

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement et de la Recherche Scientifique

15/87

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT

GENIE CHIMIQUE

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

ETABLISSEMENT D'UN LOGICIEL
POUR LE GENIE CHIMIQUE

Proposé par :

Monsieur: BOURKIZA

Etudié par:

N. DJAMAA

Dirigé par:

Monsieur: BOURKIZA

PROMOTION:

JUIN 87

E. N. P. 10 . Avenue Hacén Badi - EL HARRACH - ALGER

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
—oOo—

وزارة التعليم و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement et de la Recherche Scientifique
—oOo—

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

DEPARTEMENT : GENIE - CHIMIQUE .

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة —
Ecole Nationale Polytechnique

PROJET DE FIN D'ETUDES

SUJET

ETABLISSEMENT D'UN LOGICIEL

Proposé par :
Monsieur: BOURKIZA

Etudié par:
N. DJAMAA

Dirigé par :
Monsieur: BOURKIZA

PROMOTION:

JUIN 87

E. N. P. 10 . Avenue Hacen Badi - EL HARRACH - ALGER

- R E M E R C I E M E N T S -

* * * * *

Je remercie Mr. BENIDDIR d'avoir propose ce travail et
Mr. BOURKIZA de l'avoir suivi.

Je remercie egalement:

- Melle. YAICI
- Mme .MEZIANI
- Mr .DOUCHANOV

d'avoir accepte de juger ce travail.

Durant les quinze dernieres annees, il y'a eu une orientation graduelle vers une approche plus quantitative aux problemes dans la conception et l'optimisation de procedes. Cette orientation a ete rendu possible par l'utilisation courante des ordinateurs electroniques performants dans la solution des systemes complexes d'equations mathematiques.

Cette approche analytique au problemes d'engineering permet d'entamer aussi bien un plus grand champs dans les recherches de conceptions et de procedes que dans les operations commerciales continues et discontinues.

Aujourd'hui, les ordinateurs puissants sont devenus presque universellement disponibles dans les ecoles et les societes d'industries. Au futur, on pourra avoir une plus grande expansion et on pourra meme envisager l'ordinateur comme un appareil domestique courant, vue l'accroissement des performances des ordinateurs, la diminution de leurs tailles et la chute parallele des prix.

TABLE DE MATIERES

Introduction	1
I) Conversion de températures.....	2
II) Droite de regression par la méthode des moindres carrés	5
III) Critère de stabilité de Routh	9
IV) Efficacité d'une ailette rectangulaire	13
V) Intégration numérique	18
V-1) par les méthodes cumulatives	18
V-2) En utilisant les séries	22
(Détermination de la boucle de transfert d'un système)	
VI) Equations différentielles non linéaires du 1er ordre	30
VI-1) Méthode d'Euler	30
VI-2) Méthode de Runge	30
VII) Système d'équations différentielles non linéaires du 1er ordre (application aux calculs de réacteurs)	37
VIII) Equation aux dérivées partielles	42
VIII-1) Equation de Laplace $\Delta f=0$	42
VIII-2) Equation de la chaleur $\Delta f=D.df/dt$	48
IX) Calcul des équilibres liq-vap.....	52
X) CONCLUSION	56

CONVERSION DE TEMPERATURE

Ce programme et les trois suivants ne contiennent pas d algorithmes qui nécessitent une étude analytique numérique.

Le programme de conversion de température nous permet d'avoir directement la température introduite en °F, en °K, en °R, et en °C.

Exemple

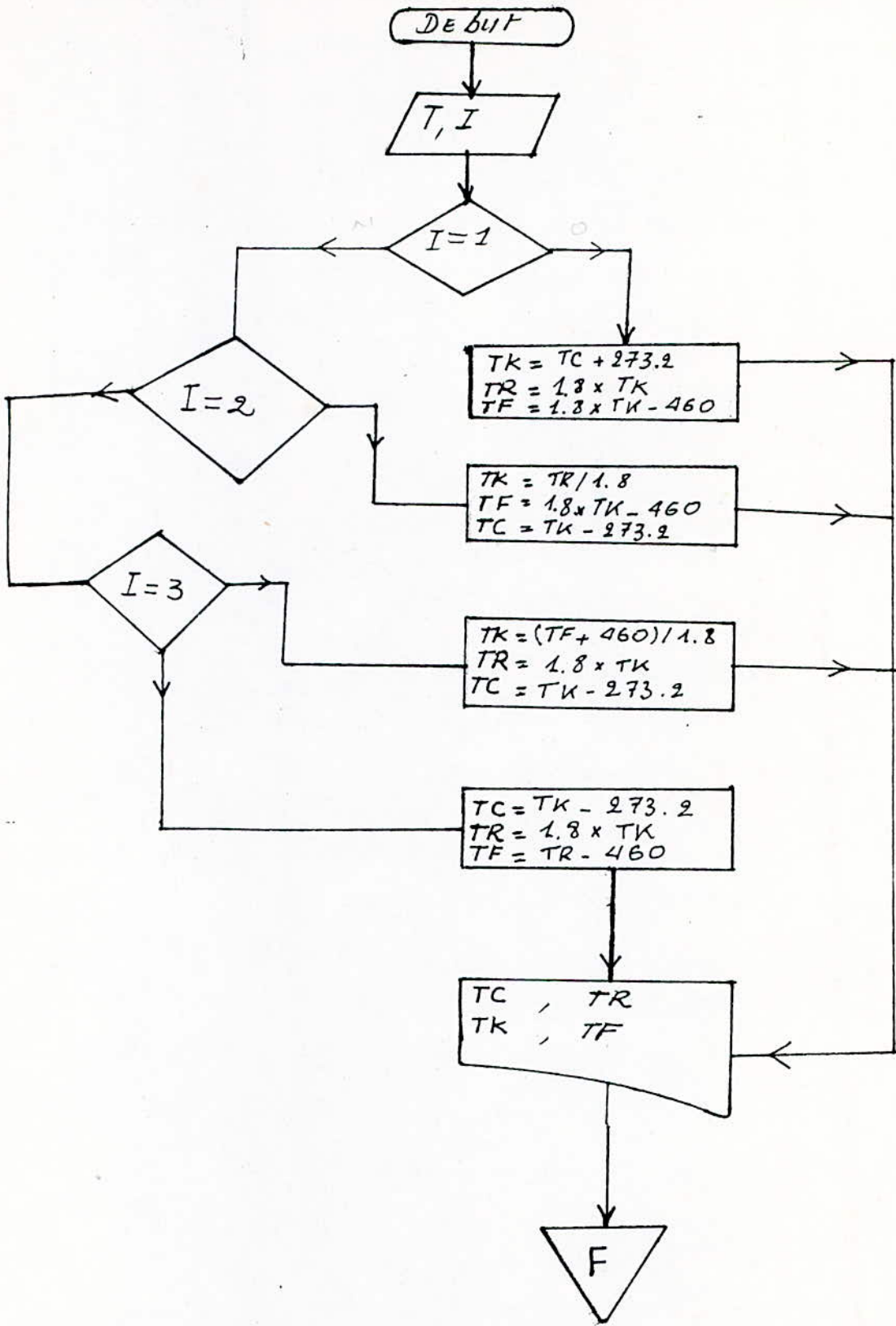
Soit a convertir, les températures suivantes

100 °C

400 °F

300 °K

510 °R




```

c   PROGRAMME DE CONVERSION DES TEMPERATURES
C   *****
C
15  PRINT*, 'FAIRE ENTRER LA TEMPERATURE A CONVERTIR'
c   °C:degrés celsius
c   °R:degres ranquine
c   °F:degres farenheit
    READ *, T
c   °K:degres kelvin
    PRINT*, 'ECRIRE: 1 SI LA TEMP. EST EN °C ;2 en°R ;3 en °F;4 en°K'
    READ*, I
    OPEN(UNIT=12, FILE='TEM.DAT', STATUS='NEW')
    IF (I.EQ.1) THEN
        TC=T
        TK=TC+273.2
        TR=1.8*TK
        TF=1.8*TK-460
    ELSEIF(I.EQ.2) THEN
        TR=T
        TK=TR/1.8
        TF=1.8*TK-460
        TC=TK-273.2
    ELSEIF(I.EQ.3) THEN
        TF=T
        TK=(TF+460)/1.8
        TR=1.8*TK
        TC=TK-273.2
    ELSE
        TK=T
        TC=TK-273.2
        TR=1.8*TK
        TF=TR-460
    ENDIF
100 WRITE(12,100) TC,TK,TR,TF
c   FORMAT(10X,4(F5.1,4X))
    WRITE(12,*)( 'TC=', TC, 'TK=', TK, 'TR=', TR, 'TF=', TF)
    PRINT*, 'VOULER VOUS CONTINUER?(0,1)'
    READ*, I
    IF (I.NE.0) GO TO 15
    STOP
    END

```

Resultats de conversion

```

-----
TC=   100.0000   TK=   373.2000   TR=   671.7600   TF=   211.7600
TC=   204.5778   TK=   477.7778   TR=   860.0000   TF=   400.0000
TC=    26.79999   TK=   300.0000   TR=   540.0000   TF=    80.00000
TC=    10.13333   TK=   283.3333   TR=   510.0000   TF=    50.00000

```

5) II) DROITE DE REGRESSION PAR LA METHODE DES MOINDRES CARRES

Ce programme calcule les coefficients a et b de la droite des moindres carres approchant les points (x, y) en (x_{es}, y_{es}).

x_{es} et y_{es} sont les valeurs estimees a partir des equations:

$$y_{es} = a + b.x \quad ; \quad x_{es} = c + d.y$$

Les expressions de a et b sont donnees par:

$$a = \frac{(\sum y) \cdot (\sum x^2) - (\sum x) \cdot (\sum xy)}{n \cdot \sum x^2 - (\sum x)^2}$$

$$b = \frac{\sum (x - \bar{x})(y - \bar{y})}{\sum (x - \bar{x})^2}$$

Exemple

Le tableau suivant presente des valeurs experimentales de la pression P d'un gaz donnee correspondantes a diverses valeurs du volume V. D'apres les lois thermodynamiques une relation de la forme:

$$PV^\gamma = C \quad \text{ou, } \gamma \text{ et } C \text{ sont des constantes}$$

devrait exister entre P et V.

V(m ³)	54.3	61.8	72.4	88.7	118.6	194.9
P(Pas)	61.2	49.5	37.6	28.4	19.2	10.1

Puisque $PV^\gamma = C \rightarrow \log P = -\log V + \log C$

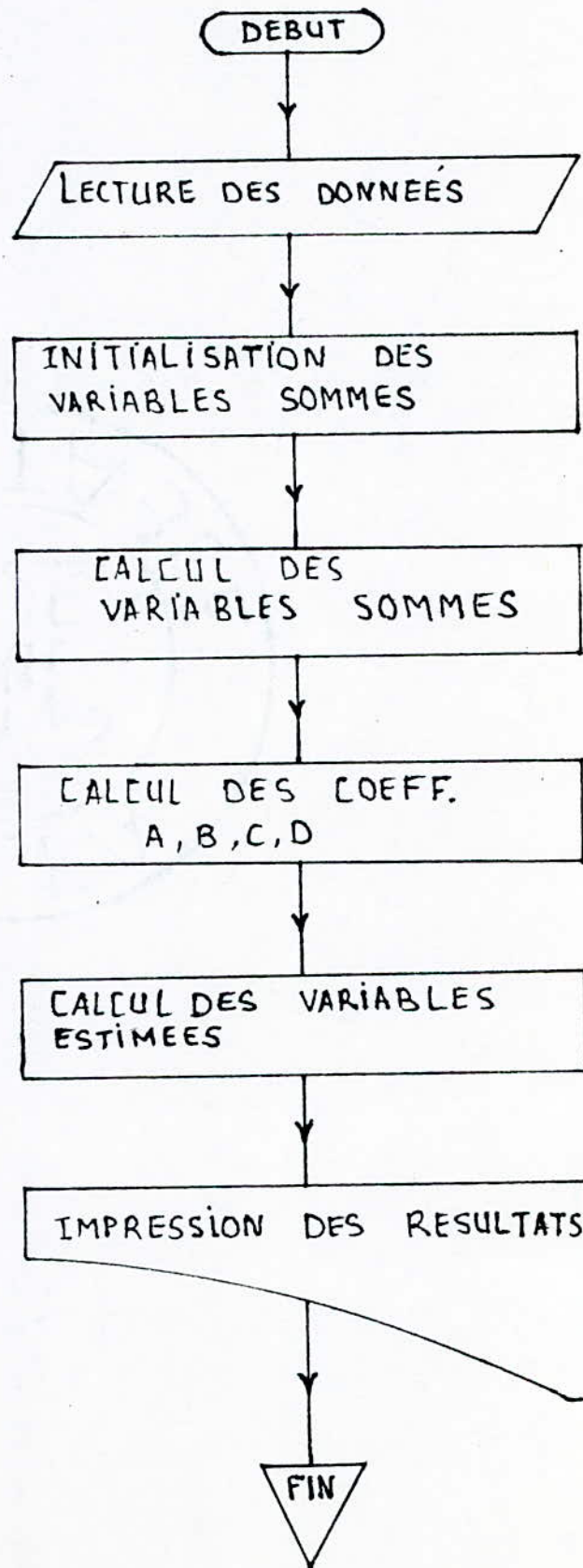
En posant:

$$y = \log P$$

$$x = \log V$$

$$a = \gamma$$

$$b = \log c$$



6
Fichier de lecture des données(don.dat)

6 = N
1.7348,1.7910,1.8597,1.9479,2.0741,2.2878 : valeurs de x
1.7868,1.6946,1.5752,1.4533,1.2833,1.0043 : valeurs de y

C CE PROGRAMME CALCULE LA DROITE DE REGRESSION PAR LA METHODE
C *****
C DES MOINDRES CARRES
C *****
C

C DIMENSION X(20),Y(20),XX(20),YY(20),XY(20),XES(20),YES(20)
C OPEN(UNIT=11,FILE='DON.DAT',STATUS='OLD')

C READ(11,*) N
C READ(11,*)(X(I),I=1,N)
C READ(11,*)(Y(I),I=1,N)

C INITIALISATION DES VARIABLES SOMMES

SX=0
SY=0
SXX=0
SYY=0
SXY=0
DO 2 I=1,N
XX(I)=X(I)**2
YY(I)=Y(I)**2
XY(I)=X(I)*Y(I)
SX=SX+X(I)

↑
SY=SY+Y(I)
SXX=SXX+XX(I)
SYY=SYY+YY(I)
SXY=SXY+XY(I)

2 CONTINUE

C CALCUL DES COEFFICIENTS:A,B & C,D

A=(SY*SXX-SX*SXY)/(N*SXX-SX**2)
B=(N*SXY-SY*SX)/(N*SXX-SX**2)
C=(SX*SYY-SY*SXY)/(N*SYY-SY**2)
D=(N*SXY-SX*SY)/(N*SYY-SY**2)

DO 4 I=1,N
YES(I)=A+B*X(I)
XES(I)=C+D*Y(I)

4 CONTINUE

OPEN(UNIT=20,FILE='DROR.DAT',STATUS='NEW')
WRITE(20,101)

101 FORMAT('1',2X,'X(I)',11X,'Y(I)',11X,'XX(I)',10X,'XY(I)',10X,'YY(I)')

WRITE(20,102)

102 FORMAT(3X,'***',11X,'***',11X,'***',10X,'***',10X,'***')

DO 3 I=1,N

WRITE(20,*) X(I),Y(I),XX(I),XY(I),YY(I)

3 CONTINUE


```

write(20,106)
106 format(11x,'*****')
WRITE(20,104)
104 FORMAT(11X,'ESTIMATION DE Y EN F(X)',11X,'ESTIMATION DE X EN F(Y)')
WRITE(20,105)
105 FORMAT(11X,'*****',11X,'*****')
DO 3 I=1,N
WRITE(20,*) I,X(I),YES(I),Y(I),XES(I)
3 CONTINUE
WRITE(20,*) 'a=',a,'b=',b,'c=',c,'d=',d
STOP
END

```

X(I) ****	Y(I) ****	XX(I) *****	XY(I) *****	YY(I) *****
1.734800	1.786800	3.009531	3.099741	3.192654
1.791000	1.694600	3.207681	3.035029	2.871669
1.859700	1.575200	3.458484	2.929399	2.481255
1.947900	1.453300	3.794315	2.830883	2.112081
2.074100	1.283300	4.301891	2.661693	1.646859
2.287800	1.004300	5.234029	2.297638	1.008618

```

*****
ESTIMATION DE Y EN F(X)
*****
ESTIMATION DE X EN F(Y)
*****

```

1	1.734800	1.767343	1.786800	1.721594
2	1.791000	1.688425	1.694600	1.787068
3	1.859700	1.591953	1.575200	1.871857
4	1.947900	1.468098	1.453300	1.958421
5	2.074100	1.290883	1.283300	2.079142
6	2.287800	0.9907951	1.004300	2.277267

a= 4.203430 , b= -1.404246 , c= 2.990446 , d= -0.7101254

III) CRITERE DE STABILITE DE ROUTH

On détermine la stabilité d'un système par sa réponse aux signaux d'entrée ou aux parasites. On peut définir la stabilité en relation avec la réponse du système à l'impulsion unité comme suit:

On dit qu'un système est stable si tout signal d'entrée borné produit un signal de sortie borné.

