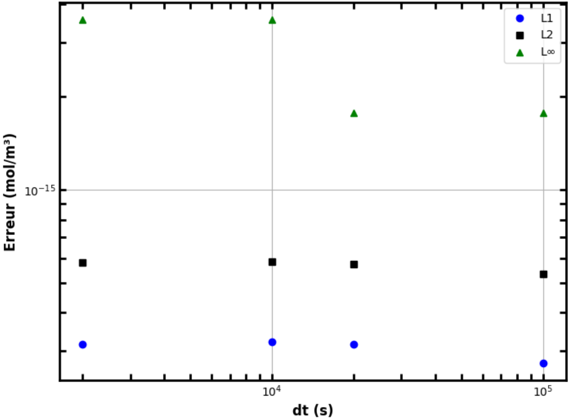
Les solutions avec un plus grand nombre de nœuds tendent vers la solution « analytique » (ou solution proche).

(A) Vérification de code — MNP



Comme prévu, un ordre de convergence qui se rapproche de deux a été obtenu pour l'erreur en espace.

(A) Vérification de code — MNP



L'erreur en temps n'a pas d'ordre de convergence apparent. Les valeurs calculées sont de l'ordre de 10^{-15}.

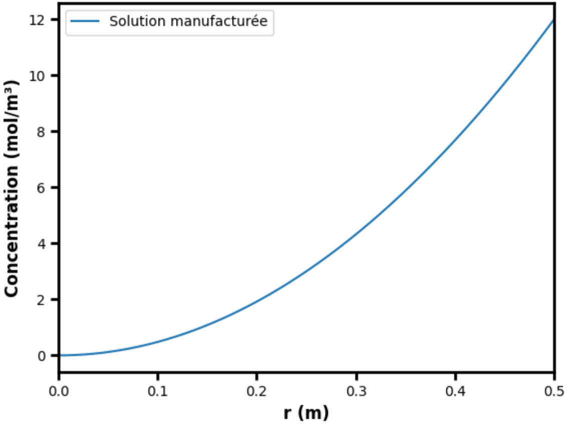
$dt = [2 \times 10^3, 1 \times 10^4, 2 \times 10^4, 1 \times 10^5]$ s, $N = 50$ nœuds en espace, $\epsilon = 1 \times 10^{-8}$ (critère d'arrêt).

(B) MMS

Solution manufacturée :

$$\hat{C}(r) = C_e \frac{r^2}{R^2} \exp\left(\frac{t}{t_0}\right),$$

où $t_0 = 1 \times 10^{20}$ a été introduit pour maintenir la cohérence des unités. Le schéma de différentiation se trouve sur la diapositive suivante.



(B) Schéma de différentiation

$i = 0$: schéma de Gear (condition de symétrie, Neumann).

$$-3\hat{C}_0^{t+1} + 4\hat{C}_1^{t+1} - \hat{C}_2^{t+1} = 0.$$

$1 \leqslant i \leqslant N - 2$:

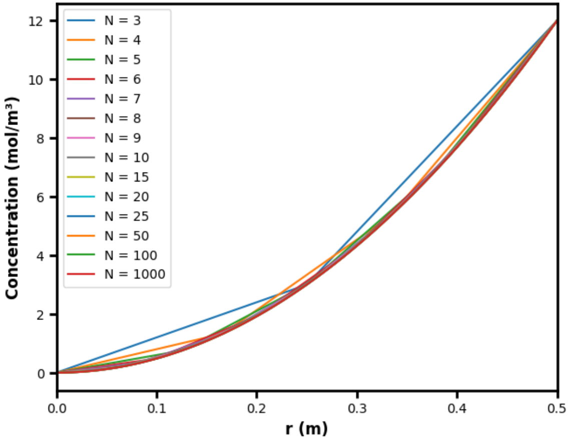
$$-D_{\text{eff}}\Delta t \left(1 - \frac{h}{2r_i}\right) \hat{C}_{i-1}^{t+1} + (2D_{\text{eff}}\Delta t + h^2 + kh^2\Delta t)\hat{C}_i^{t+1} - D_{\text{eff}}\Delta t \left(1 + \frac{h}{2r_i}\right) \hat{C}_{i+1}^{t+1}$$
$$= h^2 \hat{C}_i^t + h^2 \Delta t \frac{\boldsymbol{C_e}}{\boldsymbol{R^2}} \mathbf{exp}\left(\frac{\boldsymbol{t}}{\boldsymbol{t_0}}\right) \left(\frac{\boldsymbol{r^2}}{\boldsymbol{t_0}} - 4\boldsymbol{D}_{\text{eff}} + \boldsymbol{kr^2}\right),$$

où le deuxième terme du côté droit de l'équation représente le terme source.

$i = N - 1$: condition de Dirichlet.

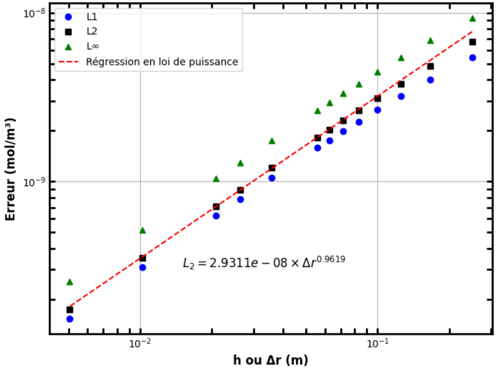
$$\hat{C}_i^{t+1} = \hat{C}(R, t) = C_e \exp\left(\frac{t}{t_0}\right).$$

(B) MMS



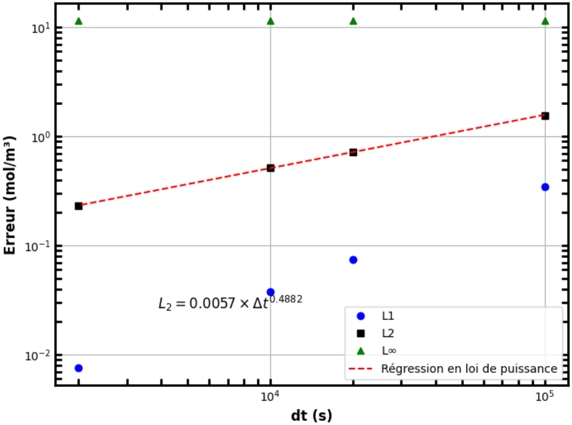
Les solutions avec un plus grand nombre de nœuds tendent vers la solution manufacturée.

(B) MMS



Un ordre de convergence qui se rapproche de un a été atteint pour l'erreur en espace.
Un ordre de convergence de deux était attendu. Il n'est donc pas possible d'affirmer que la vérification du code a été effectuée.

(B) MMS



La vérification en fonction du temps n'a pas non plus été effectuée.

$dt = [2 \times 10^3, 1 \times 10^4, 2 \times 10^4, 1 \times 10^5]$ s, $N = 50$ nœuds en espace, $\epsilon = 1 \times 10^{-10}$ (critère d'arrêt).

(C) Conclusion

La méthode la plus facile à mettre en œuvre est la MMS, car la solution analytique est déjà fournie et l'étape d'interpolation de la MNP est évitée.

La methode qui semble la plus précise est la MMS parce que le lissage réalisé lors de la MNP peut introduire des erreus. Toutefois, la précision dépendra de la solution analytique choisie et de la mise en œuvre correcte de la méthode.

Dans le cas présenté ici, la MNP a été la meuilleure méthode dans le processus de validation.