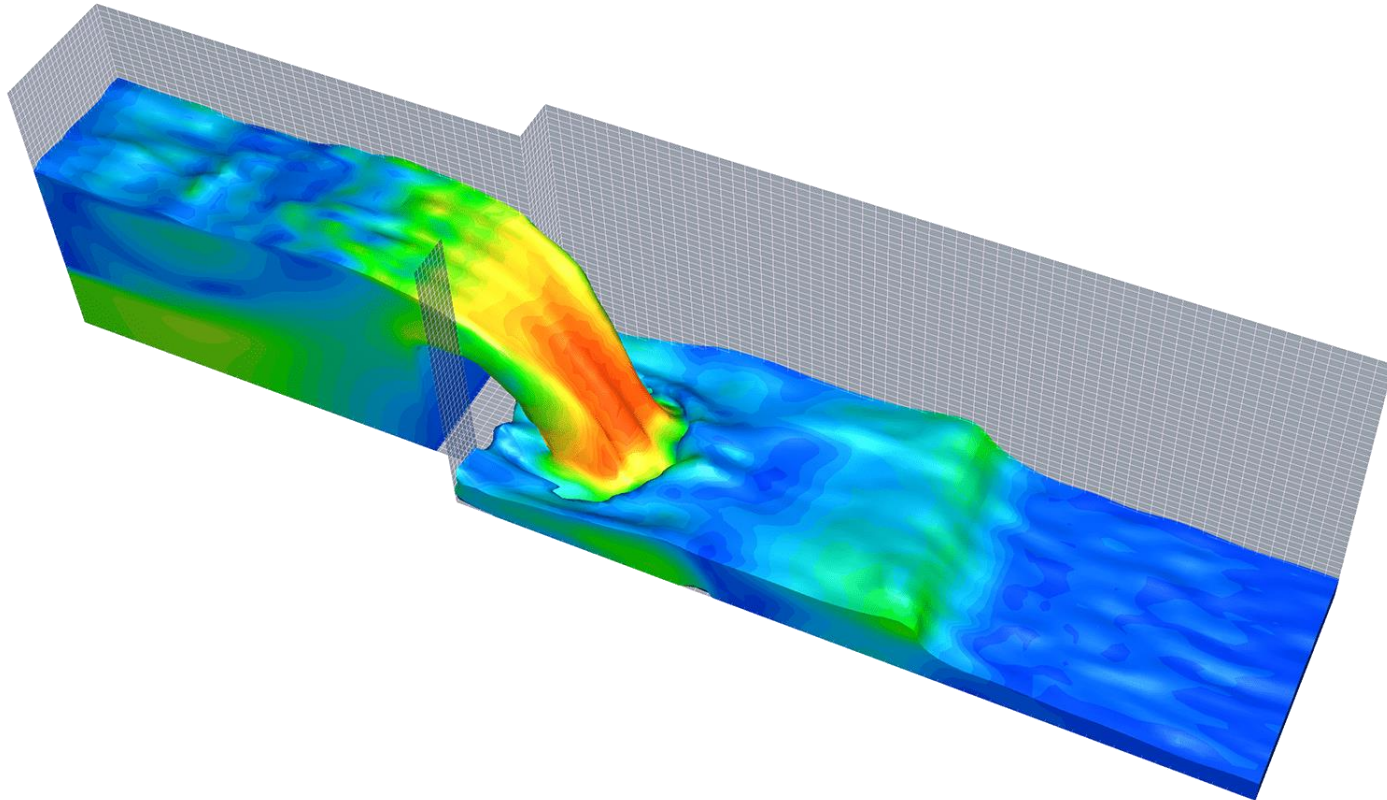


# Modélisation numérique en génie chimique

## GCH2535

### Équations aux dérivées ordinaires (EDO)



**POLYTECHNIQUE  
MONTRÉAL**

LE GÉNIE  
EN PREMIÈRE CLASSE

Diapositives adaptées de :

David Vidal

Bruno Blais

François Bertrand



# Plan de cours

Semaine	Date	Séance	Notes	Sujet
2	Mercredi 8 Jan	1		EDP
2	Jeudi 9 Jan	2		EDP
3	Mercredi 15 Jan	3		EDP
3	Jeudi 16 Jan	4	Départ Devoir 1 (EDP)	EDP
4	Mercredi 22 Jan	5		EDP
4	Jeudi 23 Jan	6		TD#1
5	Mercredi 29 Jan	7	Remise Devoir 1 (EDP)	Intro
5	Jeudi 30 Jan	8		Intro / EDO
6	Mercredi 5 Fév	9	Partiel 1 (EDP)	CP#1
6	Jeudi 6 Fév	10		EDO
7	Mercredi 12 Fév	11	Départ Devoir 2 (MDF)	TD#2
7	Jeudi 13 Fév	12		MDF
8	Mercredi 19 Fév	13		MDF
8	Jeudi 20 Fév	14		MEF
9	Mercredi 26 Fév	15		TD#3 (LAB-MDF)
9	Jeudi 27 Fév	16		MEF
10	Mercredi 4 Mar		Relâche	
10	Jeudi 5 Mar		Relâche	
11	Mercredi 11 Mar	17	Remise Devoir 2 (MDF)	TD#4 (LAB-MEF)
11	Jeudi 12 Mar	18	Partiel 2 (EDO-MDF-MEF)	CP#2
12	Mercredi 18 Mar	19		Données exp.
12	Jeudi 19 Mar	20	Départ Devoir 3	Données exp.
13	Mercredi 25 Mar	21		Bilans
13	Jeudi 26 Mar	22		TD#5
14	Mercredi 1 Avr	23		Bilans
14	Jeudi 2 Avr	24		Opt./Rec.
15	Mercredi 8 Avr	25	Remise Devoir 3	Opt./Rec.
15	Jeudi 9 Avr	26		TD#6

# Équations différentielles ordinaires avec conditions initiales

- Comment résoudre une équation différentielle ordinaire du type :

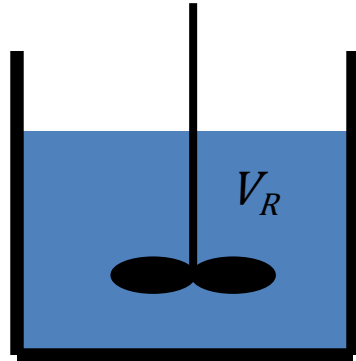
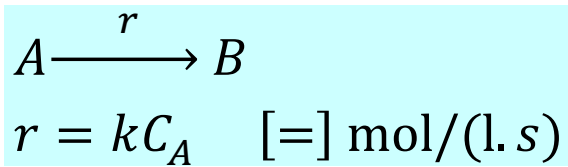
$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t))$$

Problème de Cauchy  
OU  
problème de valeur initiale

pour laquelle  $x(t=0)$  est connu.

- Utilisons un exemple :
  - Soit le réacteur semi-continu suivant

- La réaction qui s’y déroule est donnée par :



- Initialement, le réacteur contient un volume connu égal à  $V_0$  d’un liquide inerte.
- Le bilan de matière non stationnaire sur A s’écrit donc :

$$\text{entrée} - \text{consommation} + \text{génération} = \text{sortie} + \text{accumulation}$$

$$0 - kC_A V_R(t) + 0 = 0 + \frac{dn_A}{dt}$$

# Équations différentielles ordinaires avec conditions initiales

- Comment résoudre une équation différentielle ordinaire du type :

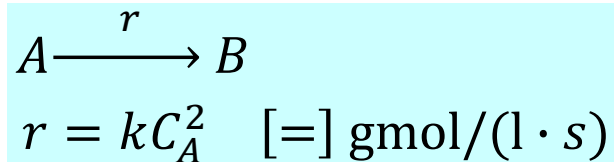
$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t))$$

Problème de Cauchy  
OU  
problème de valeur initiale

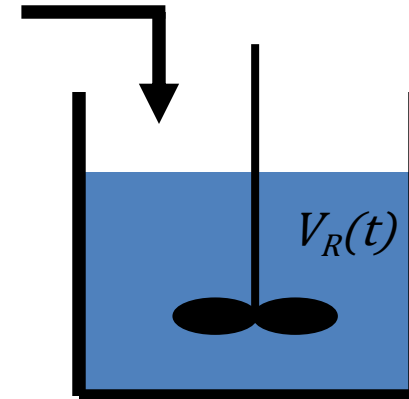
pour laquelle  $x(t=0)$  est connu.