La réponse à l'impulsion d'un système linéaire indépendant du temps est formée d'une somme de fonctions exponentielles de temps dont les exposants sont des racines de l'équation caractéristique du système. Une condition nécessaire de stabilité est que les parties réelles des racines de l'équation caractéristique soient négatives. Cela assure en effet que la réponse à l'impulsion va disparaître exponentiellement avec le temps.

Critère de stabilité

Le critère de Routh est appliqué à une équation caractéristique de la forme :

$$a_0 s^n + a_1 s^{n-1} + a_2 s^{n-2} + \dots + a_{n-1} s + a_n = 0$$

On applique le critère en se servant d'une table de Routh définie comme suit:

A ₀	A ₂	A ₄	A ₆	A ₈
A ₁	A ₃	A ₅	A ₇	A ₉
B ₁₁	B ₁₂	B ₁₃	B ₁₄	B ₁₅
B ₂₁	B ₂₂	B ₂₃	B ₂₄	B ₂₅
.....				

où a₀, a₁, a₂, ... sont les coefficients de l'équation caractéristique.

$$b_{11} = \frac{a_1 a_2 - a_0 a_3}{a_1} ; \quad b_{12} = \frac{a_1 a_4 - a_0 a_5}{a_1} ; \dots$$

$$b_{21} = \frac{b_{11} a_3 - a_1 b_{12}}{b_{11}} ; \quad b_{22} = \frac{b_{11} a_5 - a_1 b_{13}}{b_{11}} ; \dots$$

On poursuit la construction de la table horizontalement et verticalement jusqu'à l'obtention de zéros

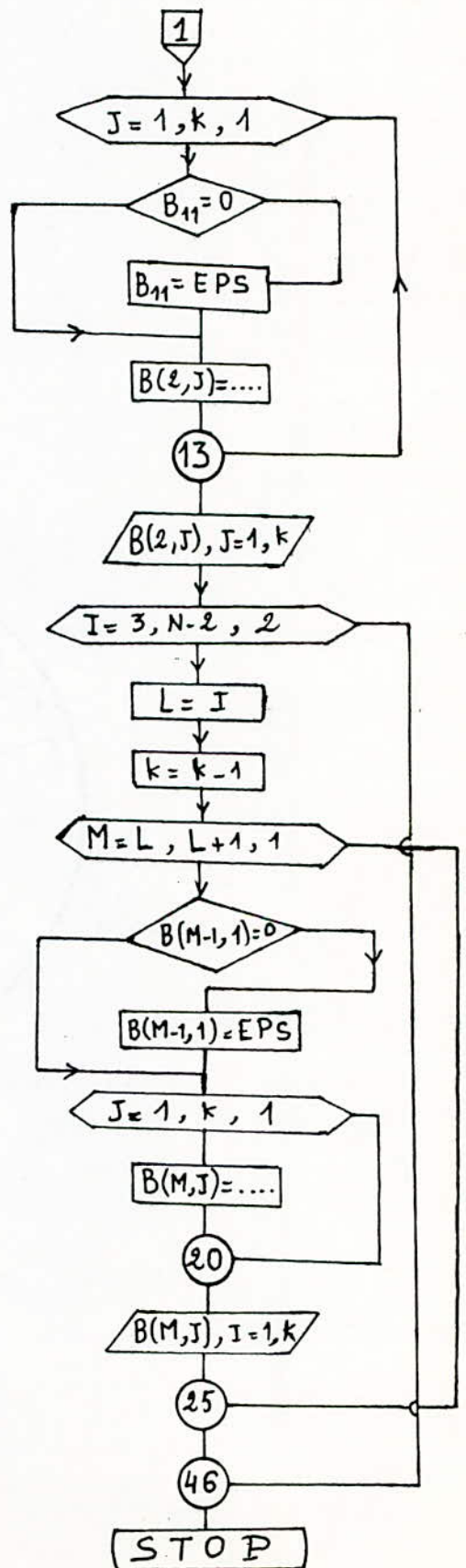
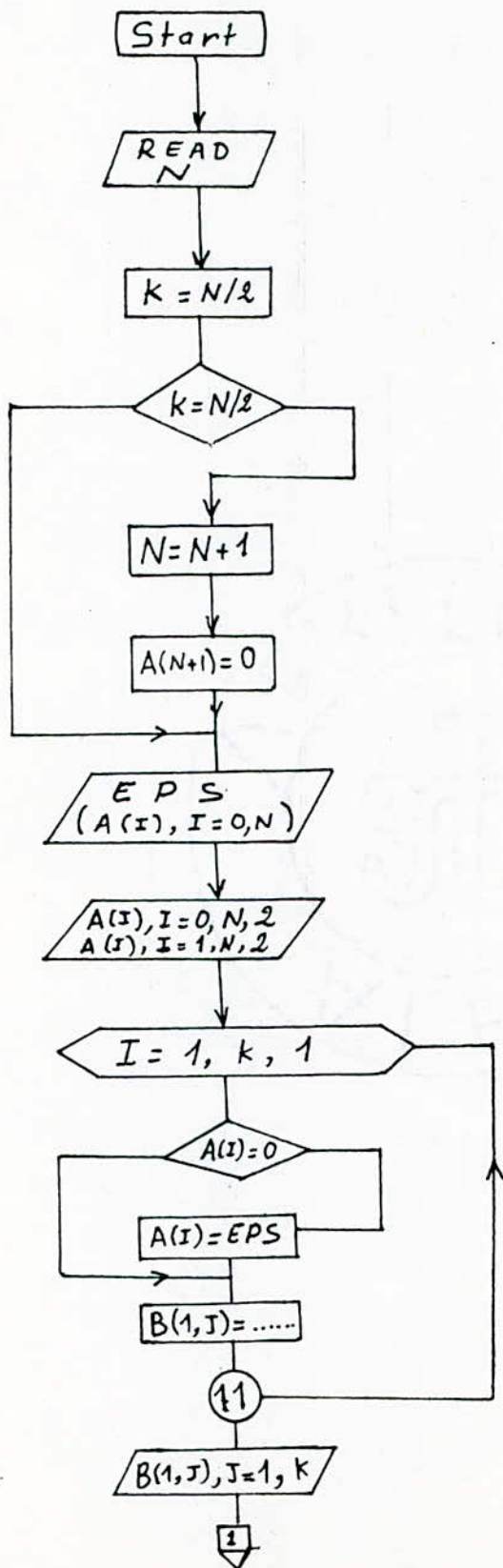
Toutes les racines de l'équation caractéristique ont leurs parties réelles négatives si et seulement si, les éléments de la première colonne de la table de Routh ont le même signe

Exemple

Calculer et imprimer la table de Routh pour l'équation caractéristique suivante:

$$5x^6 + x^4 + 2x^3 + 1.5x^2 + x + 2 = 0$$

Le système est-il stable?




```

    program routh
c   *****
c   ce programme calcule les coefficients de la table de routh

c
c   dimension a(0:11),b(10,5)
    print*, 'faire entrer l ordre(n) de l equation caracteristique'
    read*, n
    k=n/2.

c
c   eps: represente la valeur de epsilon a donner a l'element nul
c   de la premiere colone de la table de routh
c
    PRINT*, 'faire entrer la valeur de epsilon'
    read*, eps

c
    print*, 'faire entrer les coefficinet de l equation caracteristique'
    print*, ' par ordre decroissant de (n)'
    open(unit=15, file='rou.dat', status='new')
    write(15,15), n
15  format(5X, 'table de routh pour une equat. caract. d ordre:', i1)
    write(15,16)
16  format(5x, 47(1h*), ///)
    read*, (a(i), i=0, n)
    if(k.eq.n/2) then
        n=n+1
        a(n+1)=0
    endif
    write(15,*)(a(i), i=0, n, 2)
    write(15,*)(a(i), i=1, n, 2)
    do 11 j=1, k
        if (a(1).eq.0.) then
            a(1)=eps
        endif
        b(1, j)=(a(1)*a(2*j)-a(0)*a(2*j+1))/a(1)
11  continue
    write(15,*)(b(1, j), j=1, k)
    do 13 j=1, k
        if (b(1,1).eq.0.) then
            b(1,1)=eps
        endif
        b(2, j)=(b(1,1)*a(2*j+1)-a(1)*b(1, j+1))/b(1,1)
13  continue
    write(15,*)(b(2, j), j=1, k)
    do 46 i=3, n-2, 2
        l=i
        k=k-1
        do 25 m=1, (l+1)
            if (b(m-1,1).eq.0) then
                b(m-1,1)=eps
            endif
            do 20 j=1, k
                b(m, j)=(b(m-1,1)*b(m-2, j+1)-b(m-2,1)*b(m-1, j+1))/b(m-1,1)
20  continue
            write(15,*)(b(m, j), j=1, k)
25  continue
46  continue
    _ STOP

```

table de routh pour une equat. caract. d ordre:6

6.000000	1.000000	1.500000	2.000000
0.000000E+00	2.000000	1.000000	0.000000E+00
-1.1999999E+07	-5999999.	2.000000	
2.000000	1.000000	0.000000E+00	
2.500001	2.000000		
-0.5999992	0.000000E+00		
2.000000			
0.000000E+00			

On constate qu'il y'a des changements de signes dans la premiere colonne donc,le systeme est instable.

IV) EFFICACITE D'UNE AILETTE RECTANGULAIRE *****

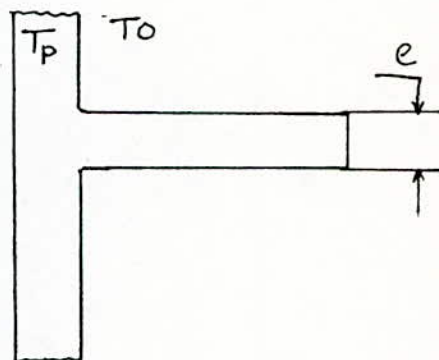
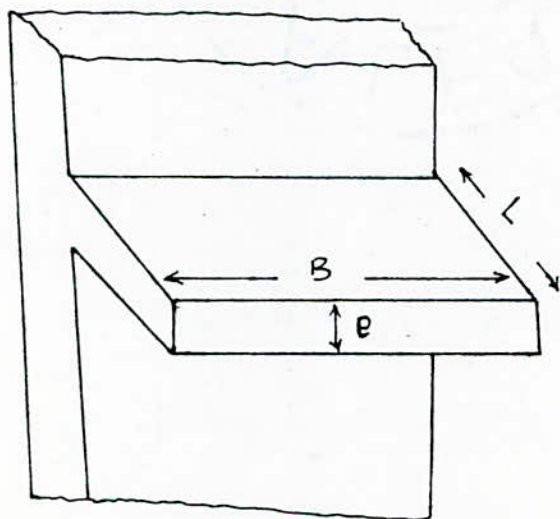
La caracteristique fonctionnelle de l' ailette est determinee par son efficacite.

On entend par ce critere la relation du flux total transmis par l'ailette au flux thermique qui serait transmis si toute la surface de l'ailette est portee a la temperature T_p de la paroi.

D'apres la loi de Fourier,le flux de chaleur transmis au milieu ambiant est d'autant plus grand que la surface d'echange est grande.

Ce sujet fait souvent l'objet d'etude des problemes de refroidissement des moteurs a combustion interne,des installations frigorifiques,etc... La surface d'echange (du corps a refroidir) est augmentee par l'adjonction d'ailettes.

Generalement,le nervurage le plus efficace est determine par la forme de cette ailette: (rectangulaire,triangulaire,annulaire,...)



