Rappels Méthodes Numériques Appliquées

Exercice 1: Le degré de dissociation, X, du sulfite d'hydrogène à l'état gazeux peut être décrit par l'équation suivante:

$$(1-P Z^2) X^3 - 3X + 2 = 0$$

Où Z : constante d'équilibre, P : pression totale en atmosphère.
On veut déterminer le degré de dissociation pour une pression de 1 atm sous une température de 2000 Kelvin (Z est alors égal à 0.608). En sachant que le coefficient de dissociation est compris entre zéro et un ($0 \leq X \leq 1$). Utiliser la méthode de Newton pour la résolution de ce problème. Les calculs se feront pour quatre itérations. Donner la précision à la fin des itérations.

Exercice 2 : On étudie la disparition d'un corps A réagissant sur une surface catalytique suivant une polymérisation en phase gazeuse : $n A \longrightarrow A_n$

La réaction ayant lieu à la surface du catalyseur a pour cinétique une vitesse de réaction de type $r_A = k\, y_A$. Le flux de transfert de A est donné par la relation :

$$N_A = \frac{C_T . D_A}{\alpha . \delta} \, \mathrm{Ln}\left[\frac{1 - \alpha . N_A / k}{1 - \alpha . y_{Ao}}\right]$$

Données : à150°C sur de la ponce sulfurique, on a

$\delta = 10^{-4}$ m , $D_A = 10^{-5}$ m²/s, $C_T = 28.82$, $\alpha = 1 - 1/n = 2/3$, $y_{Ao} = 0.8$

On veut étudier l'évolution de N_A en fonction de k. Résolvez ce problème à l'aide de la méthode dichotomique, Calculer N_A pour différentes valeurs de k (10, 20, 30, 50,100,1000).

Exercice 3 : L'équation d'état pour l'éthane sous forme gazeuse et donnée par :

$$Z = \frac{Z}{Z - 0.0676} - \frac{0.3907}{Z + 0.0076}$$

Pour un gaz réel, et une mole de gaz : PV = ZRT. Déterminer le volume qu'occuperait une mole de gaz sous 298 Kelvin et P = 41.3 atm (R = 82.06 atm. Cm³/K). En sachant que Z et compris entre 0.01 et 0.1 utiliser la méthode dichotomique pour le calcul de Z, le résultat sera donné après quatre itérations. Donner la valeur de l'erreur commise.

Exercice 4: Pour un gaz réel, l'équation d'état est décrite par l'équation de Van Der Walls suivante :

$$(P + \frac{A}{V^2})\,(V - B) = RT$$

R = 0.082 litre.atm/°K.mole. Pour le Toluéne sous une pression de 1 atm :
A= 24.06 litre².atm/mole² ; B = 0.1463 litre /mole.
Trouver le volume molaire du toluène pour une température égale à 383°K à l 'aide de la méthode de Newton.

Exercice 5: Soit la réaction du premier ordre : $A \xrightarrow{k} B$ en phase liquide sous 1 bar. Un réacteur agité est chargé avec V m3 d'une solution de réactif A avec une concentration ao kgmoles/m3 et on opére isothermiquement avec une température T pendant t heures. Le produit B est enlevé, le réacteur lavé pour être à nouveau utilisé. Si on décide d'opérer cycliquement et si tc est la période du cycle, le temps tm requis pour maximiser le rendement global en B par heure de fonctionnement est donné par :

$$tm = \frac{\mathrm{Ln}(tm * K + tc * K + 1)}{K}$$

Solutionner cette équation pour tc = 0.5 heures et k = 2.5 hr^{-1} par la méthode du point fixe en faisant cinq calculs successifs. Donner la précision sur tm. (Quel que soit le choix de la méthode , il faut vérifier que l'on peut l'appliquer).

GENIE DES PROCEDES fan page

Rappels méthodes numériques appliquées

Exercice 1:

Le programme

```
Program Newton exo 1
Real eps, ecart, x0, x
Print*, 'eps=',' kmax=',' x0='
Read*, eps, kmax, x0
k=0
ecart = 1+eps
5 k=k+1
x = x0 - f(x0)/fd(x0)
ecart = x-x0
x0 = x
If(.NOT. Abs(ecart).LE.eps.or.k.GE.kmax) go to 5
Print*, 'x0=',x,' k=',k,' ecart=',ecart
End
Real function f(x)
Data P,Z / 1, 0.6081/
F= (1-P*Z**2)*x**3-3*x+2
Return
End
Real function fd(x)
Data P,Z /1, 0.6081/
Fd= 3*(1-P*Z**2)*x**2-3
Return
End
```

L'exécution

$x_0 =$ 0.1 eps = 1e-5 kmax = 4

x=0.75827 k=4 ecart=1.6679e-05

GENIE DES PROCEDES fan page

Exercice 2 :