- Utilisons un exemple :

- Soit le réacteur semi-continu suivant
- La réaction qui s'y déroule est donnée par :



$$Q_0 [=] \text{ l/s}$$
$$C_{A0} [=] \text{ mol/l}$$



- Initialement, le réacteur contient un volume connu égal à  $V_0$  d'un liquide inerte. On alimente le réacteur d'un réactif à un débit  $Q_0$  avec une concentration  $C_{A0}$ .
- Le bilan de matière non stationnaire sur A s'écrit donc :

$$\text{entrée} - \text{consommation} + \text{génération} = \text{sortie} + \text{accumulation}$$
$$Q_0 C_{A0} - kC_A^2 V_R(t) + 0 = 0 + \frac{dn_A}{dt}$$

- Ici,
  - $n_A = C_A \times V_R$  [=] mol
  - $dn_A/dt$  [=] mol/s
- Le bilan peut se réécrire :

$$\frac{dn_A}{dt} = Q_0 C_{A_0} - \frac{kn_A^2}{V_R(t)} \quad (1)$$

- Un bilan de masse sur tout le réacteur permet d'éliminer l'augmentation du volume dans le temps causé par l'ajout de réactif. Le bilan donne :

$$\frac{d}{dt}(\rho V_R) = \rho Q_0 \text{ avec comme condition initiale } V_R(0) = V_0$$

- Avec l'hypothèse que la masse volumique  $\rho$  ne change pas en raison de l'ajout et de la réaction, on obtient :

$$\frac{d}{dt}(V_R) = Q_0 \longrightarrow V_R = V_0 + Q_0 t$$

- L'équation (1) plus haut devient alors :

$$\frac{dn_A}{dt} = Q_0 C_{A_0} - \frac{kn_A^2}{V_0 + Q_0 t} \text{ et laquelle } n_A(0) = 0$$

- Avec les valeurs suivantes :
  - $C_{A0} = 1 \text{ gmol/l}$
  - $k = 0,1 \text{ l/(gmol} \cdot \text{s)}$
  - $Q_0 = 10 \text{ l/s}$
  - $V_0 = 50 \text{ l}$

- On obtient la forme :

$$\frac{dn_A}{dt} = 10 - \frac{0,1n_A^2}{50 + 10t} \quad (2)$$

avec  $n_A(0) = 0$

- On a donc bien un problème de la forme :

$$\frac{dn_A}{dt} = f(t, n_A)$$

- Comment résoudre?

## Développement en series de Taylor

$$f(x) = f(a) + \frac{(x-a)}{1!} \frac{df}{dx}(a) + \frac{(x-a)^2}{2!} \frac{d^2f}{dx^2}(a) + \frac{(x-a)^3}{3!} \frac{d^3f}{dx^3}(a) + \dots$$

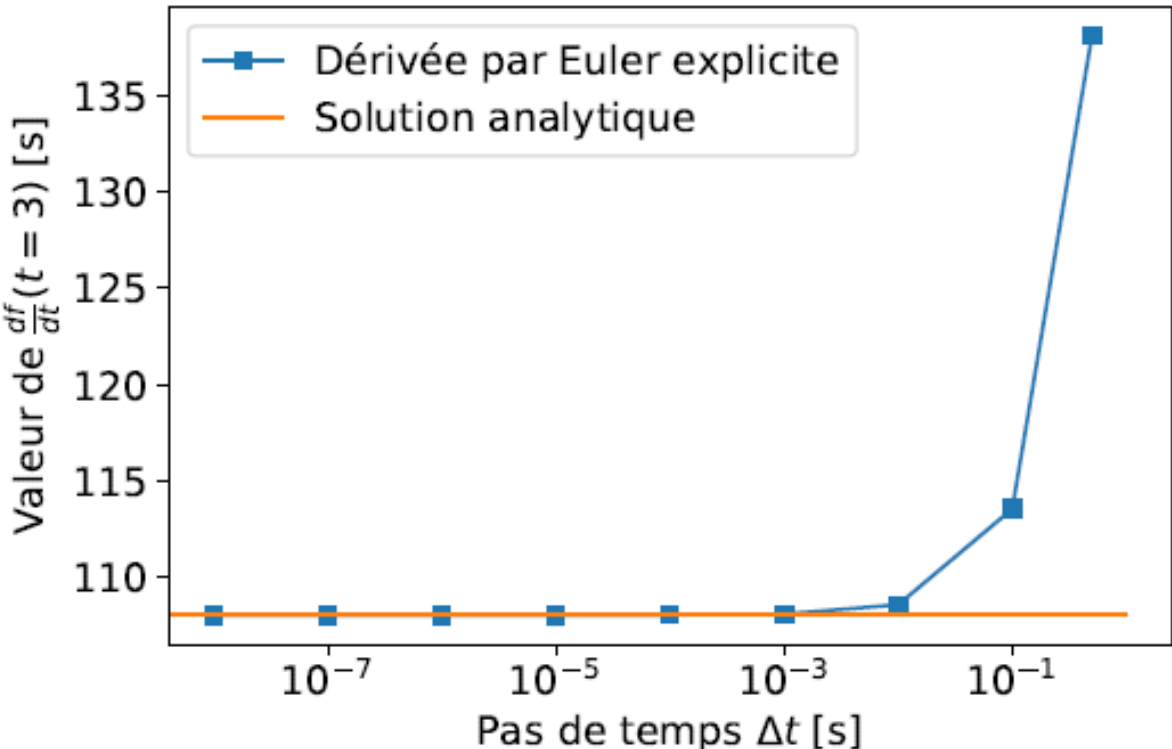
$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x-a)^n}{n!} \frac{d^n f}{dx^n}(a)$$

Exemple sur une fonction simple:

$$\begin{aligned} f(t) &= t^4 & \frac{df}{dt} &\approx \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} \\ \frac{df}{dt} &= 4t^3 & \frac{df}{dt} &\approx \frac{(t+\Delta t)^4 - (t)^4}{\Delta t} \end{aligned}$$

# La précision dépend du choix du pas de temps ...

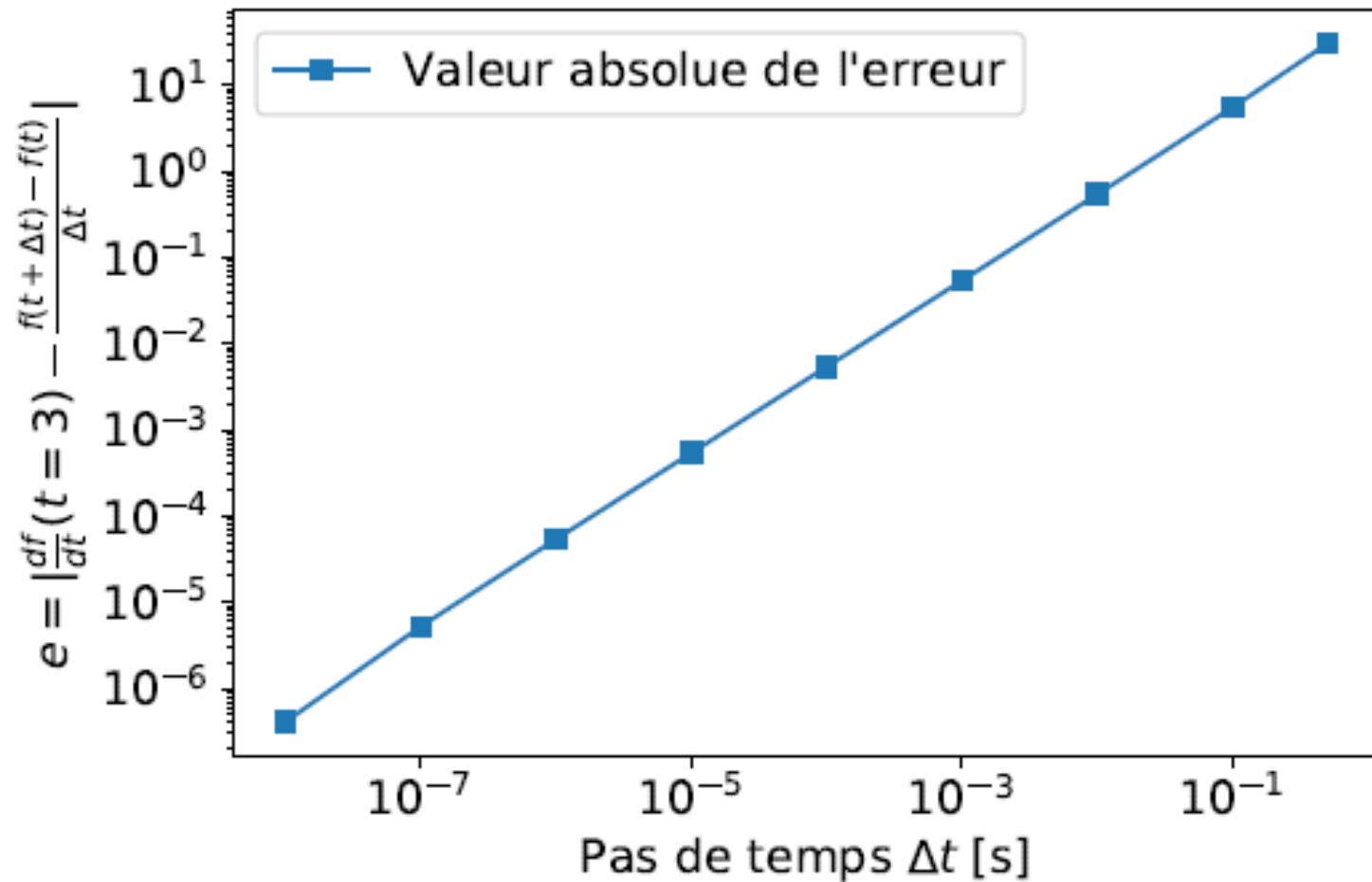
Autour du point  $t = 3$  la dérivée vaut :  $\frac{df}{dt} = 4t^3 = 108$





Erreur commise sur l'approximation à  $t = 3$  :

$$e\left(\frac{df}{dt}\right) = \left| \frac{df}{dt}(3) - \frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t} \right|$$



Les deux expressions suivantes sont équivalentes :

$$\frac{C(t + \Delta t) - C(t)}{\Delta t} = \frac{dC}{dt}(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{d^2C}{dt^2}(t) + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{d^3C}{dt^3}(t) + \dots$$
$$\frac{C(t + \Delta t) - C(t)}{\Delta t} = \frac{dC}{dt}(t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

La notation  $\mathcal{O}$  indique que l'erreur est asymptotiquement dominée par un terme d'ordre  $\Delta t$ . Donc lorsque le pas de temps sera faible, l'erreur sera contrôlé par la valeur de  $\Delta t$ .