L: longueur
B: largeur
e: épaisseur

La quantité de chaleur transmise par unité de largeur d'une ailette rectangulaire avec dégagement de chaleur par convection à son extrémité est donnée par la formule:

$$Q = (P.H.A.K)^{1/2} \cdot (T_p - T_0) \frac{sh mL + (HL/mK) ch mL}{ch mL + (HL/mK) sh mL}$$

Avec: $m = \frac{HP}{KA}$; $m = \frac{2.H}{ke}$

L'efficacité est donnée par:

$$eff = \frac{th m (L + e/2)}{m (L + e/2)}$$

Application

Calculer l'efficacité d'une ailette rectangulaire ainsi que la chaleur transmise par sa surface si:

$$H = 73.2 \text{ kcal/h.m}^2$$

$$H_1 = 22.4 \text{ kcal/h.m}^2$$

$$K = 22.3 \text{ kcal/h.m}$$

$$e = 0.25 \text{ m}$$

$$B = 1 \text{ m}$$

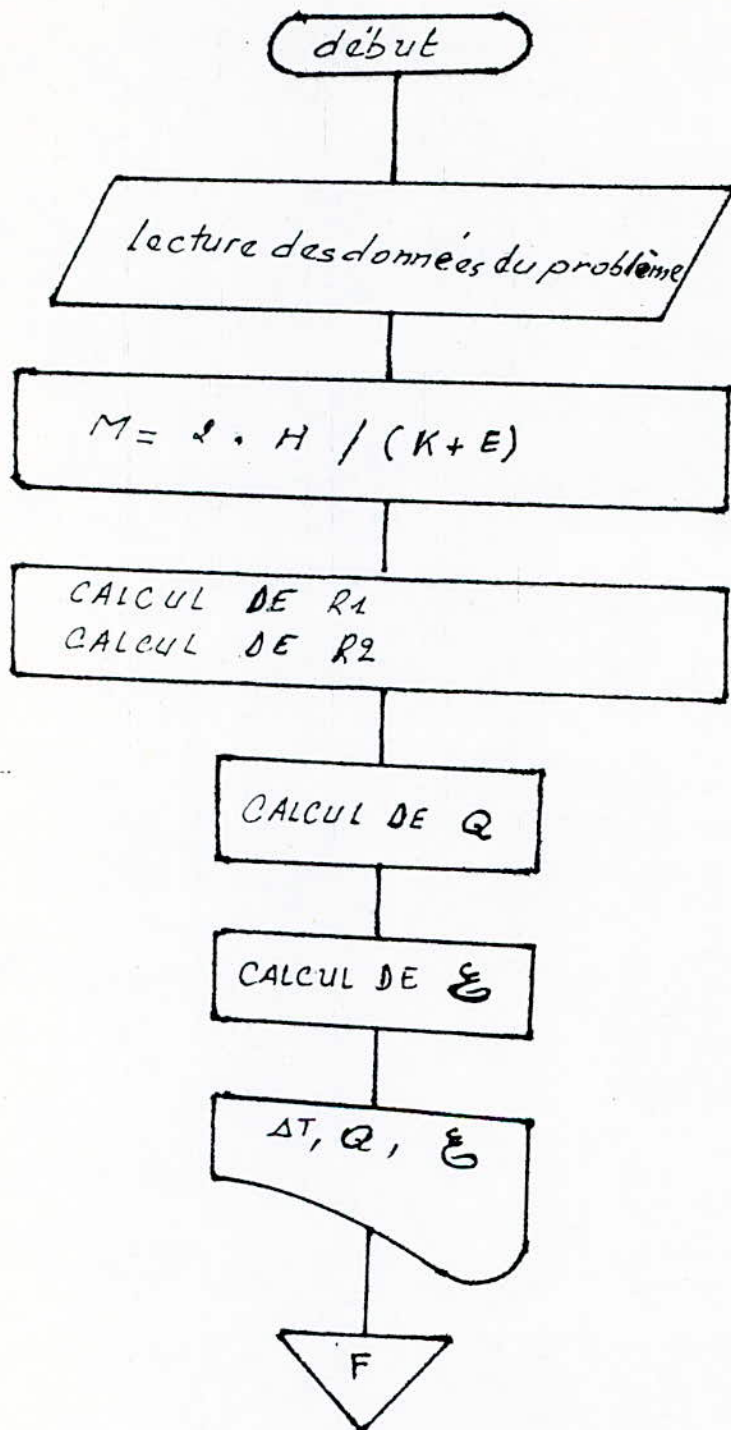
$$L = 0.1 \text{ m}$$

$$T_p = 886^\circ\text{k}$$

$$T_0 = 311^\circ\text{k}$$

$$P = 2 \text{ m (Périmètre)}$$

$$Q: \text{ (en kcal/kg)}$$




```

PROGRAM ECHANGE
c *****
c
REAL L,K,M
c LA NOTATION DES PARAMETRES EST LA MEME
OPEN(UNIT=19,FILE='ECH.DAT',STATUS='NEW')
C CE PROGRAMME CALCULE L'EFFICACITE D'UNE AILETTE RECTANGULAIRE
10 WRITE(19,100)
100 FORMAT(10X,'RENDEMENT D UNE AILETTE PLANE',///)
c PRINT*, 'INTRODUCTION DES DONNEES'
write(19,*) 'introduction des donnees'
write(19,*) 'h,k,e,b,l,tp,to,hl'
PRINT*, 'ENTRER LES VALEURS DE H,K,E,B,L,TP,TO,HL'
READ*,H,K,E,B,L,TP,TO,HL
M=2*H/(K*E)
EP=EXP(M*L)/2
EM=EXP(-M*L)/2
R1=EP-EM+(HL/(M*K))*(EP+EM)
R2=EP+EM+(HL/(M*K))*(EP-EM)
P=2.
A=L*E
DT=TP-T0
c CALCUL DU FLUX DE CHALEUR
Q=SQRT(P*H*K*A)*DT*(R1/R2)
M=SQRT(H/(K*E))
EF=TANH(M*(L+E))/(M*(L+E))

WRITE(19,*) 'LA VALEUR DE DELTA T .....=' ,DT
WRITE(19,*) 'LE FLUX DE CHALEUR TOTALE/UNITE DE SURFACE (Q) =' ,Q
WRITE(19,*) 'EFFICACITE DE L AILETTE (EF).....=' ,EF
PRINT*, 'VOULER VOUS CONTINUER?(0,1)'
READ*,I
IF(I.EQ.1) GO TO 10
STOP
END

```

RENDEMENT D UNE AILETTE PLANE

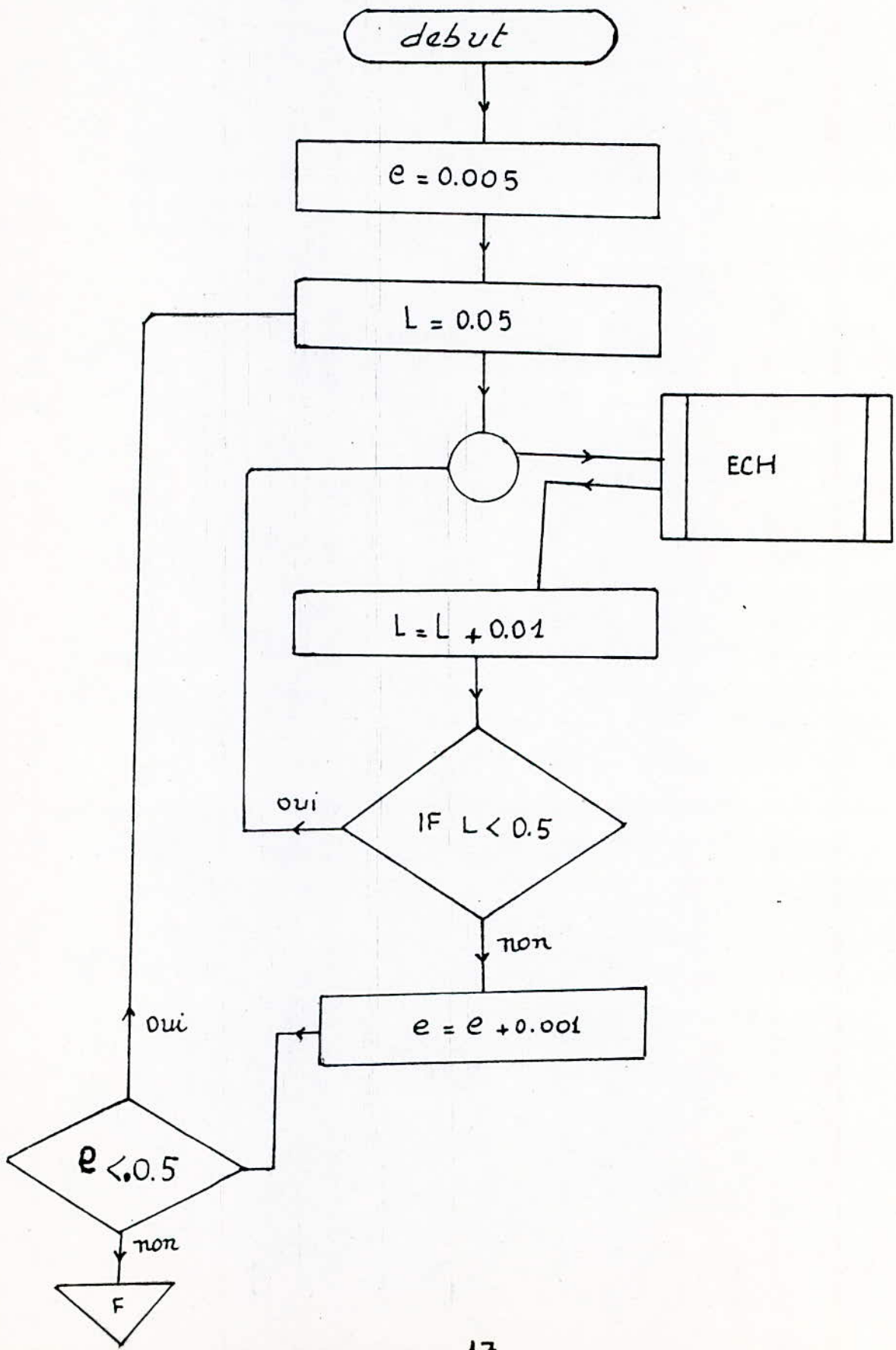
```

LA VALEUR DE DELTA T .....=      586.0000
LE FLUX DE CHALEUR TOTALE/UNITE DE SURFACE (Q) =      5236.862
EFFICACITE DE L AILETTE (EF).....=      0.6719366

```

On remarque que l'efficacité de l'ailette est faible.

En utilisant ce programme on peut faire l'étude d'optimisation des paramètres influençant sur cette efficacité. En voici l'organigramme:



V) INTEGRATION NUMERIQUES

Il n'y a que fort peu de fonctions dont l'obtention d'une primitive est possible. Malgré la possibilité d'obtenir cette primitive, il arrive souvent que la méthode soit longue et laborieuse. Dans la pratique, il est plus intéressant de pouvoir évaluer rapidement cette intégrale.

Nous cherchons à intégrer la fonction:

$$F(x) = \int_0^1 \exp(-x^2) dx$$

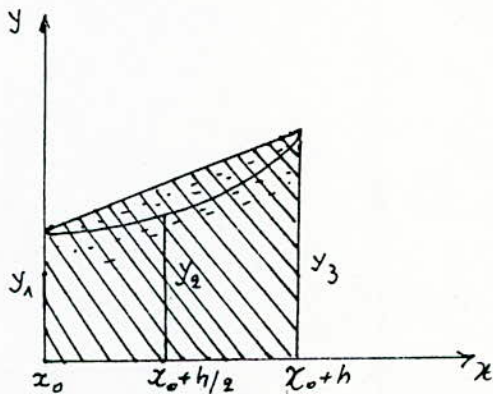
V-1) METHODES CUMMULATIVES

Ces méthodes possèdent des algorithmes numériques simples et donnent des résultats avec très bonne précision

V-1-1) Méthodes des trapèzes

L'aire du trapèze hachuré est donnée par:

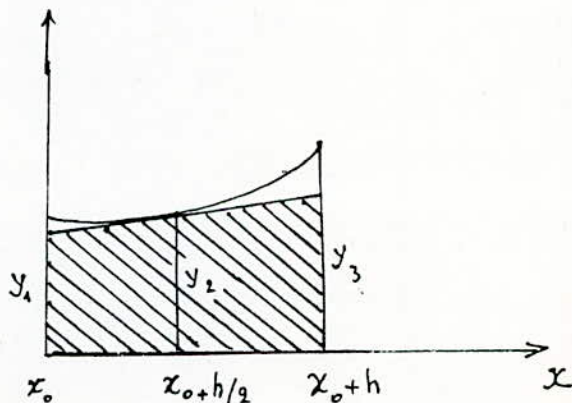
$$A = h/2(y_1 + y_3)$$



V-1-2) Méthode des tangentes

L'aire du trapèze hachuré est donnée par:

$$A = h \cdot y_2$$



V-1-3)Méthode de Simpson

Sans la démontrer, la formule dite des trois niveaux appliquée à un polynôme au plus de trois degrés:

$$F(x) = \alpha x^3 + \beta x^2 + \gamma x + \delta$$

donne:

$$\int_a^b F(x) \cdot dx = ((b-a)/6) \cdot (F(a) + F(b) + 4 \cdot F((a+b)/2))$$

L'approximation de l'aire calculée par la méthode de Simpson se fait par une tranche parabolique. L'aire donnée par cette méthode a pour algorithme numérique:

$$A = (h/6) \cdot (y_1 + y_3 + 4y_2)$$

posons:

tra: aire donnée par la méthode des trapèzes

tan: tangentes

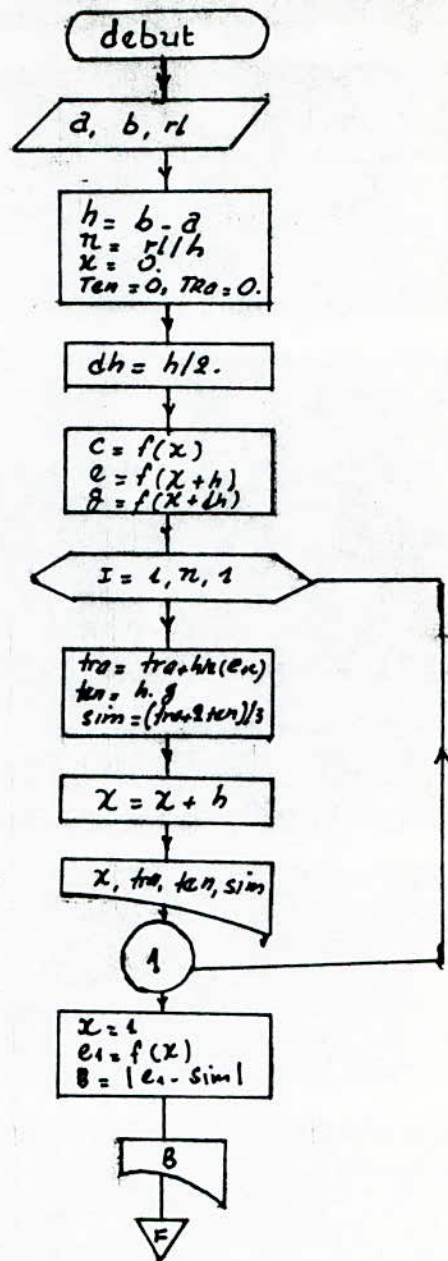
sim: de Simpson

On peut remarquer que:

$$\text{sim} = (\text{tra} + 2 \cdot \text{tan}) / 3$$

Application:

On calcul la primitive de la fonction précédente entre 0 et 1. Pour avoir la primitive d'une autre fonction, il suffira de changer l'expression de la fonction et de définir les nouveaux paramètres s'il y en a lieu.



```

c ce programme calcule l'integrale d'une fonction par trois methodes
c *****
c numeriques:celle des trapezes,des tangentes & de simpson
c *****
c
f(x)=exp(-x*x/2)
open(unit=22,file='int.dat',status='new')
write(22,99)
99 format(10X,'integrale de gauss calculee par trois methodes',///)
print*, 'faire entrer les valeurs extremes a & b & la precision voulue'
read*,a,b
print*, 'faire entrer la longueur de l intervalle d integration'
read*,l
h=b-a
n=l/h
x=a
ten=0
tra=0
dh=h/2
c=f(x)
e=f(x+h)
g=f(x+dh)
do 5 i=1,n
tra=tra+(h/2)*(c+e)
ten=ten+h*g
sim=(tra+2*ten)/3
x=x+h
write(22,100)x,tra,ten,sim

100 format(5x,'x=',f8.7,3X,'tra=',F12.10,3x,'ten=',F12.10,3x,
1 'sim=',f14.10)
print*,x,tra,ten,sim
5 continue
b=abs(1-sim)
write(22,77) b
77 format(/,10x,'l erreure comise est de l ordre de :',f11.10)
stop
end

```

integrale de gauss calculee par trois methodes

x=.1000000	tra=0.0999975130	ten=0.0999987647	sim= 0.0999983475
x=.2000000	tra=0.1999950260	ten=0.1999974996	sim= 0.1999966651
x=.3000000	tra=0.2999925315	ten=0.2999962270	sim= 0.2999950051
x=.3999999	tra=0.3999900520	ten=0.3999949396	sim= 0.3999933004
x=.4999998	tra=0.4999875724	ten=0.4999936521	sim= 0.4999916255
x=.5999997	tra=0.5999850631	ten=0.5999923944	sim= 0.5999899507
x=.6999996	tra=0.6999825835	ten=0.6999911070	sim= 0.6999883056
x=.7999995	tra=0.7999801040	ten=0.7999898195	sim= 0.7999866009
x=.8999994	tra=0.8999776244	ten=0.8999885321	sim= 0.8999848962
x=.9999993	tra=0.9999751449	ten=0.9999872446	sim= 0.9999832511

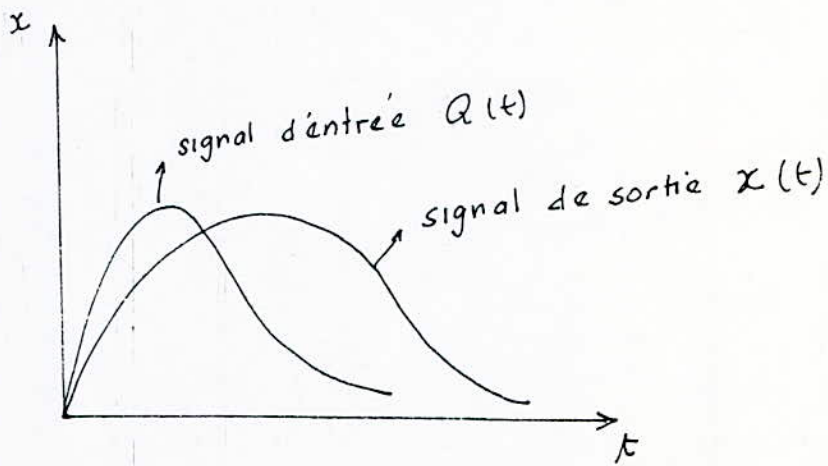
l erreure comise est de l ordre de :.0000167489

Remarque:

Le resultat est donne apres 100 iterations mais l'impression est faite
seulement pour les 10 valeurs intermediaires (0.1,0.2,.....0.9,1)

V-2) Intégration par les series

Lorsque la fonction n'est connue qu'en certains points donnés, on tend à discrétiser le problème en calculant la somme des series de termes d'approximation. Soit à déterminer la fonction de transfert d'un système donné.