Le programme

L'exécution

```
Program dicho Exo2
Real a, b, x, eps, y, y1, NA
Integer k, I
Print*, 'a=', ' b=', 'k=', ' eps='
Read*, a, b, k, eps
ecart = eps+1
I=0
Do while (ecart.GT.eps)
   I = I+1
   x = (a+b)/2
   y = f(a)
   y1 = f(x)
   If (y*y1.LT.0) then
      b = x
   Else
      a = x
   Endif
   ecart = abs(b-a)
End do
Print*, 'NA=', x, ' ecart=', ecart, ' I=', I
End
Real function f(x)
Data alpha, delta, CT, DA, YA0 /0.66, 1e-04, 28.82, 1e-05, 0.8/
F= Alog(1-x*Alpha/k)-x*Alpha*delta/(k CT*DA)-Alog(1-Alpha*YA0)
Return
End
```

![GENIE DES PROCEDES fan page]

Exercice 3 : $f(z) = z^3 - \underbrace{1.06}_{a_2} z^2 + \underbrace{0.3326}_{a_1} z - \underbrace{0.0264}_{a_0}$

L'Algorithme

Debut

Réel z, eps, ecart, a, b, P, T, R, y, y_1, V

Entier k, kmax

Lire a, b, kmax

$P \leftarrow 41.3$

$R \leftarrow 32.06$

$T \leftarrow 298$

Pour k varie de 1 à kmax faire

  $z \leftarrow \frac{a+b}{2}$

  $y \leftarrow f(a)$

  $y_1 \leftarrow f(z)$

  Si $(y \cdot y_1 < 0)$ alors

    $b \leftarrow z$

  Sinon

    $a \leftarrow z$

  Fin si

Fin pour

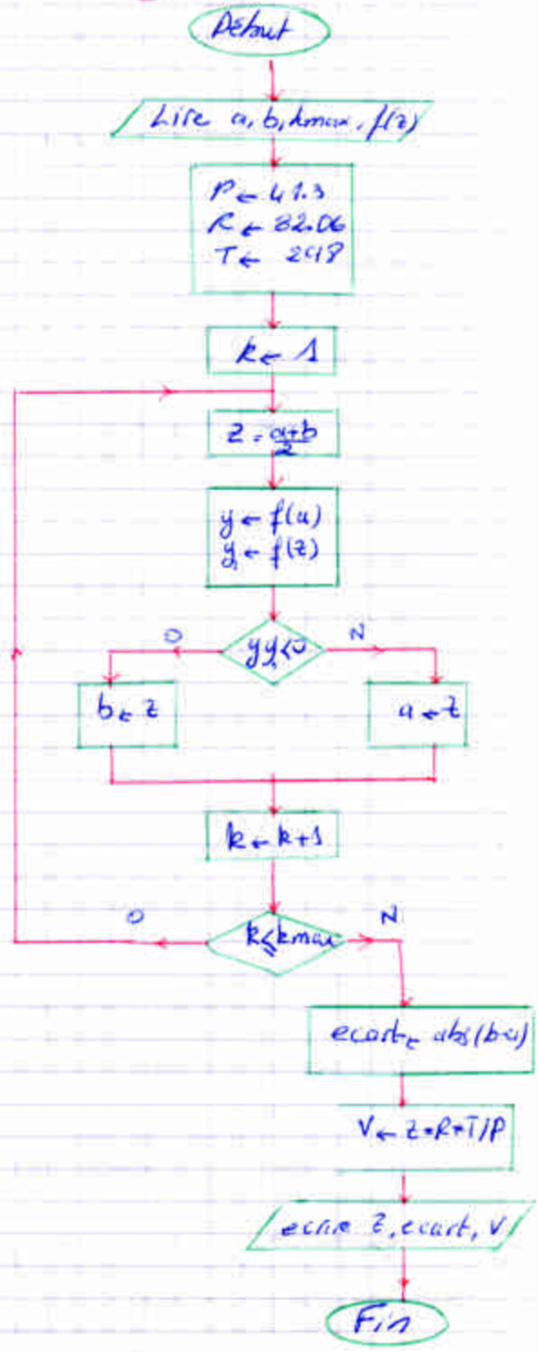
$ecart \leftarrow abs(b-a)$

$V \leftarrow z * R * T / P$

ecrire 'z=', z, 'ecart=', ecart, 'V=', V

Fin

L'Organigramme



GENIE DES PROCEDES fan page

Le programme

```
Program dicho Exo3
Real z, a, b, P, T, R, y, y1, V, ecart
Integer k, kmax
Print*, 'a=', ' b=', ' kmax='
Read*, a, b, kmax
P = 41.3
R = 82.06
T = 298
Do k = 1, kmax
    z = (a+b)/2
    y = f(a)
    y1 = f(z)
    If (y*y1 .LT. 0) then
        b = z
    Else
        a = z
    Endif
Enddo
    ecart = abs(b-a)
    V = z*R*T/P
    Print* 'z=', z, 'ecart =', ecart, ' V = ', V, 'cm3/mole'
    End
```