Donc diminuer  $\Delta t$  d'un facteur deux diminuera l'erreur d'un facteur deux.

L'exposant du terme dominant en  $\Delta t$  caractérise l'ordre de convergence du schéma

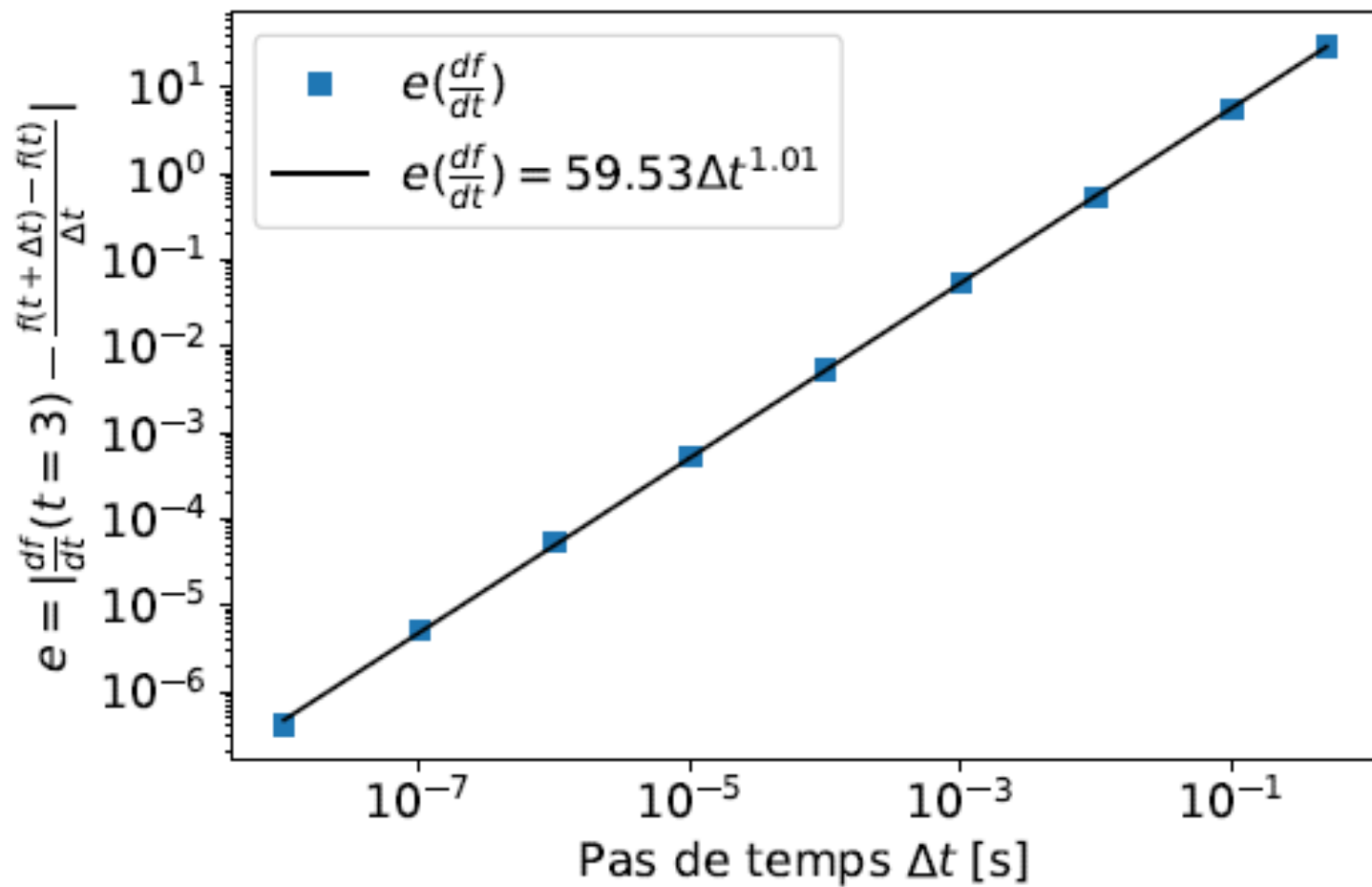
- Il existe des schémas ayant différents ordre  $n$  (ex : 1,2,3,4)
- Quand un schéma est d'ordre  $n$ , l'erreur  $e$  est :  $e \propto \Delta t^n$
- Cela revient à dire que

$$e(f) = C_n \Delta t^n + \mathcal{O}(\Delta t^{n+1}) \quad (41)$$

En négligeant les termes en  $\mathcal{O}(\Delta t^{n+1})$  on trouve que :

$$\begin{aligned} e(f) &= C_n \Delta t^n \\ \ln(e(f)) &= \ln(C_n) + n \ln(\Delta t) \end{aligned}$$

Donc, une régression linéaire en log-log nous donnera une pente qui correspond à l'ordre de convergence de notre schéma !



## Algorithme d'Euler explicite

- Base: on exprime la dérivée en temps par l'expression simple suivante :

$$\left. \frac{dn_A}{dt} \right|_t = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{n_A(t + \Delta t) - n_A(t)}{\Delta t} \approx \frac{n_A(t + \Delta t) - n_A(t)}{\Delta t}$$

- On peut alors obtenir l'équation de récurrence (Euler) suivante pour l'expression (2) :

$$n_A(t + \Delta t) = n_A(t) + \Delta t \left[ 10 - \frac{0,1n_A(t)^2}{50 + 10t} \right] \quad (3)$$

- Algorithme d'Euler explicite :

1.  $t=0, n_A(0) = 0$
2. On calcule  $n_A(t+\Delta t)$  avec (3)
3. On pose  $t = t + \Delta t$
4. Retour à l'étape 2. si besoin

- Forme générale

– Pour

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x) \\ x(0) &= x_0 \end{aligned}$$



$$x_{i+1} = x_i + \Delta t f(t_i, x_i)$$

## Algorithme d'Euler explicite (suite)

- On peut montrer que l'erreur  $E$  est donnée par :

$$E = |x(t_i) - x_i| \leq \frac{M \Delta t}{2L} [e^{L(t_i - t_0)} - 1]$$

avec

$$L = \max_{t \in [t_0, t_i]} \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \quad \text{et} \quad M = \max_{t \in [t_0, t_i]} \left| \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \right|$$

$t_i = i \times \Delta t$  et  $x_i$  est l'approximation de  $x(t_i)$

- Avantage :
  - Simplicité
- Inconvénient :
  - Précision d'ordre 1 en temps:  $E \sim O(\Delta t) \rightarrow$  peu précis!
    - Pour un  $x_i$  fixé, l'erreur diminue avec  $\Delta t$
    - Pour  $\Delta t$  donné, l'erreur peut augmenter exponentiellement lorsqu'on s'éloigne de  $t_0$ .
- Comment améliorer la précision ?
  - Runge-Kutta d'ordre 2
  - Runge-Kutta d'ordre 4
  - Méthodes faisant intervenir plusieurs pas

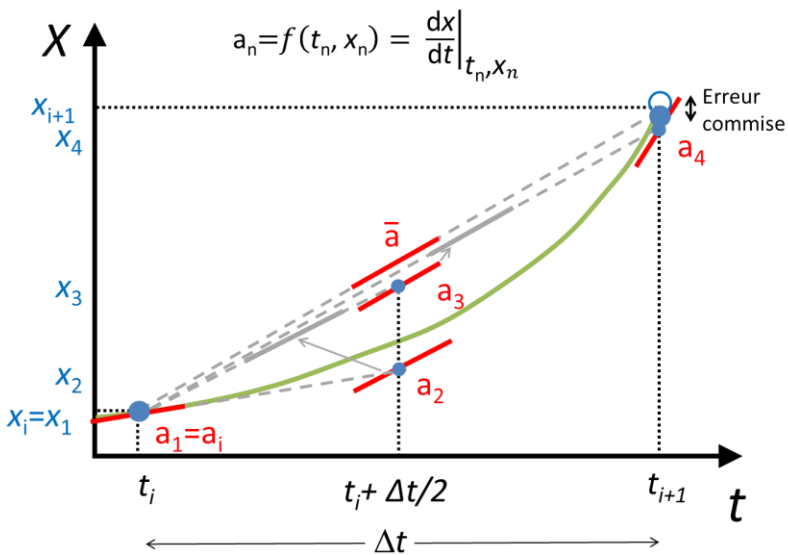
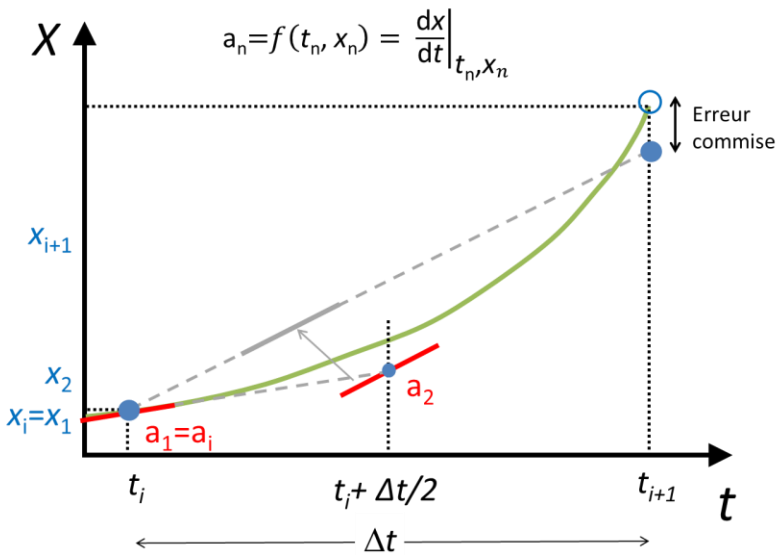
# Méthodes de Runge-Kutta