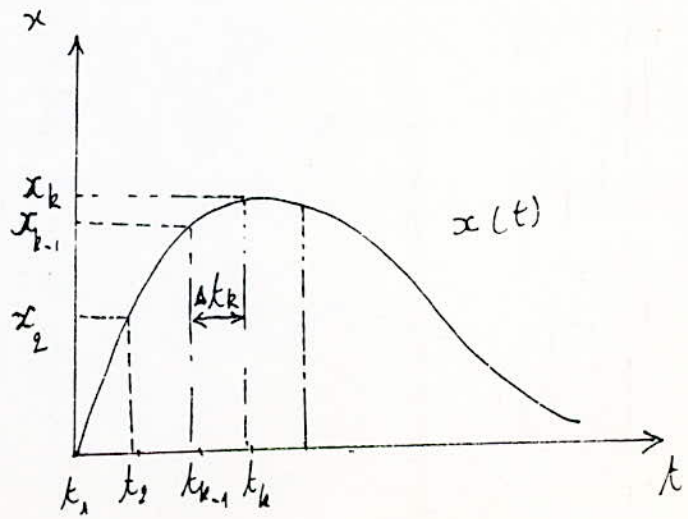


Lorsqu'on travaille dans un domaine de fréquence l'expression de la fonction de transfert est donnée par:

$$G(i\omega) = \frac{\int_0^{\infty} x(t) \cdot \exp(-i\omega t) dt}{\int_0^{\infty} Q(t) \cdot \exp(-i\omega t) dt}$$

$Q(t)$ est une fonction échelon de module H .
 $x(t)$ est une fonction analytiquement inconnue mais, elle est mesurée à des intervalles de temps égaux.
 Nous pouvons écrire l'intégrale sous forme:

$$S = \sum_{k=1}^N \int_{t_{k-1}}^{t_k} x(t) \cdot \exp(-i\omega t) dt$$



On choisie des intervalles de temps $(t_{k-1} - t_k)$ de sorte que nous pouvons approximer $x(t)$ a la fonction polynomiale:

$$\phi_k(t) = \alpha_{0k} + \alpha_{1k}(t - t_{k-1})$$

C'est a dire que:

$$x(t) \simeq \phi_k(t) \quad \text{pour } t_{k-1} \leq t \leq t_k$$

avec,

$$\alpha_{1k} = (x_k - x_{k-1}) / \Delta t_k \quad (1) \quad \alpha_{0k} = x_{k-1} \quad (2)$$

D'ou il vient

$$S = \sum_{k=1}^N \left[\int_{t_{k-1}}^{t_k} (\alpha_{0k} + \alpha_{1k}(t - t_{k-1})) \exp(-i\omega t) dt \right]$$

En faisant un changement de variables,

$$u = t - t_{k-1} \longrightarrow du = dt,$$

$$du = e^{-i\omega t} dt \longrightarrow v = -\frac{e^{-i\omega t}}{i\omega};$$

En intégrant par partie, et enfin en remplaçant α_{1k} et α_{0k} par leurs expressions en (1) et (2), il vient:

$$S = \sum_{k=1}^N e^{-i\omega t_{k-1}} \left[x_k \left(\frac{e^{-i\omega t_{k-1}} - 1}{\omega^2 \Delta t_k} - \frac{e^{-i\omega t_k}}{i\omega} \right) + x_{k-1} \left(\frac{e^{-i\omega t_k} + 1}{\omega^2 \Delta t_k} + \frac{1}{i\omega} \right) \right]$$

En écrivant S sous forme

$$S = \text{Re}(x(t)) + i \cdot \text{Im}(x(t))$$

et en passant aux formes sinus et cosinus nous aurons:

$$S = (A1 + A2) + i.(B1 + B2) \quad \text{avec,}$$

$$A1 = \sum_{k=1}^N [(x_k - x_{k-1}) / (w \Delta t_k)] \cdot [\cos w(t_{k-1} + \Delta t_k) - \cos w(t_{k-1})],$$

$$A2 = \sum_{k=1}^N [(x_k / w) \cdot \sin w(t_{k-1} - \Delta t_k) - (x_{k-1} / w) \sin w(t_{k-1})],$$

$$B1 = \sum_{k=1}^N [(x_k - x_{k-1}) / (w \Delta t_k)] \cdot [-\sin w(t_{k-1} - \Delta t_k) + \sin w(t_{k-1} + 0t)],$$

$$B2 = \sum_{k=1}^N [(-x_{k-1} / w) \cdot \cos w(t_{k-1}) + (x_k / w) \cdot \cos w(t_{k-1} + \Delta t_k)];$$

Posons:

$$A = A1 + A2$$

$$B = B1 + B2$$

D'où

$$S = A + i.B$$

Calcul de l'intégrale de $Q(t)$

Si $Q(t)$ est une fonction indépendante du temps on aura:

$$\int_0^T Q(t) \exp(-iwt) dt = (H/iw) \cdot [1 - \exp(iwT)]$$

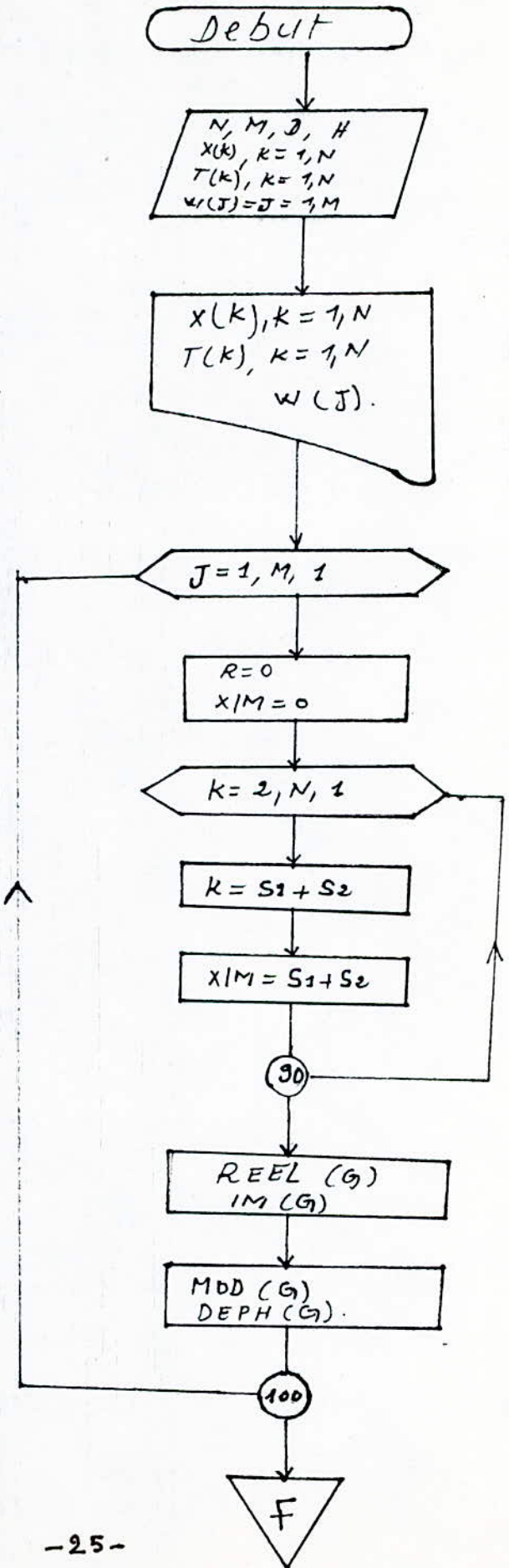
T : est la durée de la période du signal d'entrée.

posons:

$$\int_0^T Q(t) \exp(-iwt) dt = C + iD \quad \text{avec} \quad \begin{cases} C = -\frac{H}{\omega} \cos \omega T \\ D = \frac{H}{\omega} \sin \omega T \end{cases}$$

il vient:

$$G(iw) = \frac{C + iD}{A + iB}$$



```

PROGRAM REGULATION
DIMENSION X(30),T(30),W(10)
PRINT*, 'INTRODUIRE LE NOMBRE DE VALEURS (N) DE X(K) ET T(K)'
READ*,N
PRINT*, 'INTRODUIRE LES VALEURS DE X(K)'
READ*,(X(K),K=1,N)
PRINT*, 'INTRODUIRE LES VALEURS DE T(K)'
READ*,(T(K),K=1,N)
PRINT*, 'INTRODUIRE LE NOMBRE (M) DE W(J)'
READ*,M
PRINT*, 'INTRODUIRE LES VALEURS DE W(J)'
READ*,(W(J),J=1,M)
PRINT*, 'INTRODUIRE LE RETARD (D)'
READ*,D
PRINT*, 'INTRODUIRE IMPULSION (H)'
READ*,H
DT= T(K)-T(K-1)
ON VA DRESSER UN TABLAU POUR LES VALEURS DE ENTREE
OPEN(UNIT=6,FILE='REGR.DAT',STATUS='NEW')
WRITE (6,25)
FORMAT(10X,'VALEURS DES DONNEES',/,10X,20(1H*))
WRITE(6,26)
FORMAT(10X,34(1H*))
WRITE (6,27)
FORMAT(10X,1H*,3(10X,1H*))
WRITE (6,28)
FORMAT(10X,1H*,5X,'K',4X,1H*,3X,'X(K)',3X,1H*,3X,'T(K)',3X,
1 1H*)
WRITE (6,27)
WRITE (6,26)
DO 103 K=2,N
WRITE (6,27)
WRITE (6,38)K,X(K),T(K)
38 FORMAT (10X,1H*,4X,13,3X,1H*,2(1X,F8.5,1X,1H*))
WRITE (6,27)
WRITE (6,26)
103 CONTINUE
WRITE(6,111)
111 FORMAT('1',10X)
DO 100 J=1,M
R=0.0
XIM=0.0
CALCUL DE LA PARTIE REELLE (R) ET DE LA PARTIE IMAGINAIRE (XIM)
DO 90 K=2,N
S1=((X(K)-X(K-1))/(W(J)**2*DT))*(COS(W(J)*(T(K)+DT))-COS(W(J)
2 *T(K-1)))
S2=(X(K)/W(J))*SIN(W(J)*(T(K-1)+DT))-(X(K-1)/W(J))*SIN(W(J)*T(K-1))
R=R+S1+S2
S1=((X(K)-X(K-1))/(W(J)**2*DT))*(-SIN(W(J)*(T(K-1)+DT))+SIN(W(J)
1 *T(K-1)))
S2=(-X(K-1)/W(J))*COS(W(J)*T(K-1))+(X(K)/W(J))*COS(W(J)
3 *(T(K-1)+DT))
XIM=XIM+S1+S2
RQ=(H/W(J))*SIN(W(J)*D)
XIQ=COS(W(J)*D)/W(J)-(H/W(J))
RG=(R*RQ+XIM*XIQ)/(RQ**2+XIQ**2)
XIG=(RQ*XIM-R*XIQ)/(RQ**2+XIQ**2)
XMOD=SQRT(RG**2+XIG**2)
XANG=ATAN(XIG/RG)*180.0/3.1416

```

```
IF (J.NE.1) GO TO 70
30 WRITE (6,15)
15 FORMAT('1',2X,68(1H*))
WRITE (6,16)
16 FORMAT(3X,1H*, 'PUL W(J)',2X,1H*,4X, 'REEL(G)',2X,1H*,5X, 'IMA(G)'
1 ,1X,1H*,6X, 'MOD(G)',2X,1H*,4X, 'DEPHA(G)',1X,1H*)
WRITE(6,11)
11 FORMAT(3X,68(1H*))
70 PRINT*,W(J),RG,XIG,XMOD,XANG
WRITE(6,55)W(J),RG,XIG,XMOD,XANG
55 FORMAT(3X,1H*,1X,F8.5,1X,1H*,2X,F9.5,2X,1H*,2X,F9.5,1X,1H*,2X,F9.5,
1 3X,1H*,1X,F9.5,3X,1H*)
100 WRITE (6,11)
STOP
END
```


VALEURES DES DONNEES

```

*****
*****
*           *           *           *
*      K      *   X(K)   *   T(K)   *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      2      *  4.00000 *  1.50000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      3      *  6.00000 *  2.00000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      4      *  8.00000 *  2.50000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      5      * 10.20000 *  3.00000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      6      * 14.00000 *  4.00000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      7      *  8.00000 *  5.00000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      8      *  4.00000 *  6.00000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*      9      *  3.00000 *  6.50000 *
*           *           *           *
*****
*           *           *           *
*     10      *  0.40000 *  8.00000 *
*           *           *           *
*****

```

Tableau de resultats

```
*****  
*PUL W(J) * REEL(G) * IMA(G) * MOD(G) * DEPHA(G) *  
*****  
* 20.00000 * 11.46749 * 7.65063 * 13.78534 * 33.70949 *  
*****  
* 40.00000 * -1.79927 * 1.82578 * 2.56336 * -45.41888 *  
*****  
* 60.00000 * 3.03749 * 0.29800 * 3.05207 * 5.60317 *  
*****  
* 80.00000 * -2.70099 * 5.07890 * 5.75244 * -61.99552 *  
*****  
* ***** * -11.49043 * 42.34933 * 43.88047 * -74.81953 *  
*****
```

VI) RESOLUTION NUMERIQUE DES EQUATIONS DIFFERENTIELLES

 NON LINEAIRES DU PREMIER ORDRE

De nombreux phénomènes conduisent a des équations différentielles. Tout régime transitoire peut être présenté par une de ces équations. Dans ce problème, nous allons chercher a intégrer la relation:

$$dy/dx=f(k,y)$$

ou, la variable et l'inconnue sont des réelles.