Sous programme de type fonction

```
    Real function f(z)
    Real a2, a1, a0
    Data a2, a1, a0 / -1.06, 0.3326, 0.0264/
    f = z**3 + a2*z**2 - a1*z + a0
    Return
    End
```

L'exécution

```
a =        b =        kmax =
0.01       0.1        4

z = 9.4375e-2       ecart = 5.625e-03
V = 55.87978 cm3/mole
f(z) = 1.1074e -03
```

GENIE DES PROCEDES
fan page

Exercice 4

Le programme

$V^* - ecart \leq V_{vrai} \leq V^* + ecart$

On peut travailler avec une seule variable sans d'intervenir le V_0

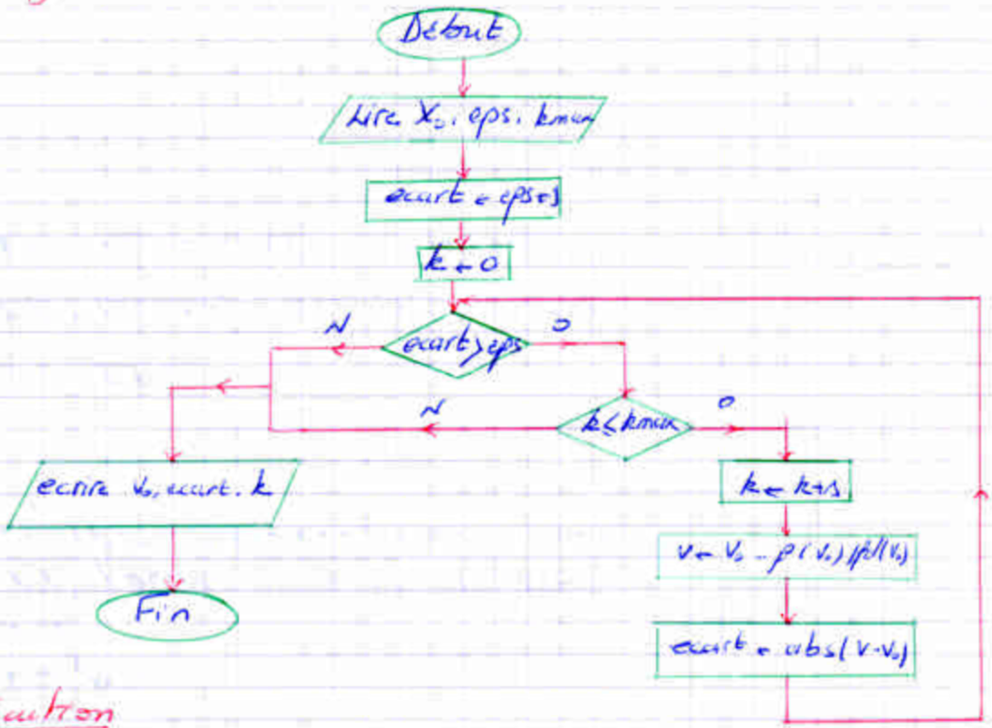
```
Program Newton Exo 4
              en plus
Real eps, ecart, V0, V1, V2, V
Print*, 'eps=', ' kmax=', ' V0='
Read*, eps, kmax, V0
k=0
ecart = eps+1
Do while (abs(ecart).GT. eps .And. k.LT.kmax)
   k=k+1
   ecart = f(V)/fd(V)
   V= V- ecart
Enddo
Print*, 'V0=', V, ' k=', k, ' ecart=', ecart
End
Real function f(V)
Real a, b, P, R,T
Data a,b,P,R,T/ 24.06, 0.1463, 1, 0.082, 273/
f= P*V**3 -(R*T+P*b)*V**2 + a*V - a*b
Return
End
Real function fd(V)
Data a,b,P,R,T /24.06, 0.1463, 1, 0.082, 273/
fd= 3*P*V**2 -2*(R*T+P*b)*V+a
Return
End
```

Si on travaille avec V_0

```
V= V0 - f(V0) / fd(V0)
ecart = V-V0
V0 = V
End do
```