- Ordre 2

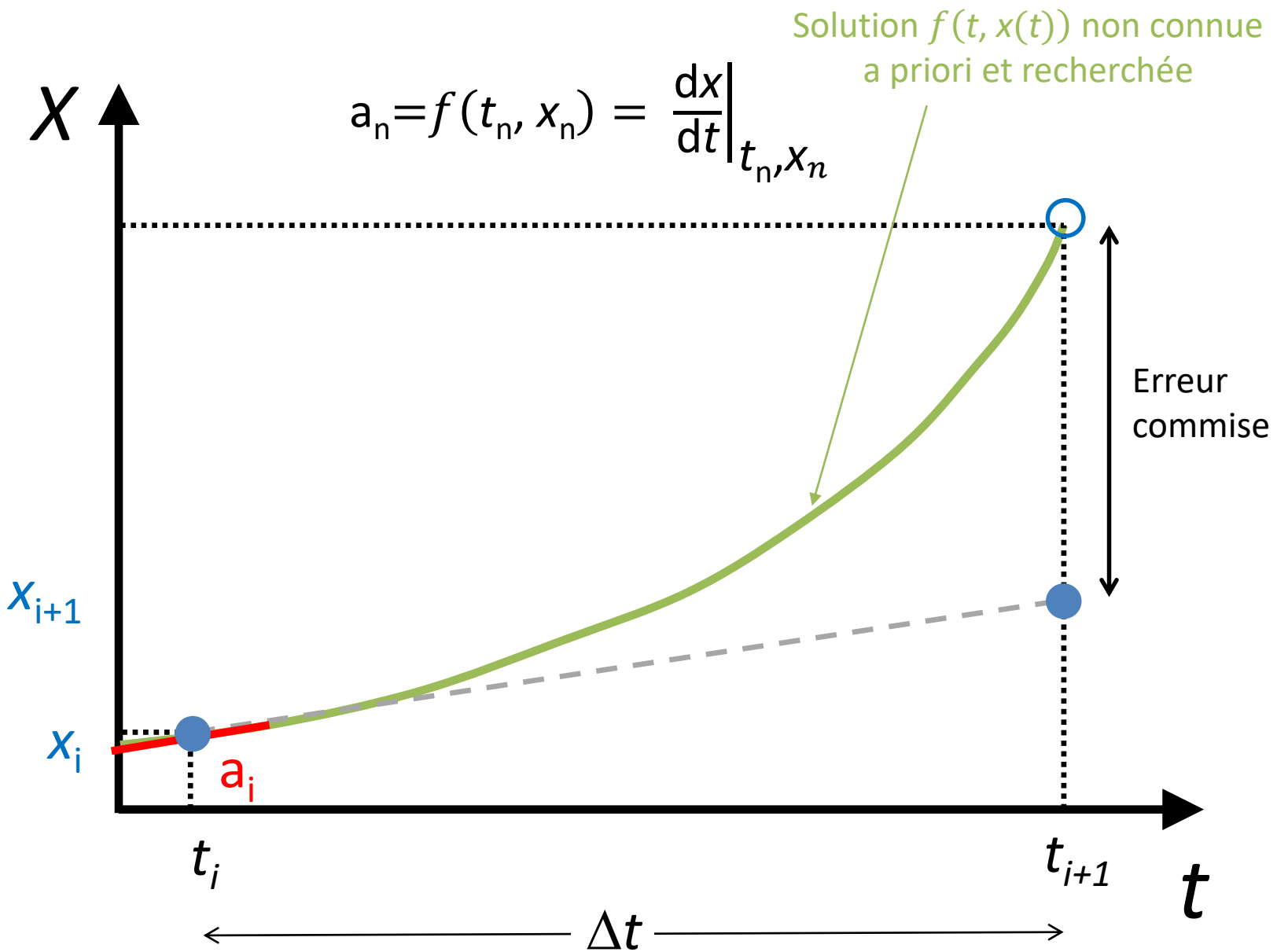
0.  $i = 0$  et  $t_0 = 0$  ;  $x_0$  est connu
1.  $k = \Delta t f(t_i, x_i)$
2.  $x_{i+1} = x_i + \Delta t f(t_i + \Delta t/2, x_i + k/2)$
3.  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$
4.  $i = i + 1$
5. on retourne à 1. au besoin

- Ordre 4

0.  $i = 0$  et  $t_0 = 0$  ;  $x_0$  est connu
1.  $k_1 = \Delta t f(t_i, x_i)$   
 $k_2 = \Delta t f(t_i + \Delta t/2, x_i + k_1/2)$   
 $k_3 = \Delta t f(t_i + \Delta t/2, x_i + k_2/2)$   
 $k_4 = \Delta t f(t_i + \Delta t, x_i + k_3)$
2.  $x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
3.  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$
4.  $i = i + 1$
5. on retourne à 1. au besoin