Ce problème aura un sens si la fonction $f(x,y)$ est définie et continue sur l'intervalle d'intégration.

Il existe plusieurs algorithmes numériques donnant la solution approchée de $y(x)$ parmi lesquels nous citons:

La méthode de PICARD, la méthode de RUNGE, la méthode de la série de TAYLOR, la méthode d'EULER etc.....

Nous traiterons seulement la méthode d'EULER et la méthode de RUNGE.

VI-1) Méthode d'EULER

L'algorithme numérique de la méthode d'EULER est relativement simple.

D'où

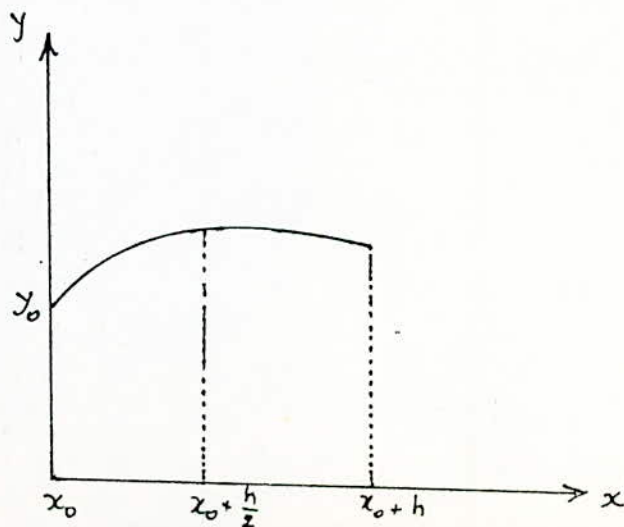
$$y_{k+1} - y_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} y' dx \approx h \cdot y'_k$$

$$y_{k+1} = y_k + h \cdot f(x_k, y_k)$$

VI-2) Méthode de RUNGE

C'est une méthode extrêmement employée.

Conduite des calculs



Sur un petit interval, on peut approximer $f(x,y)$ par un polynome au plus du troisieme degre et donc, nous pouvons appliquer la formule dite des trois niveaux entre x_0 et (x_0+h) . Nous obtenons alors:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} \frac{dy}{dx} = y_1 - y_0 = \frac{h}{6} \left[f(x_0, y_0) + f(x_0+h, y_1) + 4f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} f(x_0, y_0)\right) \right]$$

avec : $y_1 = y_0 + h f\left(x_0 + \frac{h}{2}, \frac{h}{2} f(x_0, y_0)\right)$

Plutôt que d'utiliser la relation précédente telle qu'elle est écrite, nous pouvons calculer successivement:

$$u_0 = f(x_0, y_0),$$

$$v = f(x_0 + h/2, y_0 + u_0 \cdot h/2)$$

$$w = f(x_0 + h, y_0 + h \cdot u_0).$$

D'où

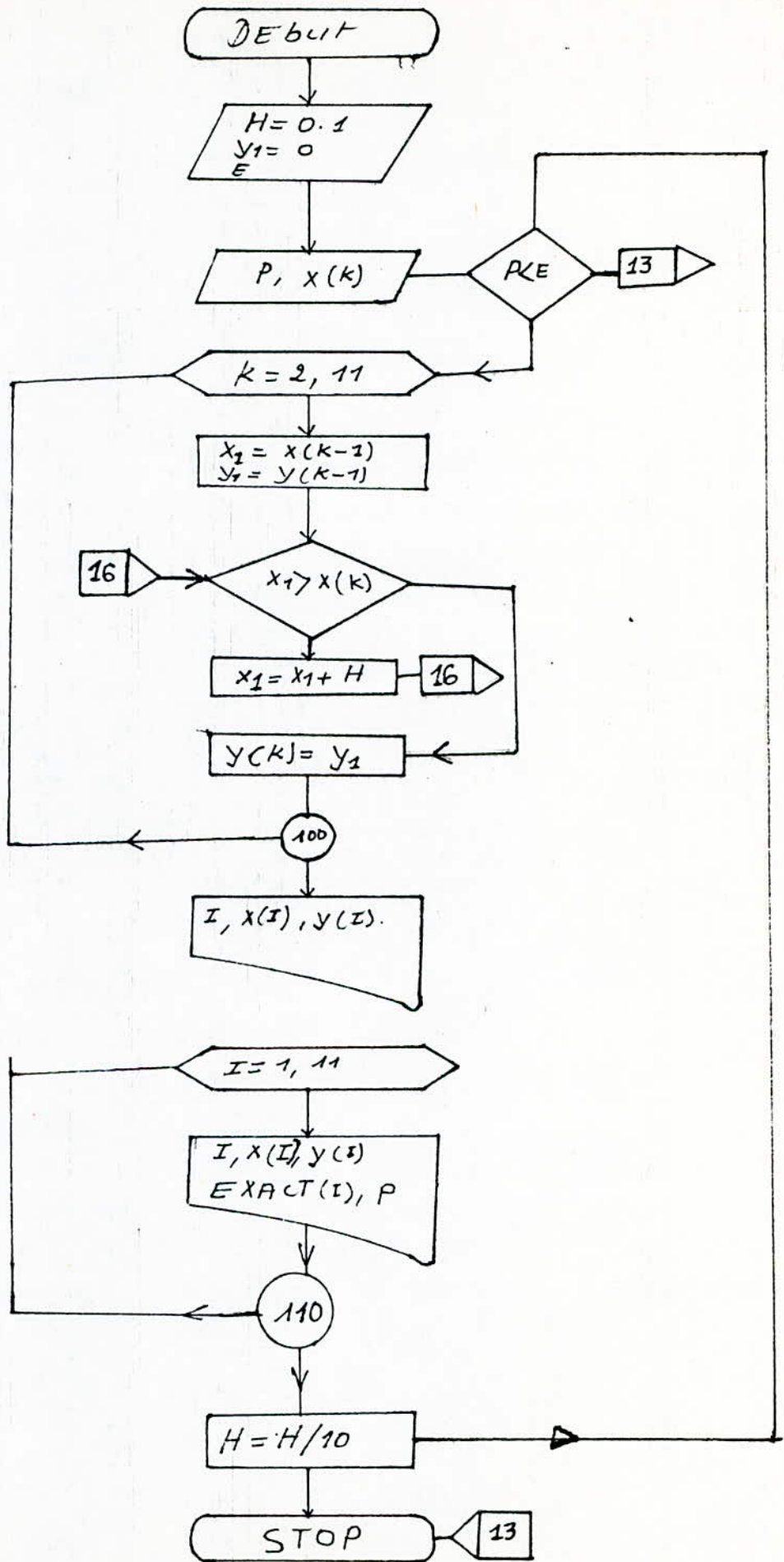
$$y_1 = y_0 + (h/6)(u_0 + w_0 + 4v_0)$$

Cette forme semble moins encombrante et plus claire. Nous allons appliquer ces deux méthodes pour une équation dont la primitive est connue afin de pouvoir les tester.

Prenons comme exemple la fonction:

$$y(x) = \exp(x) - x - 1$$

Nous cherchons la solution pour x compris entre 0 et 1.



```

program diff
dimension x(11),y(11),exact(11)
data x/.0,.1,.2,.3,.4,.5,.6,.7,.8,.9,1./
h=0.1
do 2 i=1,11

2  exact(i)=exp(x(i))-x(i)-1
   y1=.0
   print*, 'entrez l ordre de precisoin voulu'
   read*,e
   p=10
10  if (p.le.e) go to 13
   do 100 k=2,11
   x1=x(k-1)
   y1=y(k-1)
16  if(x1.ge.x(k)) go to 14
   x1=x1+h
   y1=y1+h*(x1+y1)
   go to 16
14  y(k)=y1
100 continue

c  OPEN(UNIT=11,FILE='DIFR.DAT',STATUS='NEW')
   impression des resultats pour differentes valeurs de h
   write(11,18) h
18  format('1',///,10x,'tableau de resultats pour h=',f8.7)
   write(11,20)
20  FORMAT(10X,36(1H-))
   WRITE(11,22)
22  FORMAT(10X,51(1H-))
   WRITE(11,24)
24  FORMAT(10X,1H!,2X,'I',2X,1H!,3X,4HX(I),3X,1H!,3X,4HY(I),3X,1H!,
1  1X,8HEXACT(I),1X,1H!,2X,6HERREUR,2X,1H!)
60  WRITE(11,22)
   DO 110 I=1,11
   WRITE(11,30) I,X(I),Y(I),EXACT(I),abs(Y(I)-EXACT(I))
30  FORMAT(10X,1H!,1X,I2,2X,1H!,4(1X,F8.6,1X,1H!))
   WRITE(11,22)
110 CONTINUE
   H=H/10
   P=ABS(Y(10)-EXACT(10))
   GO TO 10
13  STOP
   END

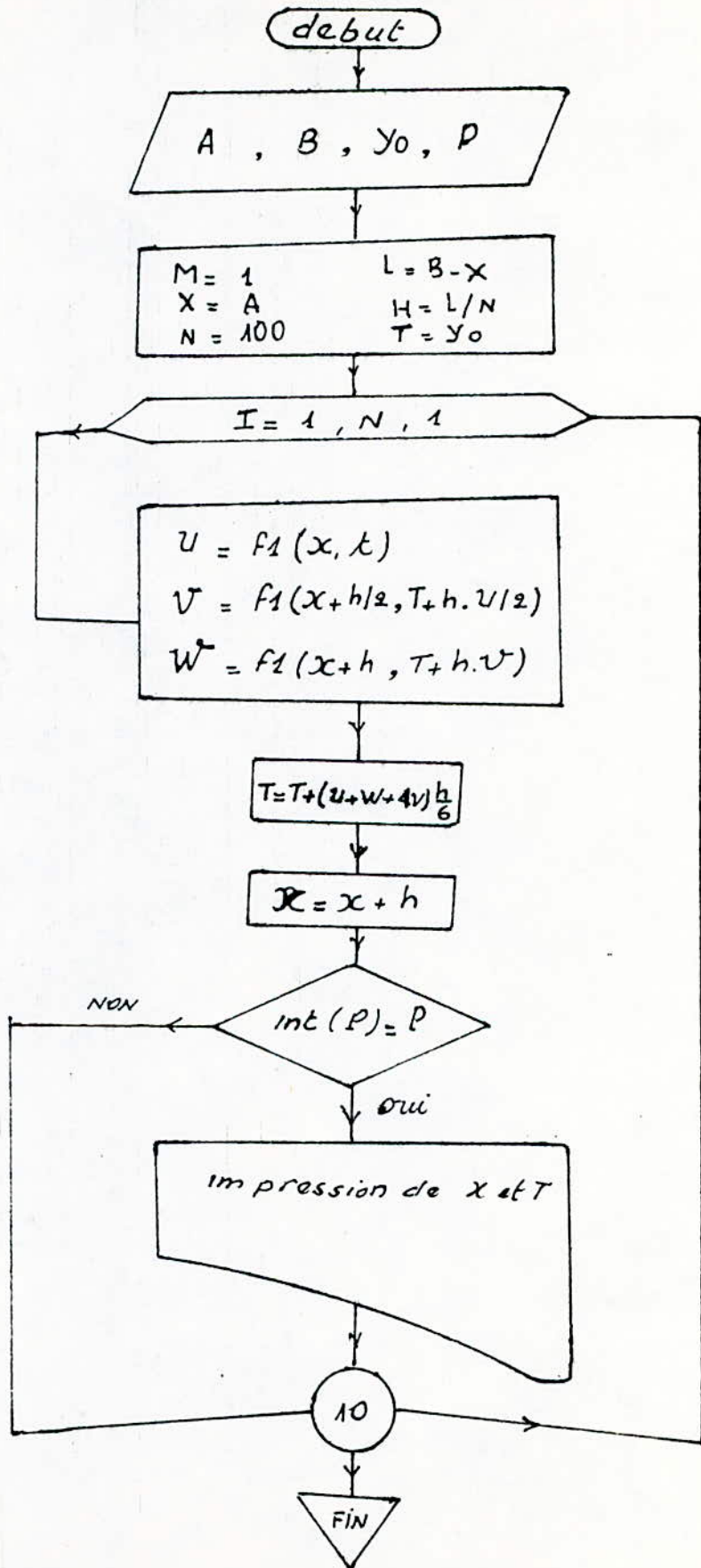
```

tableau de resultats pour h=.1000000

I	X(I)	Y(I)	EXACT(I)	ERREUR
1	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
2	0.100000	0.010000	0.005171	0.004829
3	0.200000	0.031000	0.021403	0.009597
4	0.300000	0.064100	0.049859	0.014241
5	0.400000	0.110510	0.091825	0.018685
6	0.500000	0.171561	0.148721	0.022840
7	0.600000	0.248717	0.222119	0.026598
8	0.700000	0.343589	0.313753	0.029836
9	0.800000	0.457948	0.425541	0.032407
10	0.900000	0.593743	0.559603	0.034139
11	1.000000	0.753117	0.718282	0.034835

tableau de resultats pour h=.0001000

I	X(I)	Y(I)	EXACT(I)	ERREUR
1	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
2	0.100000	0.005176	0.005171	0.000005
3	0.200000	0.021413	0.021403	0.000010
4	0.300000	0.049909	0.049859	0.000050
5	0.400000	0.091931	0.091825	0.000106
6	0.500000	0.148905	0.148721	0.000184
7	0.600000	0.222325	0.222119	0.000206
8	0.700000	0.313982	0.313753	0.000229
9	0.800000	0.425794	0.425541	0.000253
10	0.900000	0.559882	0.559603	0.000279
11	1.000000	0.718588	0.718282	0.000306



Programme de la méthode de Runge

```

c   program re
    *****
    y0(x)=exp(x)-x-1
    y1(x,y)=y0(x)+x
    write(3,301)
301 format('1',10x,'methode de Runge',///)
    print*, 'faire entrer les valeurs de a,b,y0,n'
    read*,a,b,y,n
    open(unit=3,file='re.dat',status='new')
    write(3,302)a,b,y,n
302 format(5x,3F8.2,15,///)
    x=a
    h=(b-a)/float(n)
    t=y
    do 2 i=1,n
    u=y1(x,t)
    v=y1(x+h/2.,t+h*u/2.)
    w=y1(x+h,t+h*v)
    t=t+h*(u+w+4*v)/6
    x=x+h
    r=i/10.
    if(r.eq.int(r)) then
    write(3,*)x,t
    end if
2   continue
    x=1
    p=y0(x)
    b=abs(p-t)
    write(3,*) b
    stop
    end

```

Resultats

a	b	y0	n
0.00	1.00	0.00	100
9.9999994E-02		5.1709204E-03	
0.2000000		2.1402759E-02	
0.3000000		4.9858820E-02	
0.3999999		9.1824710E-02	
0.4999998		0.1487213	
0.5999997		0.2221188	
0.6999996		0.3137526	
0.7999995		0.4255408	
0.8999994		0.5596029	
0.9999993		0.7182815	

L'erreur comise par la méthode est de l'ordre de: 2.3841858E-07

CONCLUSION

On constate que pour le meme nombre d'itérations(100 itérations) la précision obtenue par la méthode de RUNGE est beaucoup plus grande que celle obtenue par la méthode grossière d'EULER. De point de vue précision, la méthode d'EULER est limité en elle même car, a un certain ordre donné, l'erreur de la méthode est supérieure a l'erreur imposée dans les calculs. Cela se voit facilement si on introduit dans le programme une précision supérieur à 10^{-4}

VII SYSTEME D'EQUATIONS DIFFERENTIELLES NON LINEAIRES

 DU PREMIER ORDRE

Nous avons à résoudre un système du type :

$$dy/dx=f(x,y,z)$$

$$dz/dx=g(x,y,z)$$

Le système est sous déterminé car, il contient trois inconnues et deux équations seulement, donc la résolution analytique du problème est impossible. Seule la méthode numérique est applicable. Nous supposons que les conditions nécessaires pour avoir des solutions uniques pour y et z sont vérifiées. Puisque la méthode de RUNGE nous a donné une meilleure précision, nous l'appliquerons donc pour résoudre ce système.