GENIE DES PROCEDES
fan page

L'Organigramme



L'exécution

eps = 1e-3   kmax = 100 v_0 = 25

V = 21.4165   k = 4   ecart = 3.0658e-04

GENIE DES PROCEDES fan page

Exercice 5 $g'(tm) = \frac{K^2}{tm*K+tc*K+1}$ $g'(tm) < 1$

Le programme

```
Program P.F exo5
Real eps, ecart, tmo, tm
Integer I, Imax
Print*,'eps=',' tmo=',' Imax='
Read*, eps, tmo, Imax
ecart = eps+1
I=0
Do while (ecart.GT.eps .And. I.LT.Imax)
   I=I+1
   tm = g(tmo)
   ecart= abs(tm-tmo)
   tmo = tm
End do
Print*, 'tm=', tm, ' I=', I, 'ecart=', ecart
End
Real function g(tm)
Real K, tc, tm
Data K, tc / 2.5, 0.5/
   g = Alog(tm*K+tc*K+1)/K
Return
End
```

L'exécution

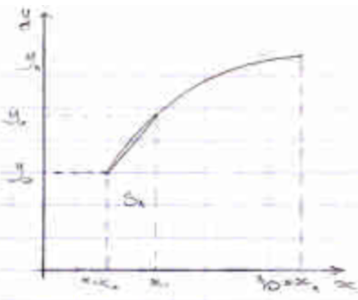
```
eps=          tmo:        Imax=
1e-05         1.5          5
tm= 5.02e-01   I=5       ecart= 3.243e-03
```

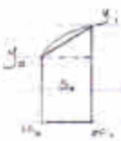
GENIE DES PROCEDES fan page

Méthode numérique d'intégration

Méthode de trapèze

Soit : $I = \int_0^{0,8} \sqrt{\frac{1+x}{1-x}}\, dx$





$S_1 = S_{11} + S_{12} = S_{rect} + S_{triangle}$

$S_1 = y_0 (x_1 - x_0) + (x_1 - x_0)(y_1 - y_0)\,1/2$

$$S = \int_a^b y\,dx = h\left(\frac{y_0+y_1}{2}\right) + h\left(\frac{y_1+y_2}{2}\right) + \cdots + h\left(\frac{y_{n-1}+y_n}{2}\right)$$

car : $S_1 = (x_1 - x_0)\left(\frac{y_0+y_1}{2}\right) = h\left(\frac{y_0+y_1}{2}\right)$ donc : $\boxed{S = h\left(\frac{y_0+y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i\right)}$

avec $h = \frac{b-a}{n}$

n : nbre de division ou nbre de sous-Intervalles égaux.

$h = [x_1 - x_0] = \dots [x_n - x_{n-1}]$: longueur des segments $[x_{i+1}, x_i]$ = pas.

exp : Calcul de I.

$I = \int_0^{0,8} \left(\frac{1+x}{1-x}\right)^{1/2} dx$ $\quad a = 0$; $b = 0,8$; $n = 8$

d'où : $h = \frac{b-a}{n} = \frac{0,8-0}{8} = 0,1$

$S = 0,1\left(\frac{1+3}{2} + 1,105 + \dots + 2,38\right) = 1,333$

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
y_i	1	1,105	1,224	1,363	1,527	1,732	2	2,381	3

Algorithme

```
Debut
Réel a, b, h, S
Lire a, b, n, f(x)
h ← (b-a)/n
S ← (f(a) + f(b))/2
Pour i allant de 1 à (n-1) faire
    S ← S + f(a + i*h)
Fin pour
S ← S*h
Afficher 'S=', S
Fin
```

Programme

```
Program
Real a, b, h, s
Print*, 'a=', ' b=', ' n='
Read*, a, b, n
h = (b-a)/n
S = (f(a) + f(b))/2
Do i = 1, n-1
    S = S + f(a + i*h)
end do
S = S*h
Print*, 'S=', S
end
```

Exécution

$a =$	$b =$	$n =$
0	0,8	8

$S = 1{,}333311$

Real function f(x)

Real ≥

F = SQRT ((1+x) / (1-x))

ou F = ((1+x)/(1-x))**(1/2)

Return

End

La modélisation c'est l'élaboration d'un modèle dont les comportements sont l'analogues à ce du système étudié.

Ce modèle doit reproduire ou simuler les relations entre les grandeurs d'entrées et de sorties et celles de système.

On a 3 types de modèle sont peuvent utilisés :

- Le modèle mathématique (expérimental) - numérique - analytique.

exp : On peut simuler chacun des phénomènes suivants :

* $\tau = \mu \frac{dV}{dx}$ Loi de Newton, transport de qtt de M^{vt}
* $q_c = -\lambda \frac{dT}{dx}$ Loi de Fourier, transport de qtt de chaleur
* $q_m = -D \frac{dc}{dx}$ Loi de Fick, transport de qtt de matière

Au moyen de transport d'électricité $i = -\frac{1}{\rho} \frac{dV}{dx}$ Loi d'Ohm

ce qui veut dire un modèle analogique.

GENIE DES PROCEDES fan page