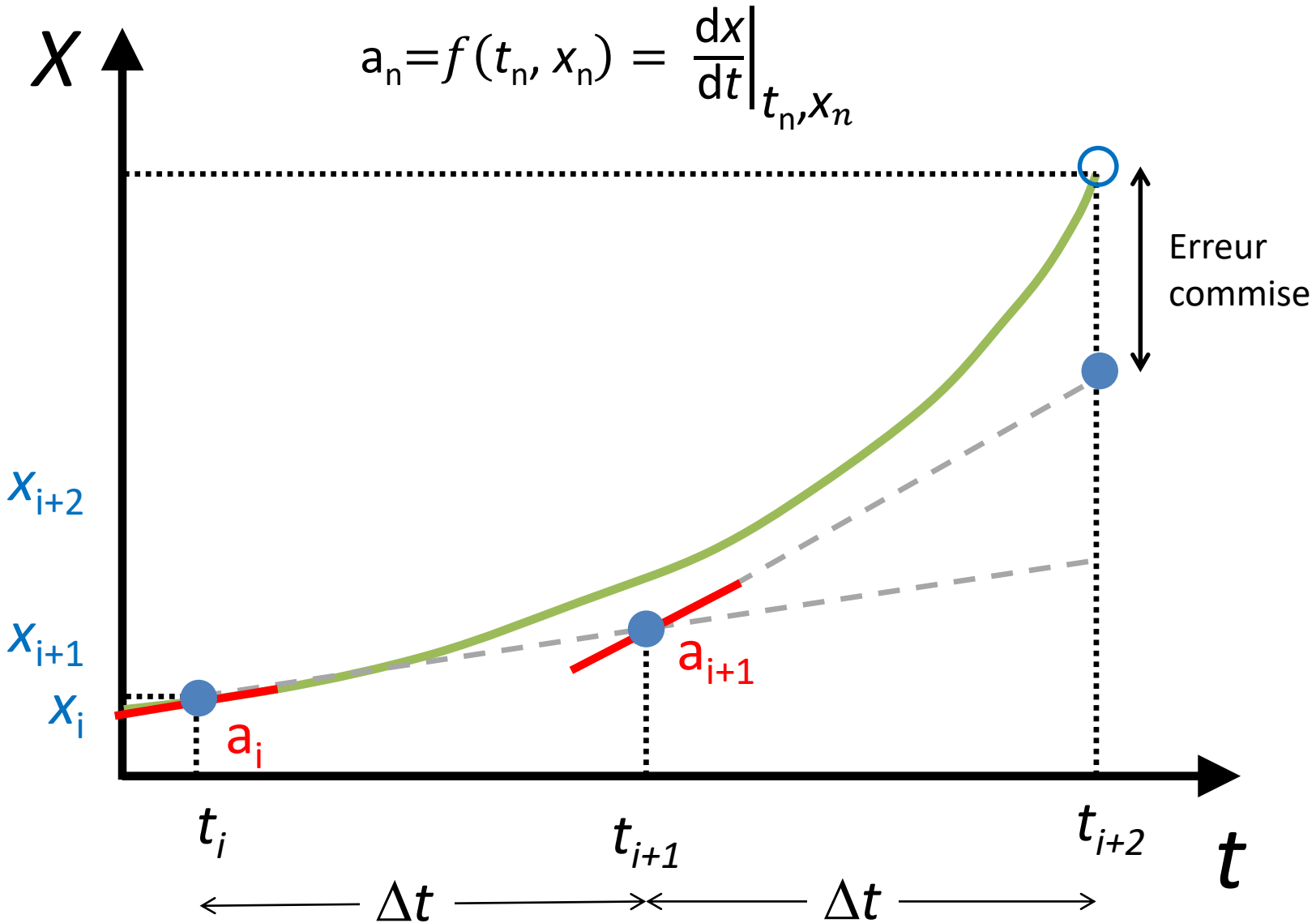


# Euler explicite

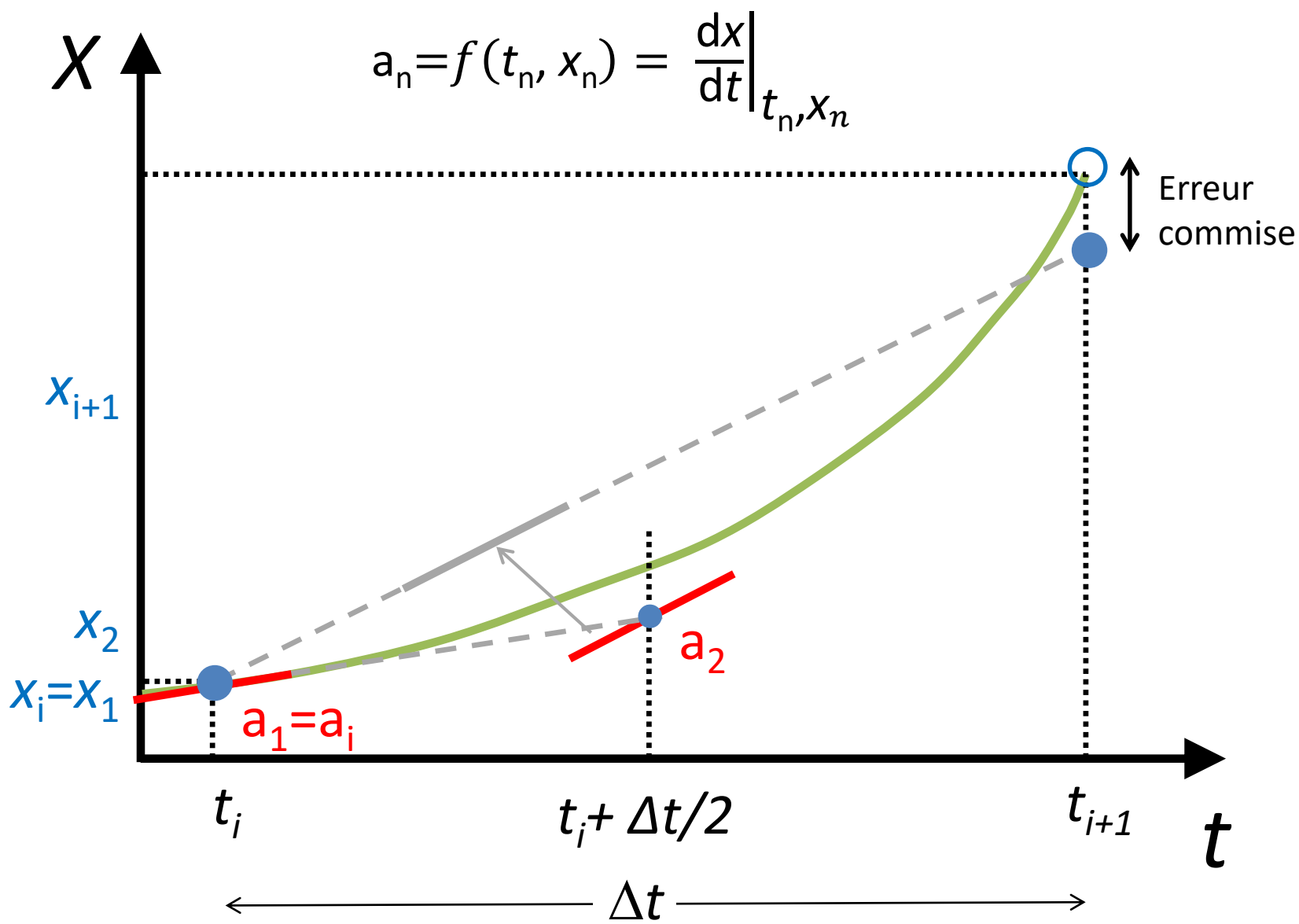




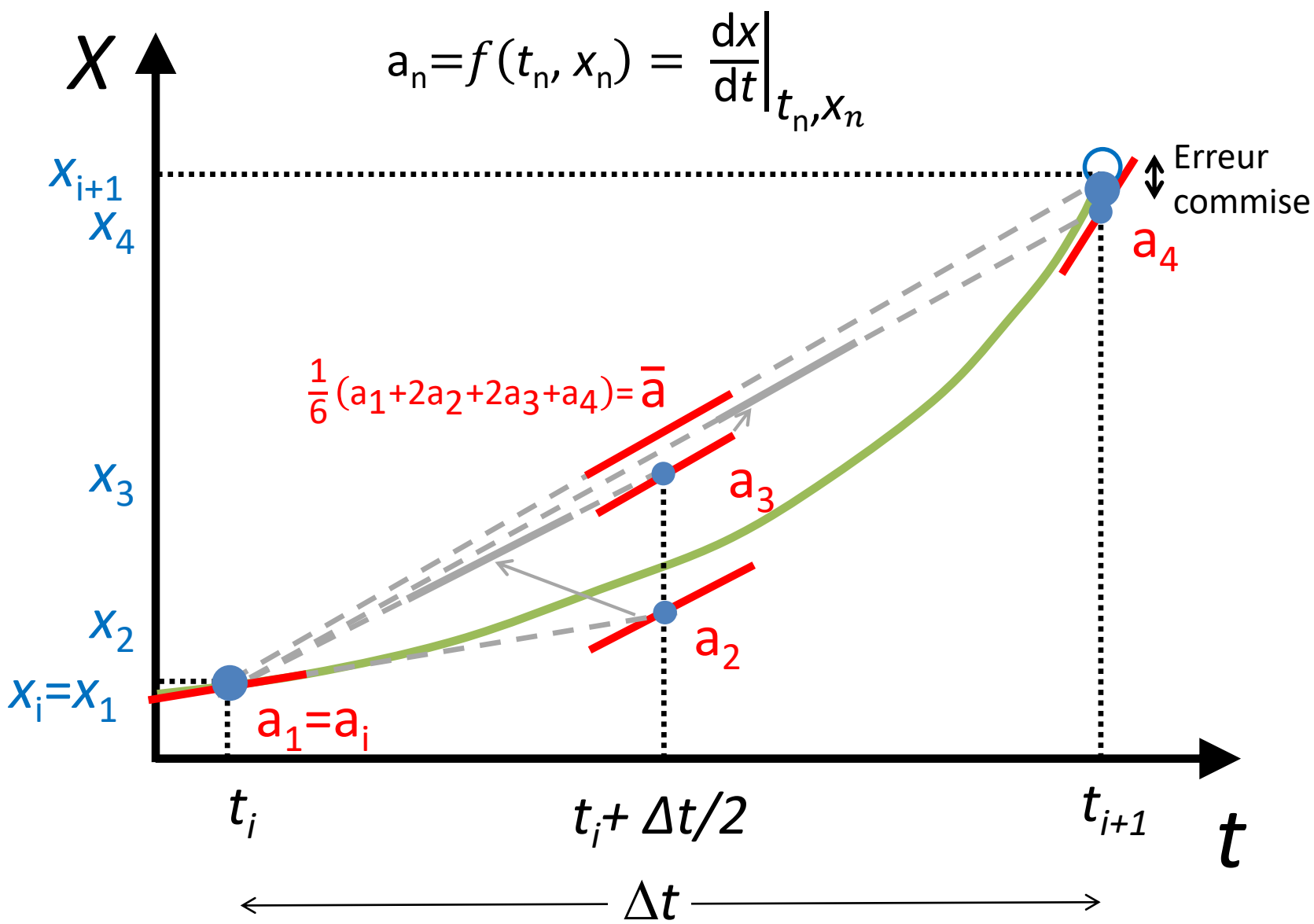
# Euler explicite – réduction du pas de temps