Conduite du calcul :

Nous aurons à calculer successivement :

$$U_0 = f(x_0, y_0, z_0)$$

$$R_0 = g(x_0, y_0, z_0)$$

$$V_0 = f(x_0+h/2, y_0+h \cdot U_0/2, z_0)$$

$$S_0 = g(x_0+h/2, y_0, z_0+h \cdot R_0/2)$$

$$W_0 = f(x_0+h, y_0+h \cdot V_0, z_0+h \cdot R_0)$$

$$T_0 = g(x_0+h, y_0, z_0+h \cdot S_0)$$

ensuite :

$$y_1 = y_0 + h \cdot (U_0 + W_0 + 4V_0) / 6$$

$$z_1 = z_0 + h \cdot (R_0 + T_0 + 4S_0) / 6$$

puis, on calcule au point x_2 les valeurs de y_2 et z_2 à partir de y_1, z_1 et ainsi de suite.

Application au calcul de réacteur :

Le calcul d'un réacteur chimique quelconque exige la solution des équations différentielles donnant :

-le bilan massique

-le bilan énergétique

-le bilan des quantités des mouvements

Pour la plupart des réacteurs, on néglige le bilan de quantité de mouvement

Cas d'un réacteur tubulaire idéal (régime adiabatique)

En établissant les bilans thermique et massique, on obtient le système d'équations suivant:

$$dz/dt = k_0(1-z)\exp(-E/RT)$$

$$dT/dt = (C_{A0}(-\Delta H_r) / \rho_0 C_p) \cdot dz/dt$$

Application:

Soit la réaction d'ordre (1) qui a lieu dans un réacteur tubulaire:



Quel est le temps et le volume nécessaires pour pouvoir atteindre un taux de conversion de 80%.

Données:

$$Z_{MAX} = 80\%$$

$$T_0 = 150$$

$$K_0 = 1.389 \text{ H}^{-1}$$

$$\Delta H_r = -92.1 \text{ KJ/mole}$$

$$\rho_0 = 1 \text{ Kg/l}$$

$$E = 72,6 \text{ KJ/mole}$$

$$C_p = 4,2 \text{ KJ/mole}$$

$$R_A = 0.06 \text{ m}$$

$$C_{A0} = 2$$

$$R = 8.32 \text{ KJ/mole}$$


```

program dim
*****
definition des parametres
*****
**XK:constante de vitesse de la reaction de premier ordre[1/temps] **
**ro:densite initiale du reactif [kg/metre cube] **
**ra:rayon de la section du reacteur tubulair[metre] **
**r:constante des gaz parfaits=8.314[j/mole.0k] **
**h:le coefficient de convection[j/m2.h.0k] **
**tex:temperature externe[0k] **
**hr:entalpie de reaction **
**to:temperature d'initialisation de reaction [0k] **
**co:concentration des reactifs[mole/metre cube] **
**pt:l'incrementation du temps **
**e:energie d'activation **
*****
f(z,t,xk,e,r)=xk*(1-z)*exp(-e/r/t)
g(z,t,xk,e,r,a)=a*f(z,t,xk,e,r)
open(unit=34,file='dimd.dat',status='old')
open(unit=44,file='dimr.dat',status='new')
read(34,*)z,t,xk,e,r,h,r0,cp,ra,c,hr
pt=0.05
a=-92.1*2/4.2
12 z1=pt*f(z,t,xk,e,r)
t1=pt*g(z,t,xk,e,r,a)
z2=pt*f(z+z1/2,t+t1/2,xk,e,r)
t2=pt*g(z+z1/2,t+t1/2,xk,e,r,a)
z3=pt*f(z+z2/2,t+t2/2,xk,e,r)
t3=pt*g(z+z2/2,t+t2/2,xk,e,r,a)
z4=pt*f(z+z3,t+t3,xk,e,r)
t4=pt*g(z+z3,t+t3,xk,e,r,a)
z=z+(z1+2*z2+2*z3+z4)/6
t=t+(t1+2*t2+2*t3+t4)/6
te=te+pt
print*, 'z=',z, 't=',t, 'te=',te
if(z.lt.0.8) go to 12
stop
end

```


Resultats de l'execution

```

-----
z= 6.6150419E-02t= 597.0988 te= 5.0000001E-02
z= 0.1279209 t= 594.3898 te= 0.1000000
z= 0.1856018 t= 591.8600 te= 0.1500000
z= 0.2394645 t= 589.4978 te= 0.2000000
z= 0.2897620 t= 587.2919 te= 0.2500000
z= 0.3367307 t= 585.2319 te= 0.3000000
z= 0.3805912 t= 583.3083 te= 0.3500000
z= 0.4215493 t= 581.5120 te= 0.4000000
z= 0.4597975 t= 579.8346 te= 0.4500000
z= 0.4955152 t= 578.2681 te= 0.5000001
z= 0.5288700 t= 576.8053 te= 0.5500001
z= 0.5600184 t= 575.4392 te= 0.6000001
z= 0.5891064 t= 574.1635 te= 0.6500001
z= 0.6162705 t= 572.9722 te= 0.7000001
z= 0.6416380 t= 571.8596 te= 0.7500001
z= 0.6653280 t= 570.8206 te= 0.8000001
z= 0.6874512 t= 569.8503 te= 0.8500001
z= 0.7081116 t= 568.9442 te= 0.9000002
z= 0.7274058 t= 568.0980 te= 0.9500002
z= 0.7454242 t= 567.3078 te= 1.000000
z= 0.7622513 t= 566.5698 te= 1.050000
z= 0.7779658 t= 565.8806 te= 1.100000
z= 0.7926415 t= 565.2370 te= 1.150000
z= 0.8063468 t= 564.6359 te= 1.200000

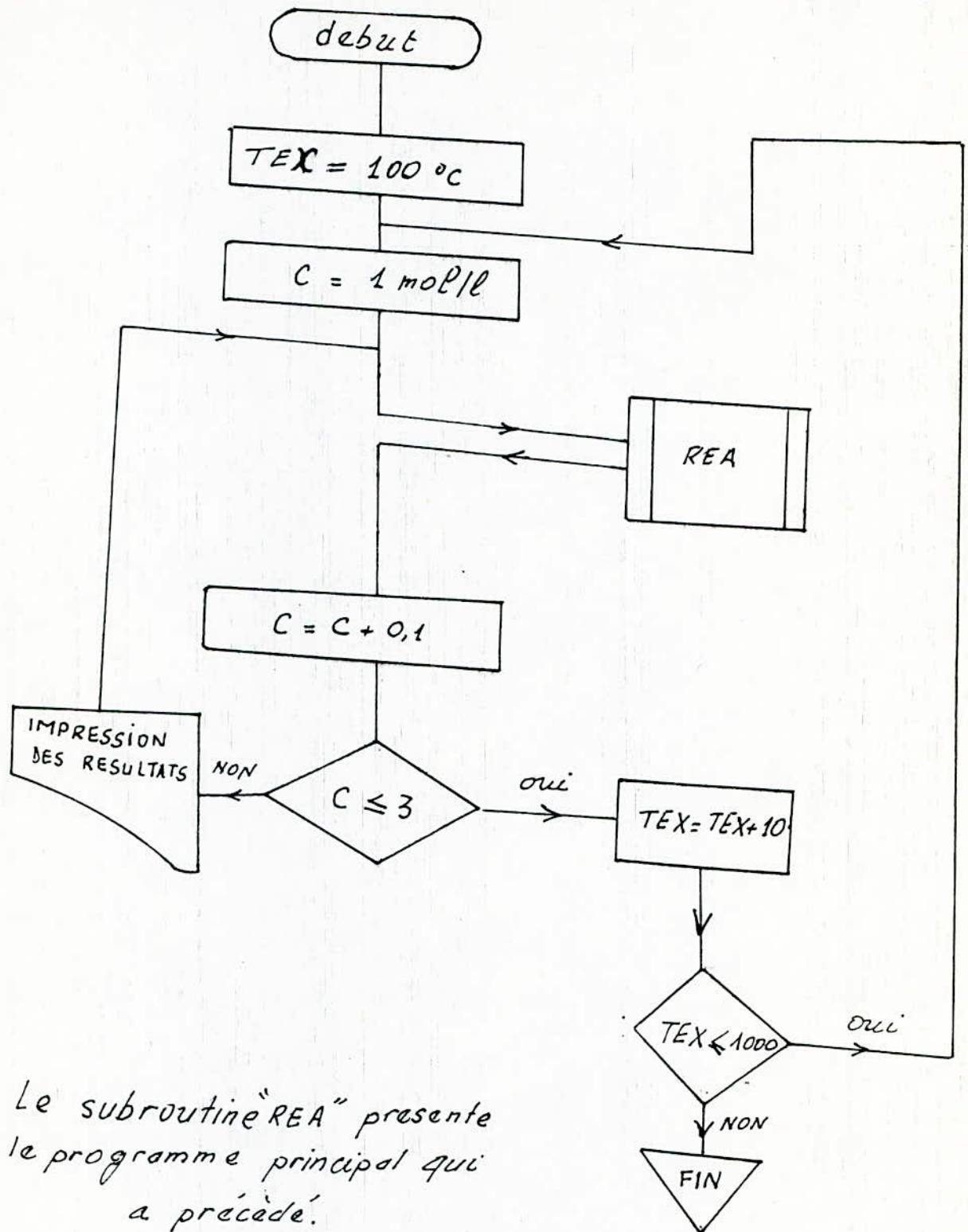
```

Conclusion

On a traité le problème pour un cas adiabatique. Dans le cas non adiabatique, le terme d'échange de chaleur avec le milieu extérieur n'est plus nul. On pourra en tenir compte dans les calculs en introduisant dans le programme juste après l'expression: (A), le terme: B tel que:

$$B = 2 \cdot H \cdot (T_{EX} - T) / (R_0 \cdot C_P \cdot R_A)$$

en n'oubliant pas d'initialiser Tex.



VIII) EQUATIONS AUX DERIVEES PARTIELLES

Toutes les méthodes classiques des résolutions des équations aux dérivées partielles par la méthode des différences finies sont basées sur l'approximation d'un opérateur différentiel par un opérateur aux différences finies.

Soit une fonction $f(x,y)$ définie et continuellement différentiable autour du point (x,y) . Le développement en série de Taylor de la fonction autour de ce point donne :

$$f(x+\Delta x, y) = f(x, y) + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right) + \dots$$

$$f(x-\Delta x, y) = f(x, y) - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right) + \dots$$

en additionnant ces deux relations et en divisant par Δx^2 , on aura :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x+\Delta x, y) - 2f(x, y) + f(x-\Delta x, y)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad : \text{ est l'opérateur différence du } 2^{\text{ème}} \text{ ordre.}$$

de même pour y , on obtient :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{f(x, y+\Delta y) - 2f(x, y) + f(x, y-\Delta y)}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2)$$

L'opérateur différence première s'écrit :

$$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x} = \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x}$$

VIII-1) Résolution de l'équation de Laplace:

(Détermination de la répartition de température dans les parois d'un four)

L'équation bidimensionnelle de Laplace donnant la distribution de température dans le plan (x,y) s'écrit :

$$\frac{\partial^2 T(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x, y)}{\partial y^2} = 0 \quad \text{avec:} \quad \begin{array}{l} T=T_I \text{ à l'intérieur du four} \\ T=T_E \text{ à l'extérieur du four} \end{array}$$

Application de la méthode de relaxation :

Principe de la méthode :

Soit à résoudre ce système :

$$\begin{aligned} -2T_1 + T_2 + (1/4)R &= R_1 = 0 \\ T_1 - 2T_2 + T_3 + (1/2)R &= R_2 = 0 \\ T_2 - 2T_3 + (3/4)R &= R_3 = 0 \end{aligned}$$

R_1, R_2, R_3 sont les résidus.

la technique fondamentale de relaxation consiste à faire varier une température puis l'autre et ainsi de suite en faisant chaque fois le calcul des résidus dans le but de les réduire à zéro. Cette méthode est d'usage limité en elle même car, les valeurs résiduelles ne s'annulent pas complètement. Cependant il y a diverses améliorations de la méthode, citons par exemple :

La relaxation en bloc :

Cette méthode consiste à faire varier plusieurs variables en même temps d'une même quantité :

$$\Delta T_1 = \Delta T_2 = \Delta T_3 = 1$$

La relaxation en groupe :

C'est une extension de la méthode précédente. On fait varier plusieurs variables en même temps de différentes quantités :

$$\begin{aligned} \Delta T_1 &= 1 \\ \Delta T_2 &= 2 \\ \Delta T_3 &= 3 \end{aligned}$$

La relaxation proportionnelle :

Après plusieurs étapes de relaxation, on constate que la variation totale représentant la valeur résiduelle suit un certain modèle. Ainsi, si on ajuste l'ensemble de variations par un coefficient et que nous sommes à leurs variations antérieures les valeurs résiduelles, celles-ci vont se trouver en position favorable.

Nous appliquons dans notre cas la relaxation proportionnelle en groupe.

On prend :

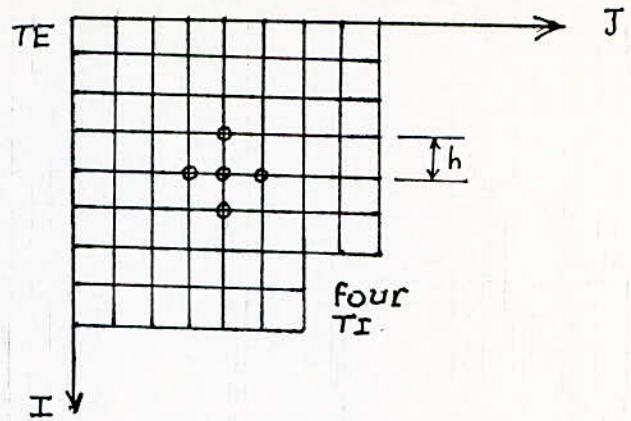
$$\Delta T_i = 0,25 \cdot OM \cdot R_i$$

avec $OM = 1,3$

$$T_I = 1500 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$T_E = 50 \text{ } ^\circ\text{C}$$

On suppose que les dimensions de la plaque permettent le maillage choisi.