# Runge-Kutta d'ordre 2



# Runge-Kutta d'ordre 4



# Application des méthodes RK2 et 4 à l'exemple du réacteur semi-continu

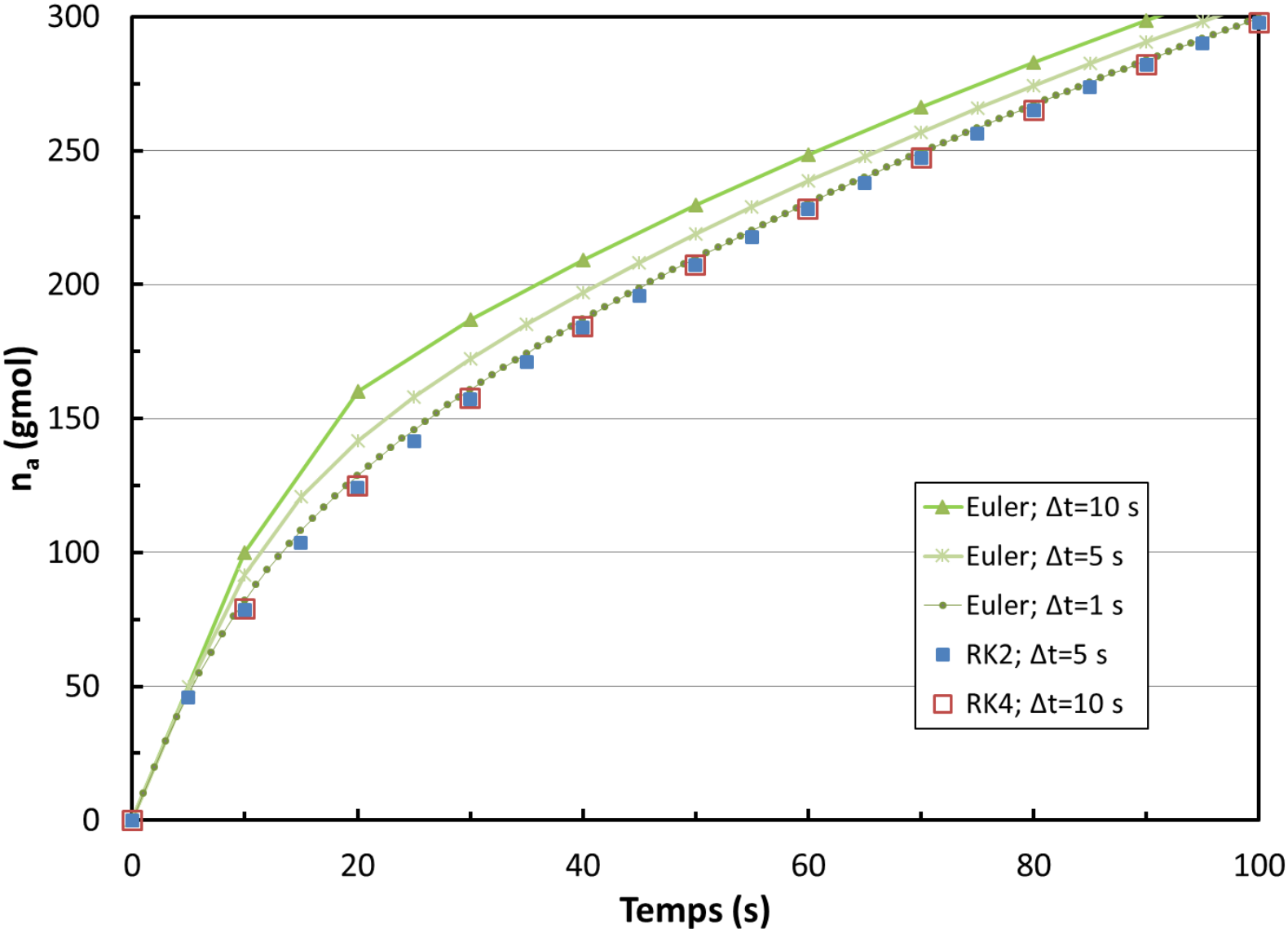
- RK2

0.  $i = 0$  et  $t_{i=0} = 0 ; n_{A(i=0)} = 0$
1.  $k = \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{kn_{A(i)}^2}{V_0 + Q_0 t_i} \right]$
2.  $x_{i+1} = x_i + \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{k(n_{A(i)} + k/2)^2}{V_0 + Q_0(t_i + \Delta t/2)} \right]$
3.  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$
4.  $i = i + 1$
5. on retourne à 1. au besoin

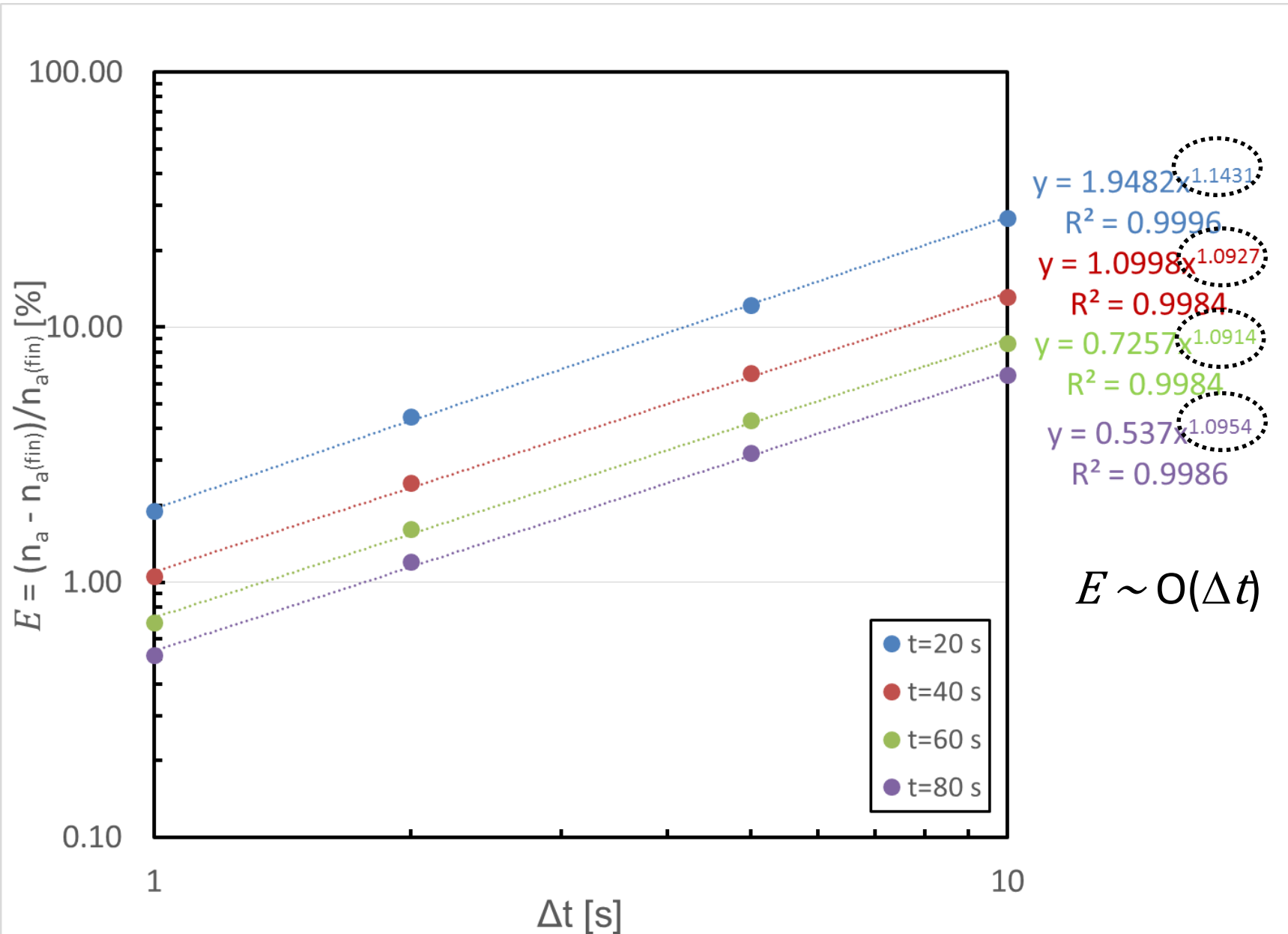
- Ordre 4

0.  $i = 0$  et  $t_0 = 0 ; n_{A_0} = 0$
1.  $k_1 = \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{kn_{A(i)}^2}{V_0 + Q_0 \Delta t} \right]$
2.  $k_2 = \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{k(n_{A(i)} + k_1/2)^2}{V_0 + Q_0(t_i + \Delta t/2)} \right]$
3.  $k_3 = \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{k(n_{A(i)} + k_2/2)^2}{V_0 + Q_0(t_i + \Delta t/2)} \right]$
4.  $k_4 = \Delta t \left[ Q_0 C_{A_0} - \frac{k(n_{A(i)} + k_3)^2}{V_0 + Q_0(t_i + \Delta t)} \right]$
2.  $x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$
3.  $t_{i+1} = t_i + \Delta t$
4.  $i = i + 1$
5. on retourne à 1. au besoin

# Comparaison de la prédiction



# Ordre de précision du schéma d'Euler explicite



## Algorithme d'Euler implicite

- Base: on exprime la dérivée en temps par l'expression simple suivante :

$$\left. \frac{dn_A}{dt} \right|_t = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{n_A(t) - n_A(t - \Delta t)}{\Delta t} \approx \frac{n_A(t) - n_A(t - \Delta t)}{\Delta t}$$

- On peut alors obtenir l'équation de non linéaire suivante pour l'expression :

$$n_A(t + \Delta t) = n_A(t) + \Delta t \left[ 10 - \frac{0,1n_A(t + \Delta t)^2}{50 + 10(t + \Delta t)} \right]$$

à t fixé et connu →  
On connaît a,b,c

$$x = a + b \left[ 10 - \frac{0,1x^2}{50 + 10c} \right]$$

$$x - a - b \left[ 10 - \frac{0,1x^2}{50 + 10c} \right] = 0$$

$$F(x) = 0$$

On doit donc potentiellement résoudre une équation non-linéaire à chaque pas de temps