On représente souvent l'approximation des opérateurs différentiels par une molécule de calcul

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \left\{ \begin{array}{c} \textcircled{0} \\ \textcircled{+1} - \textcircled{-2} - \textcircled{+1} \\ \textcircled{0} \end{array} \right\} + o(h^2)$$

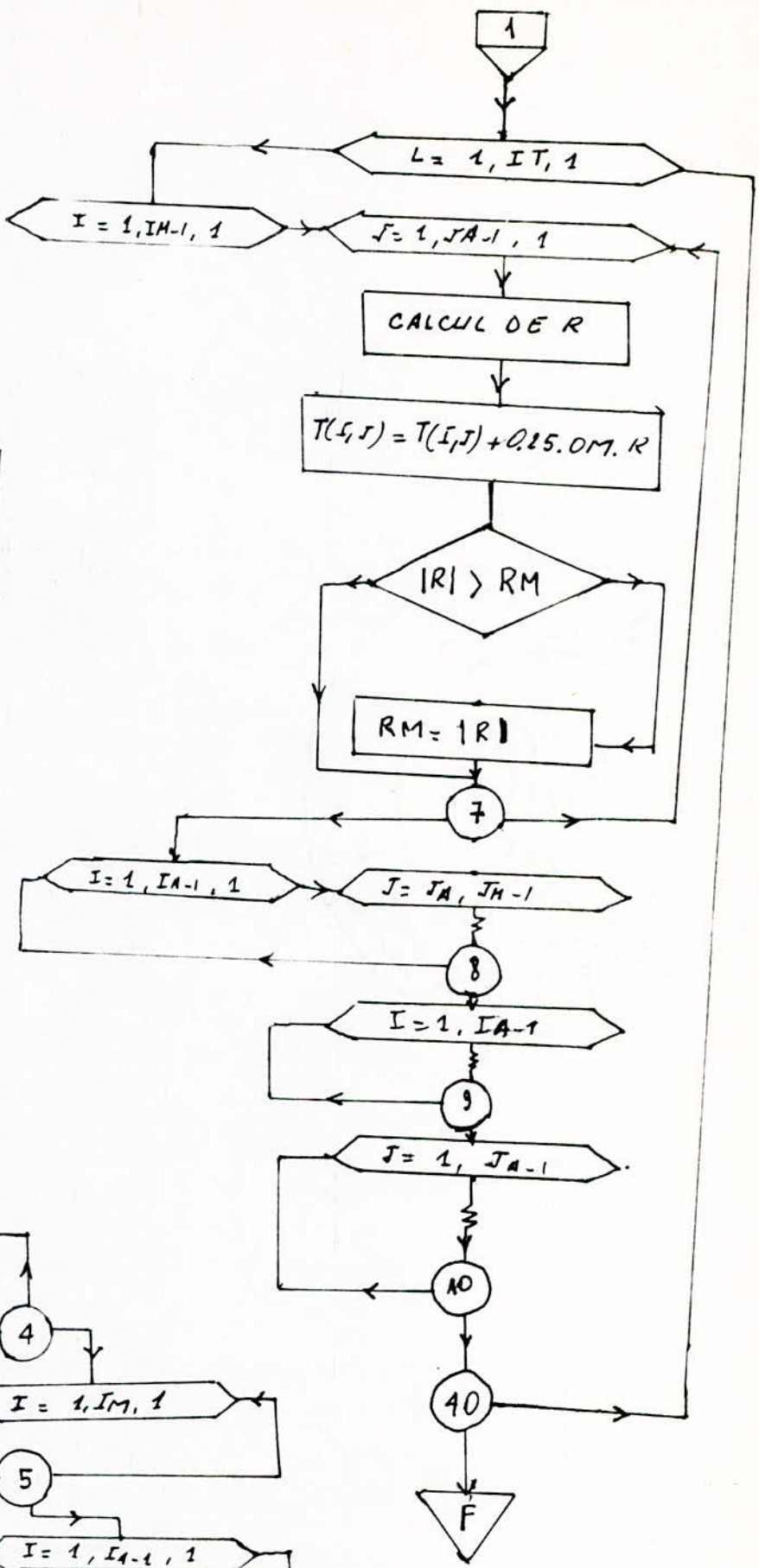
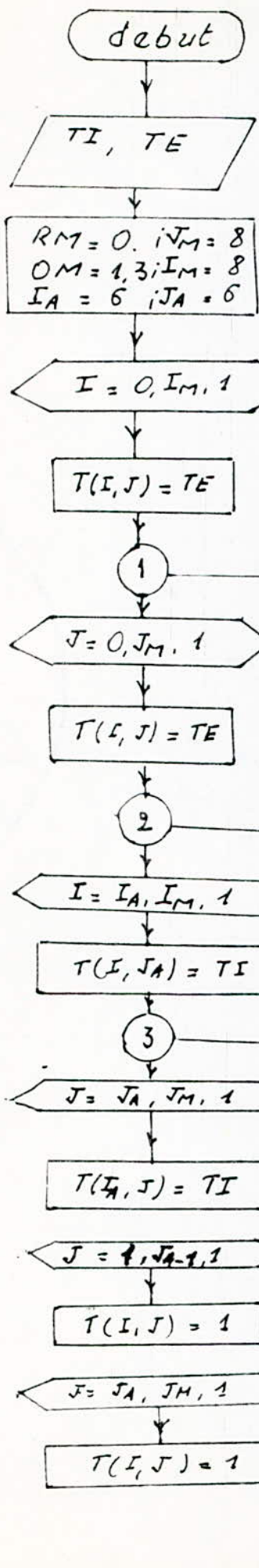
$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} \left\{ \begin{array}{c} \textcircled{-1} \\ \textcircled{0} - \textcircled{-2} - \textcircled{0} \\ \textcircled{+1} \end{array} \right\} + o(h^2)$$

d'où :

$$\frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T(x,y)}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} \left\{ \begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ \textcircled{+1} - \textcircled{-4} - \textcircled{+1} \\ \textcircled{+1} \end{array} \right\} + o(h^2)$$

ou bien :

$$T(i+1,j) + T(i,j+1) - 4T(i,j) + T(i-1,j) + T(i,j-1) = 0$$



```

program trans
dimension t(0:10,0:10)
open(unit=13,file='da.dat',status='new')
print*, 'faire entrer la temp. ambiante (te) et la temp. du four (ti)'
read*, te, ti
rm=0.
om=1.3
jm=8
im=8
ia=6
ja=6
it=40
c  initialisation des temperatures
do 33 i=0,im
t(i,0)=te
33 continue
do 2 j=0,jm
t(0,j)=te
2 continue
do 3 i=ia,im
t(i,ja)=ti
3 continue
do 4 j=ja,jm
t(ia,j)=ti
4 continue
do 5 i=1,im
do 5 j=1,ja-1
t(i,j)=1
5 continue
do 6 i=1,ia-1
do 6 j=ja,jm
t(i,j)=1
6 continue
c calcul des temperatures a l'interieure de la plaque
do 40 l=1,it
do 7 i=1,im-1
do 7 j=1,ja-1
r=t(i+1,j)+t(i-1,j)+t(i,j+1)+t(i,j-1)-4*t(i,j)
t(i,j)=t(i,j)+.25*om*r
if(abs(r).gt.rm) then
rm=abs(r)
end if
7 continue
do 8 i=1,ia-1
do 8 j=ja,jm-1
r=t(i+1,j)+t(i-1,j)+t(i,j-1)+t(i,j+1)-4*t(i,j)
t(i,j)=t(i,j)+.25*om*r
if(abs(r).gt.rm) then
rm=abs(r)
end if
8 continue
do 9 i=1,ia-1
r=t(i+1,jm)+t(i-1,jm)+2*t(i,jm-1)-4*t(i,jm)

```



```

t(i,jm)=t(i,jm)+.25*om*r
if(abs(r).gt.rm) then
rm=abs(r)
end if
9 continue
do 10 j=1,ja-1
r=2*t(im-1,j)+t(im,j-1)+t(im,j+1)-4*t(im,j)
t(im,j)=t(im,j)+.25*om*r
if(abs(r).gt.rm) then

rm=abs(r)
end if
10 continue
40 continue
do 36 i=0,ia
36 write(13,100)(t(i,j),j=0,jm)
100 format(10(f6.1,2x))
do 37 i=ia+1,im
37 write(13,100)(t(i,j),j=0,ja)
stop
end

```

Resultats de l'execution du programme

50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0	50.0
50.0	80.9	111.9	142.5	172.0	198.6	219.8	233.3	237.9
50.0	111.9	174.1	236.3	296.9	352.5	397.3	425.6	435.1
50.0	142.5	226.3	331.6	426.9	517.1	591.5	636.6	651.3
50.0	172.0	296.9	426.9	562.2	697.4	815.0	877.9	896.9
50.0	198.6	352.5	517.1	697.4	895.4	1093.4	1163.0	1180.7
50.0	219.8	397.3	591.5	815.0	1093.4	1500.0	1500.0	1500.0
50.0	233.3	425.6	636.6	877.9	1163.0	1500.0	.----	
50.0	237.9	435.1	651.3	896.9	1180.7	1500.0	!four!	

VIII-2) Résolution de l'équation de la chaleur :

On va déterminer la répartition de température dans les parois d'une plaque plane en fonction du temps.

L'équation de la chaleur s'écrit :

$$\Delta \theta = D \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right) \quad \text{avec : } D : \text{coefficient de diffusion thermique (s/cm}^2\text{)}$$

$$\Delta : \text{Laplacien} \quad \text{(s/cm}^2\text{)}$$

dans un plan (x,t), l'équation s'écrira :

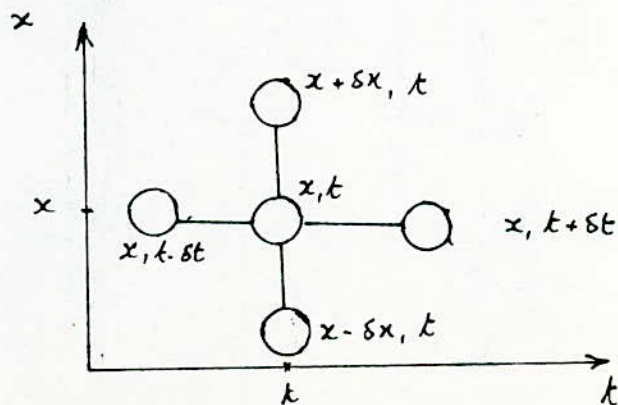
$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = D \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)$$

Opérateur différentiel du 2eme ordre :

$$\left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \right) = \frac{1}{\delta x^2} \left[\begin{array}{c} \textcircled{+1} \\ \textcircled{-2} \\ \textcircled{+1} \end{array} \right] + o(\delta x^2)$$

Opérateur différentiel du 1er ordre :

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial t} \right)_{x,t} \approx \frac{1}{\delta t} \left(\textcircled{0} - \textcircled{-1} - \textcircled{+1} \right) + o(\delta t)$$



$$\theta(x, t+\delta t) = \theta(x, t) + (\delta t / D \Delta x^2) [\theta(x+\delta x, t) + \theta(x-\delta x, t) - 2\theta(x, t)]$$

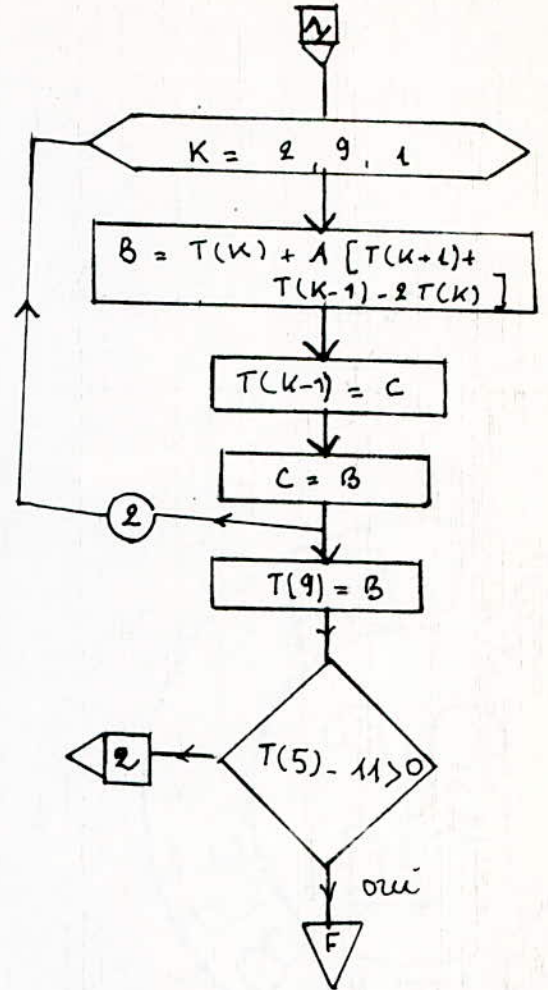
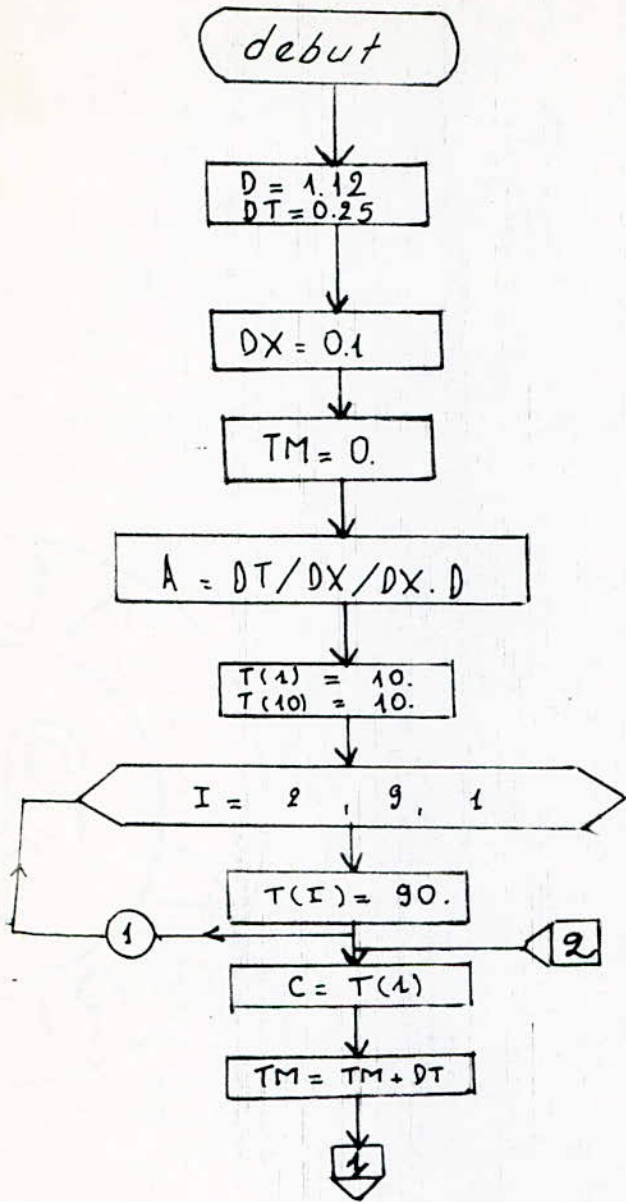
Au temps $t=0$, $\theta(x, t)$ est connue en tout point du maillage de la plaque.
Au temps $t+\delta t$, nous calculons la valeur de $\theta(x, t+\delta t)$ par la relation ci-dessus et ainsi de suite.