# Exemple de méthode pour résoudre une équation non linéaire

## Méthode de Newton

$$x = x^{(0)}$$

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{F(x^{(i)})}{F'(x^{(i)})}$$

$$\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| \leq \varepsilon$$

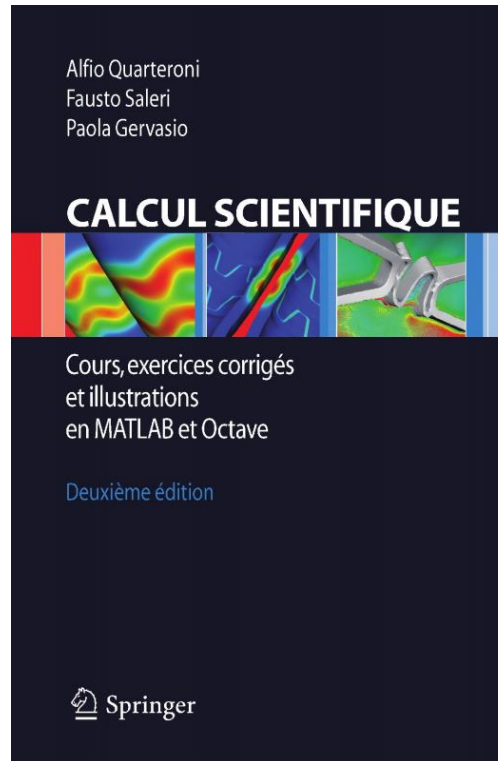
$$x^{(i)} = x^{(i+1)}$$

Faiblesse de la méthode d'Euler implicite : on doit résoudre une équation non-linéaire à chaque pas de temps si  $F$  est non-linéaire

Avantage de la méthode d'Euler implicite : Plus grande stabilité  $\rightarrow$  pas de restriction sur  $\Delta t$



# Autres méthodes de résolutions des équations non-linéaires dans :



## Chapitre 2

## Autres schémas numériques :

- Euler explicite:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t f(t_i, x_i) = x_i + \Delta t F_i$$

- Euler implicite:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t F_{i+1}$$

Solution obtenue par la  
résolution d'un  
problème inverse

- Schémas avec discrétisation du terme source:

- Adams-Bashforth (explicite):

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta t}{2} (3 F_i - F_{i-1}) \quad (\text{ordre 2})$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta t}{24} (55 F_i - 59 F_{i-1} + 37 F_{i-2} - 9 F_{i-3}) \quad (\text{ordre 4})$$

# Autres schémas numériques (suite):

- **Schémas avec discrétisation du terme source (suite):**

- Adams-Moulton (implicite):

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2} \Delta t (F_i + F_{i+1}) \quad (\text{ordre 2 – Crank-Nicolson})$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta t}{24} (9 F_{i+1} + 19 F_i - 5 F_{i-1} + F_{i-2}) \quad (\text{ordre 4})$$

- **Schémas prédicteur-correcteur :**

1. Prédiction:

$$\tilde{x}_{i+1} = x_i + \Delta t f(t_i, x_i)$$

Schémas plus précis car ils utilisent un schéma explicite pour obtenir une approximation de  $F_{i+1}$  dans le schéma implicite

2. Correction:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2} \Delta t (f(t_i, x_i) + f(t_{i+1}, \tilde{x}_{i+1})) \quad (\text{Crank-Nicolson})$$

ou

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t f(t_{i+1}, \tilde{x}_{i+1}) \quad (\text{Euler implicite})$$

# Autre exemple : Les matériaux granulaires dans l'industrie



Pharmaceutical Industry



Food Industry



Catalyser – Chemical reactors



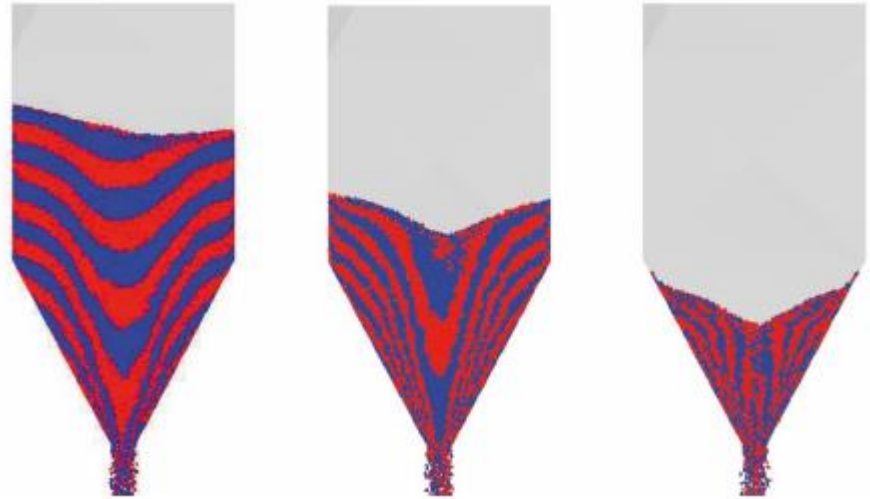
Mineral powders

# Autre exemple: Discrete Element Method (DEM)

Mélange solide-liquide



Vidange de silots



# Principe de la DEM (pour votre information)

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_{total,i} = \mathbf{F}_{hydrodynamic,i} + \mathbf{F}_{body,i} + \mathbf{F}_{long-range,i} + \mathbf{F}_{contact,i}$$

Acceleration

Core of the DEM

Euler explicite

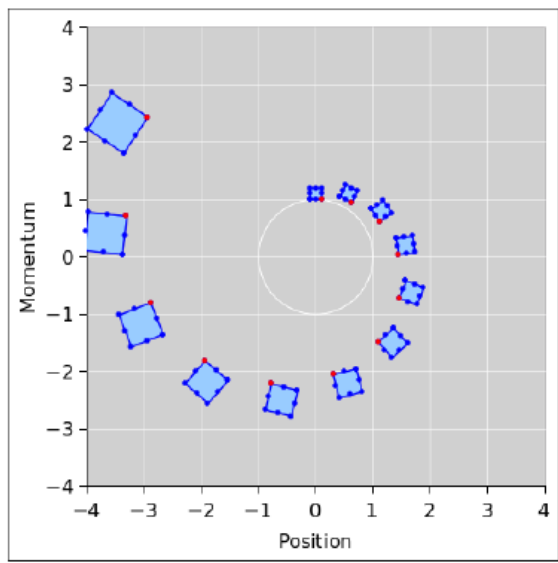
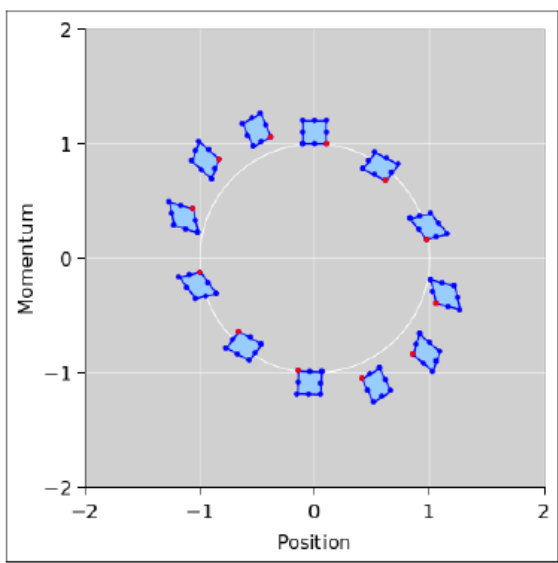
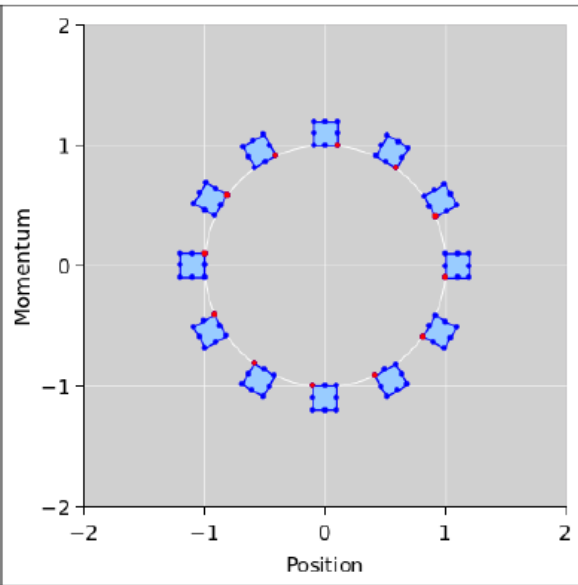
$$m_i \frac{\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^t}{\Delta t} = \mathbf{F}_{total,i}$$
$$\frac{\mathbf{x}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{x}_i^t}{\Delta t} = \mathbf{v}_i^t$$

Problème : Euler explicite n'est pas sympléctique

# Principe de la DEM (toujours pour votre information)

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_{total,i} = \mathbf{F}_{hydrodynamic,i} + \mathbf{F}_{body,i} + \mathbf{F}_{long-range,i} + \mathbf{F}_{contact,i}$$

Acceleration
Core of the DEM



# Principe de la DEM (encore pour votre information)

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_{total,i} = \mathbf{F}_{hydrodynamic,i} + \mathbf{F}_{body,i} + \mathbf{F}_{long-range,i} + \mathbf{F}_{contact,i}$$

Acceleration

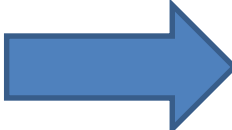
Core of the DEM

Euler explicite

Verlet

$$m_i \frac{\mathbf{v}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{v}_i^t}{\Delta t} = \mathbf{F}_{total,i}$$

$$\frac{\mathbf{x}_i^{t+\Delta t} - \mathbf{x}_i^t}{\Delta t} = \mathbf{v}_i^t$$



$$\mathbf{v}_i^{t+\frac{\Delta t}{2}} = \mathbf{v}_i^{t-\frac{\Delta t}{2}} + \Delta t \frac{\mathbf{F}_{total,i}}{m_i}$$

$$\mathbf{x}_i^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_i^t + \Delta \mathbf{v}_i^{t+\frac{\Delta t}{2}}$$



## Schéma explicite vs. Implicite (à retenir !!!)

- Un schéma est dit **explicite** lorsque le **champ** d'intérêt (p.ex. la température), peut être **calculé au temps  $t + \Delta t$  à partir** de la valeur du champ **exprimée au temps  $t$** .
- Un schéma est dit **implicite** lorsque ce même **champ** d'intérêt est **calculé au temps  $t + \Delta t$** , au moins en partie, **à partir de la valeur** du champ mais ici **exprimée** non plus à  $t$  mais **à  $t + \Delta t$** . Ce type de schéma requiert **potentiellement la résolution d'une équation non-linéaire**.

Type de schéma	Avantages	Inconvénients
Explicite	<ul style="list-style-type: none"><li>■ Facile à programmer (marche en temps)</li><li>■ Précis (selon l'ordre)</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>■ <b>Stable sous condition</b></li></ul>
Implicite	<ul style="list-style-type: none"><li>■ Inconditionnellement stable</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>■ <b>Système potentiellement non-linéaire à résoudre</b></li><li>■ Souvent moins précis</li></ul>

# Notion de stabilité

- **Stabilité d'un modèle physique**

Un problème est dit chaotique si une petite variation des données initiales entraîne une variation totalement imprévisible des résultats. Cette notion de chaos, liée à la physique d'un problème, est indépendante du modèle mathématique utilisé et encore plus de la méthode numérique utilisée pour résoudre ce problème mathématique. De nombreux problèmes sont chaotiques, par exemple la turbulence des fluides.

- **Stabilité d'un modèle mathématique**

Un problème est dit très sensible ou mal conditionné si une petite variation des données ou des paramètres entraîne une grande variation des résultats. Cette notion de conditionnement, liée au problème mathématique, est indépendante de la méthode numérique utilisée pour le résoudre. Pour modéliser un problème physique qui n'est pas chaotique, on construira un modèle mathématique qui sera le mieux conditionné possible.

- **Stabilité d'une méthode numérique**

Une méthode est dite instable si elle est sujette à une propagation importante des erreurs numériques de discrétisation et d'arrondi. Un problème peut être bien conditionné alors que la méthode numérique choisie pour le résoudre est instable. Dans ce cas, il est impératif de changer de méthode numérique. Par contre, si le problème de départ est mal conditionné, aucune méthode numérique ne pourra y remédier. Il faudra alors essayer de trouver une formulation mathématique différente du même problème, si on sait que le problème physique sous-jacent est stable.

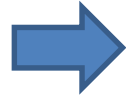
# Instabilité du schéma Euler explicite et choix du $\Delta t$

Ecriture générale d'un schéma récurrent :

$$X_{i+1} = G X_i + \dots$$

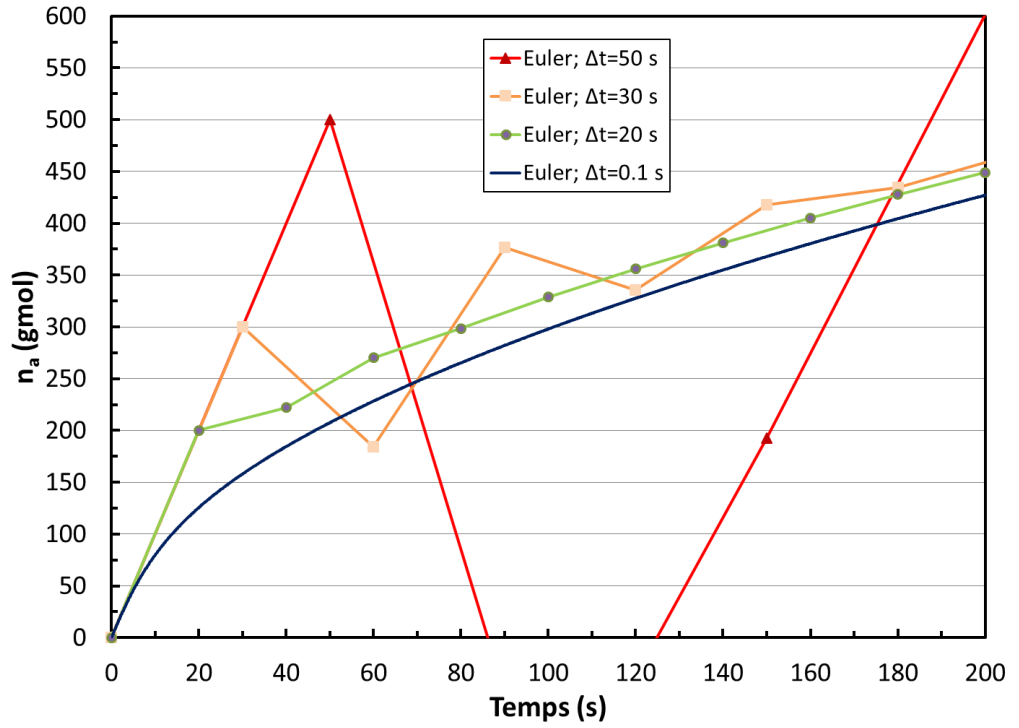
↑  
Coefficient d'amplification

- Stable sans oscillation si :  $0 < G \leq 1$
- Stable avec oscillation si :  $-1 \leq G \leq 0$
- Instable si :  $G < -1$

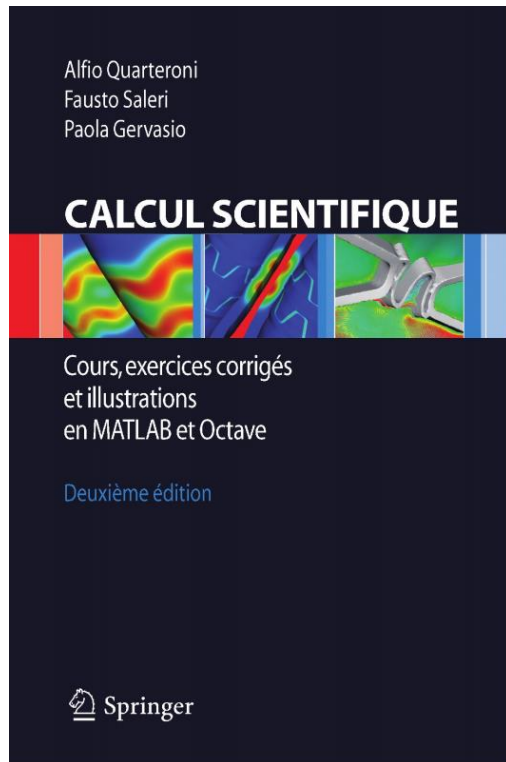


En déduire un  $\Delta t$  maximal afin d'assurer la stabilité numérique du schéma

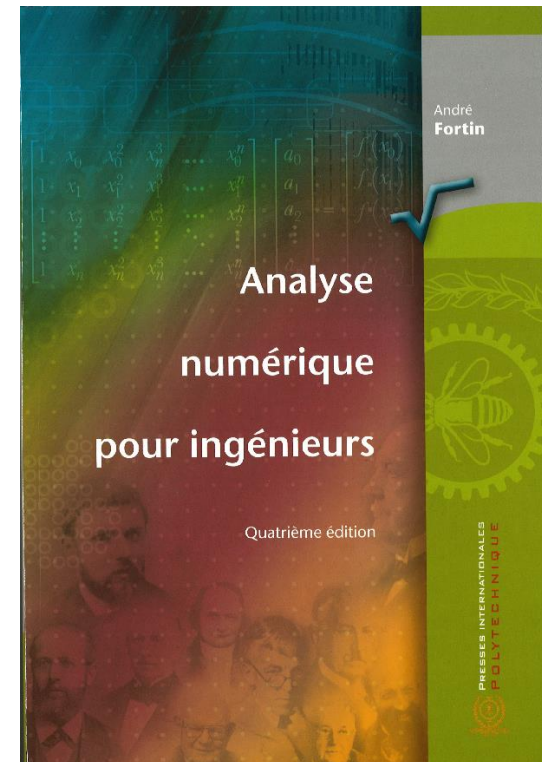
Euler explicite:



# Lectures complémentaires



Chapitre 7



Chapitre 7