Application :

Etude du refroidissement d'une plaque plane :

Données :

épaisseur de la plaque $L = 10$ cm
température initiale de la plaque $T = 90$ °C
à $t=0$, on la fait plonger dans un réservoir bien agité et assez grand à $T = 10$ °C
 $D = 1,12$ s/cm².




```

c   etude de refroidissement d'une plaque homogene:
    dimension t(10)
    open(unit=3,file='trand.dat',status='new')
    write(3,300)
300 format('1',5x,'equation de la chaleur.',///)
    d=1.12
    dt=0.25
    dx=1.
    tm=0.
    a=dt/dx/dx*d
    t(1)=10
    t(10)=10
    do 1 i=2,9
    t(i)=90
4   c=t(i)
    tm=tm+dt
    do 2 k=2,9
    b=t(k)+a*(t(k+1)+t(k-1)-2.*t(k))
    t(k-1)=c
2   c=b
    t(9)=b
    write(3,301)tm
301 format(//,10X,'temps=',f5.2,///)
    write(3,302)t
302 format(1x,10F10.2)
    if(t(5)-11)3,4,4
3   stop
    end

```

Resultats de l'execution:

temps= 0.25									
10.00	67.60	90.00	90.00	90.00	90.00	90.00	90.00	67.60	10.00
temps= 0.50									
10.00	57.74	83.73	90.00	90.00	90.00	90.00	83.73	57.74	10.00
temps=0.75									
10.00	51.65	78.21	88.24	90.00	90.00	88.24	78.21	51.65	10.00
temps= 1.00									
10.00	47.42	73.58	85.93	89.51	89.51	85.93	73.58	47.42	10.00
.....									
temps=32.75									
10.00	10.38	10.72	10.97	11.10	11.10	10.97	10.72	10.38	10.00
temps=33.00									
10.00	10.37	10.70	10.94	11.07	11.07	10.94	10.70	10.37	10.00
temps=33.25									
10.00	10.36	10.67	10.91	11.03	11.03	10.91	10.67	10.36	10.00
temps=33.50									
10.00	10.35	10.65	10.87	10.99	10.99	10.87	10.65	10.35	10.00

Remarque

On a presente seulement les 4 premieres et les 4 dernieres valeurs du tableau de resultats .Le temps est donne en (s)

IX CALCUL DES EQUILIBRES LIQUIDES_VAPEURS

Tout système en équilibre peut être caractérisé par les paramètres suivants:

- pression
- température
- composition de phases
- quantités de phases

Mais tout ces paramètres ne sont pas indépendants: il suffit de s'en fixer deux pour définir l'équilibre.

Les phénomènes d'équilibres peuvent avoir soit un aspect qualitatif, lorsqu'on s'intéresse seulement à la détermination des compositions en équilibre, soit un aspect quantitatif qui dérive directement du précédent en établissant le bilan de matière de l'opération.

Problème

Données:

alimentation(F) (à son point de bulle):

- C5=50% moles
- C6=30% moles
- C7=20% moles

distillat(D)

C5=99.5% moles

résidu(W)

C5=1% moles

Après simples calculs, on trouve pour F=100 moles et R=4,

D=49.75 moles
 W=50.25 moles

Pour le bas de la colonne:

$$L' = V + W$$

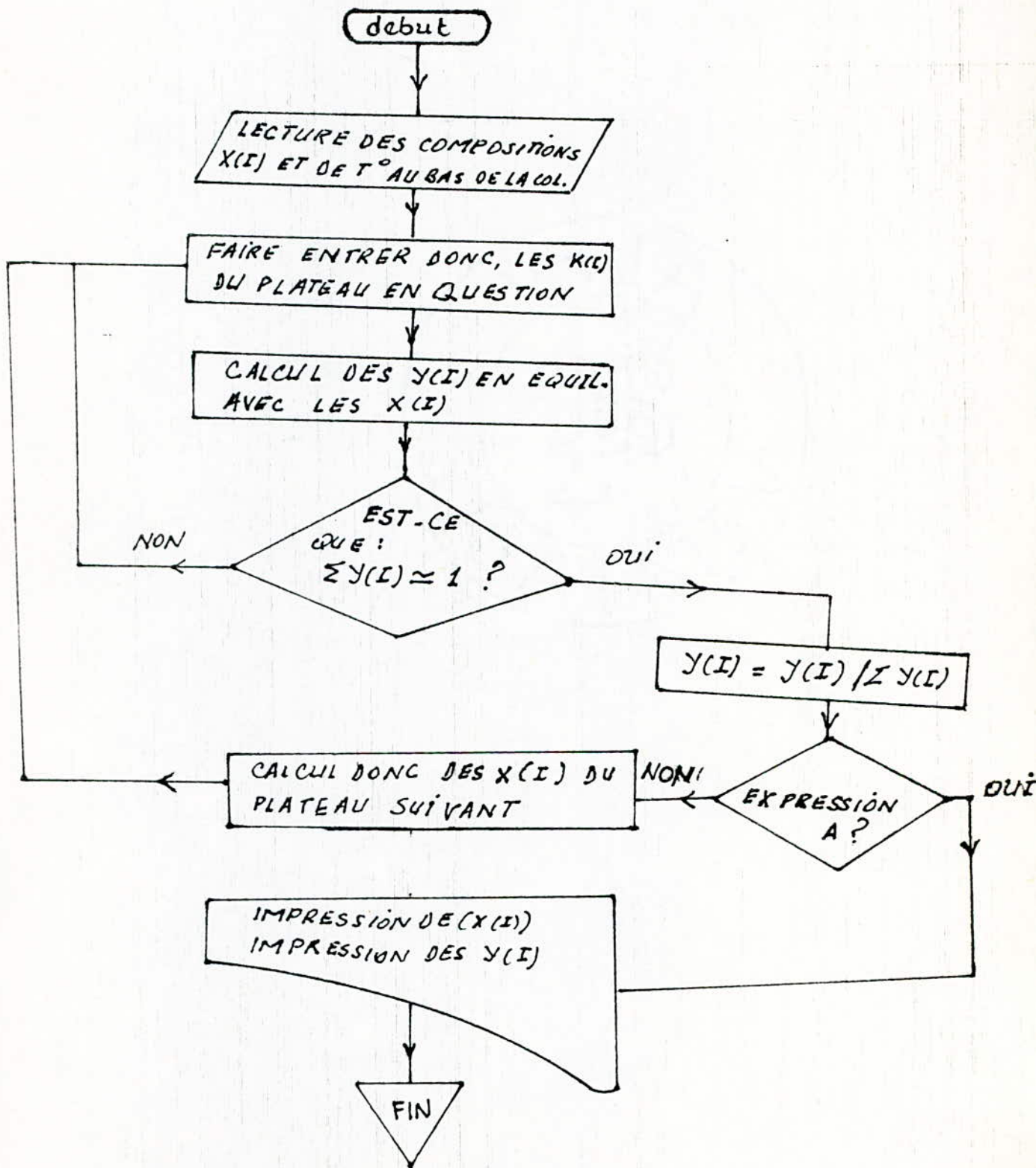
$$L' x_{n+1} = V y_n + W x_w$$

$$\text{d'où } x_{n+1} = \frac{V}{L'} y_n + \frac{W}{L'} x_w$$

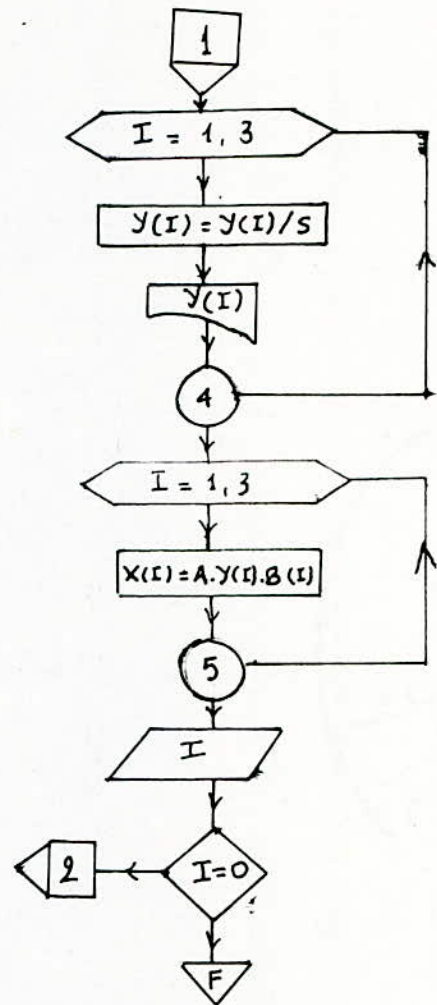
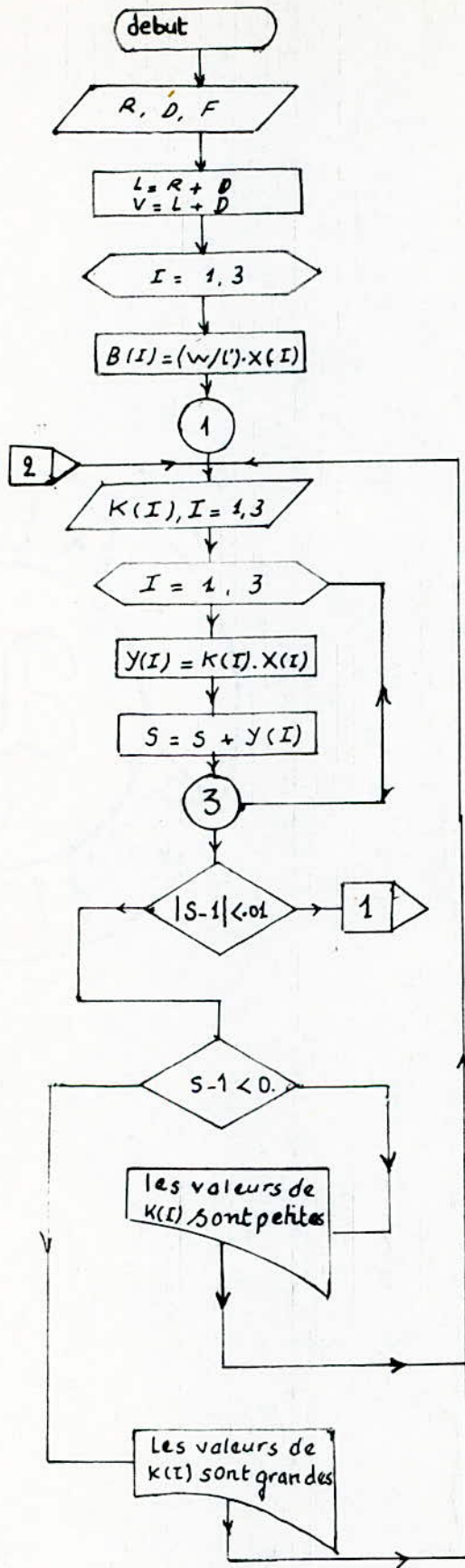
$y_{n+1} = k \cdot x_{n+1}$: formule reliant les deux phases en équilibre

Remarque

pour ce programme on a laissé le soin à l'utilisateur de lire sur tables ou sur abaques les valeurs des constantes d'équilibres (ki) et de les introduire ensuite dans le programme



EXPRESSION A: "Est-ce les $y(i)$ obtenus sont suffisamment proches des compositions d'alimentation"




```

program equ
dimension x(3),b(3),k(3),y(3)
real l,lr
c r:taux de reflux
c d:taux de distillat
c f:alimentation
c w:residu
print*, 'faire entrer:r.d.f.w'
read*,r,d,f,w
print*, 'faire entrer les compositions de C5,C6,C7 dans le bouilleur'
read*,(x(i),i=1,3)
l=d+r
v=l+D
lr=v+w
a=v/lr
do 1 i=1,3
b(i)=(w/lr)*x(i)

continue
m=0.
10 print*, 'faire entrer les k(i) du plateau en question a la Tp.choisie'
read*,(k(i),i=1,3)
s=0.
c print*, 'resultats du plateau no:',m
write(6,100),m
100 format(10x,'resultats pour le plateau no:',i1)
write(6,101)
101 format(10x,31(1h*))
do 3 i=1,3
y(i)=k(i)*x(i)
s=s+y(i)
3 continue
if(abs(s-1).gt.0.002) then
go to 30
end if
write(6,106) s
106 format(10X,'s=',f4.3)
do 4 i=1,3
y(i)=y(i)/s
write(6,102) i,y(i)
102 format(10x,'y',i1,'=',f4.3)
4 continue
do 5 i=1,3
x(i)=a*y(i)+b(i)
write(6,103) i,x(i)
103 format(10X,'x',i1,'=',f4.3)
5 continue
print*, 'vouler-vous continuer?(0,1)'
read*,i
if(i.eq.0) then
go to 20
end if
m=m+1
go to 10
30 if((s-1).lt.0) then
print*, 'les valeurs de k(i) sont petites essayer pour des '
print*, 'temperatures plus grandes'
go to 10
end if
print*, 'les valeurs de k(i) sont grandes essayer pour des'
print*, 'temperatures plus petites'
go to 10
20 stop
end

```

La simulation de procedes chimiques par les methodes d'analyse numerique presente un outil essentiel de recherche pour l'ingenieur. L'application de ces methodes en informatique permet l'organisation rapide des travaux et l'optention de la solution optimale dans les plus brefs delais.

La resolution numerique des equations differentielles et des equations aux derivees partielles presentent un domaine d'etude tres interessant. Tout regime transitoire est decrit par ce genre d'equations. La resolution de certaines equations aux derivees partielles necessitent des connaissances profondes en analyse mathematique.

Le domaine d'analyse des procedes concerne les categories suivantes:

- _Le transfert de matiere.
- _Le transfert de chaleur.
- _Le transfert de quantite de mouvement dans les ecoulements laminaires.
- _La cinetique des reactions.
- _Les procedes dynamiques et de controles.

L'etude analytique concerne:

- _Recherche et developpement des procedes.
- _Conception des procedes.
- _Amelioration des operations des procedes.

La description detaillee d'un systeme de procedes chimiques conduit souvent a l'obtention d'une serie d'equations complexes. Bien qu'elles peuvent etre resolues, il est conseille d'utiliser son jugement professionnel pour reduire les equations a une serie non complexe et donner ensuite une solution valable.

Un aspect important de la modelisation est l'arrangement des equations. Il a ete trouve par experience que si les equations sont arrangees a une sequence logique, le modele d'ordre est stable. Cette sequence est appelee: "l'ordre naturel".

BIBLIOGRAPHIE

- | | | |
|---------------------|---|------|
| 1. H.FESS | Génie de réactions
CTZ,GMBH,Eschborn | 1983 |
| 2. F.SCHEID | Numerical analysis
Ed.Mc.Graw Hill | 1965 |
| 3. F.AYRES | Equations différentielles
Ed.Mc.Graw Hill | 1983 |
| 4. LIPSCHUTZ | Programmation fortran
Ed.Mc.Graw Hill | 1983 |
| 5. SPIEGEL | Probabilités et statistiques
Ed.Mc.Graw hill | 1983 |
| 6. A.STROHMEIR | Fortran 77
Ed.Eyrolles | 1984 |
| 7. ABOU BACKR AHMED | Programing computer in FOR 77
University of kuwait | 1985 |
| 8. H.BESTOUGEUF | La théchnique informatique
Ed. Masson | 1975 |
| 9. BOUMAHRAT | Méthodes numériques appliquées
OPU. | 1983 |
| 10. A.ENGEL | Mathématiques élémentaires d'un point de vue
algorithmique.
Cedic | 1979 |

