Tutoriel de réalisation d'une application BALTIK basée sur le logiciel TRUST

May 12, 2017

1 résumé

Ce tutoriel a comme objectif de décrire la démarche à suivre pour la réalisation d'une application BALTIK sur la base du logiciel TRUST. Pour ce faire, on choisit à titre d'exercice une équation de convection-diffusion comme problème mathématique à résoudre. Dans cette équation, la vitesse de convection et le coefficient de diffusion sont des données utilisateur.

On décrit en particulier les spécifications des développements à réaliser et on donne quelques recommandations pour résoudre cette équation de convection-diffusion.

Les développements sont ensuite décrits et réalisés dans un environnement proposé par le logiciel TRUST appelé application BALTIK. La mise en place de cet environnement est également décrit.

Deux tests de vérification des développements et de non-régression sont enfin réalisés en utilisant les outils proposés par le logiciel TRUST (genererCourbes, make check_optim).

2 Introduction

Ce tutoriel a comme objectif de décrire la démarche à suivre pour la réalisation d'une application BALTIK sur la base du logiciel TRUST. Pour ce faire, on choisit à titre d'exercice l'équation de convection-diffusion (1) comme problème mathématique à résoudre:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\overrightarrow{V}c) + \nabla \cdot (D\nabla c) = 0 \text{ sur } \Omega = [a, b] \times [c, d]$$
conditions aux limites périodiques

 $c(\overrightarrow{X},t)$: variable d'intérêt (la concentration d'une espèce, la température,...),

 $\overrightarrow{V}(\overrightarrow{X},t)$: vitesse de convection de la variable c (donnée utilisateur),

 $D(\overrightarrow{X},t)$: coefficient de diffusion de la variable c (donnée utilisateur),

a, b, c et d: les bornes du domaine de calcul en deux dimensions.

La discrétisation en espace et en temps de l'équation (1) sera réalisée avec les schémas numériques disponibles dans le logiciel TRUST [1].

Dans la section 3, nous décrivons les spécifications des développements à réaliser et nous donnons quelques recommandations pour résoudre l'équation (1).

Les développements spécifiés dans la section 3 sont décrits dans la section 4. Ces développements seront réalisés dans un environnement proposé par le logiciel TRUST appelé application BALTIK. La mise en place de cet environnement sera décrit dans cette même section 4.

La section 5 sera consacrée à la réalisés deux tests de vérification des développements et de non-régression en utilisant les outils proposés par le logiciel TRUST (genererCourbes, make check_optim).

3 Spécification

3.1 Notions

- Notion de problème : le rôle d'un problème est la résolution sur un domaine des équations qui composent le problème. Un schéma de discrétisation en temps ainsi qu'un schéma de discrétisation en espace lui sont associés.
- Notion d'équation : le rôle d'une équation est le calcul d'un ou plusieurs champs compte tenu des choix suivants:
 - un schéma de discrétisation en temps,
 - un schéma de discrétisation en espace,

- des conditions aux limites,
- des termes sources et des opérateurs.

Une équation est portée par un problème et possède une référence qui permet de remonter au problème qui la porte.

- Notion d'opérateur : les opérateurs sont des parties d'une équation. Parmi les opérateurs les plus utilisés, on cite les opérateurs de convection et de diffusion.
- <u>Notion de milieu</u>: Description du milieu fluide ou solide qu'on modélise. Le Milieu est associé au problème et aux équations. Parmi les propriétés qui caractérisent le milieu, on a:
 - la masse volumique,
 - la diffusivité,
 - la conductivité,
 - la capacité calorifique,
 - la variation de la masse volumique en fonction de la température (dilatabilité).

Dans notre cas, le problème qu'on souhaite résoudre comprend une seule équation (1). Cette équation est composée de:

- un terme instationnaire $\frac{\partial c}{\partial t}$,
- un opérateur de convection $\nabla \cdot (\overrightarrow{V}c)$,
- un opérateur de diffusion $\nabla \cdot (D\nabla c)$,
- un terme source ou puit f = 0.

3.2 Jeu de données - analyse des besoins

Dans le cadre des développements des applications basées sur le logiciel TRUST, il est recommandé de commencer les spécifications par écrire le jeu de données. La recommandation précédente est liée au fait que les mots clés du jeu données du logiciel TRUST correspondent à des objets (classes) C++ et donc commencer par le jeu de données sert, d'une part, à se mettre dans la position d'un utilisateur et, d'autre part, à définir les objets (problème, équation(s), ...) à spécifier et à développer.

Nous décrivons ci-dessous les parties de jeu de données spécifiques à notre problème:

• Déclaration du problème

On notera ce nouveau problème Probleme_Convection_Diffusion

```
Probleme_Convection_Diffusion pb
```

déclaration du problème

• Déclaration de l'équation de convection-diffusion

On notera cette nouvelle équation Convection_Diffusion. Cette équation est composée de deux opérateurs (convection et diffusion), des conditions initiales et des conditions aux limites

```
Convection_Diffusion
{
    diffusion { }
    convection { amont }
    initial_conditions
    {
        Concentration champ_fonc_xyz dom 1 (x-0.2)^2+(y-0.2)^2<(0.1)
        ^2
    }
    boundary_conditions
    {
        Gauche periodique
        Bas periodique
    }
}</pre>
```

déclaration de l'équation

• Données utilisateur

Pour l'équation (1), la vitesse de convection $\overrightarrow{V}(\overrightarrow{X},t)$ et le coefficient de diffusion $D(\overrightarrow{X},t)$ sont donnés par l'utilisateur. Dans les pratiques des développements TRUST, ces paramètres doivent être associés à un objet (équation, problème,) du jeu de données. on notera ces paramètres coefficient_diffusion et vitesse_convection.

```
coefficient_diffusion Champ_Uniforme 1 0.001
vitesse_convection Champ_Fonc_txyz dom 2 x*t y*t
```

paramètres d'entrées

• Post-traitements

Il nous semble intéressant de post-traiter la variable d'intérêt c, la vitesse de convection $\overrightarrow{V}(\overrightarrow{X},t)$ et le coefficient de diffusion $D(\overrightarrow{X},t)$. Le bloc de post-traitement de ces variables se présente sous la forme suivante:

```
Post_processing
{
    format lata
    fields dt_post 1.e-7
    {
        Concentration elem
        vitesse_convection elem
        coefficient_diffusion elem
    }
}
```

déclaration du champs à post-traiter

3.3 Fonctionnalités TRUST

Il est fortement recommandé d'utiliser au maximum les fonctionnalités existantes dans le logiciel TRUST et d'éviter de dupliquer les lignes de codes. Ceci permet, d'une part, de minimiser le temps de développement de l'application et, d'autre part, de profiter des fonctionnalités couvertes par les tests du logiciel TRUST.

L'identification des fonctionnalités peut se faire via la documentation doxygen du logiciel TRUST. Nous faisons ci-dessous cet exercice d'identification par rapport à nos besoins (3.2).

• problème

En analysant le graphe doxygen de la classe Probleme_base (cf. figure 1), aucun problème nous parait proche de nos besoins (3.2).

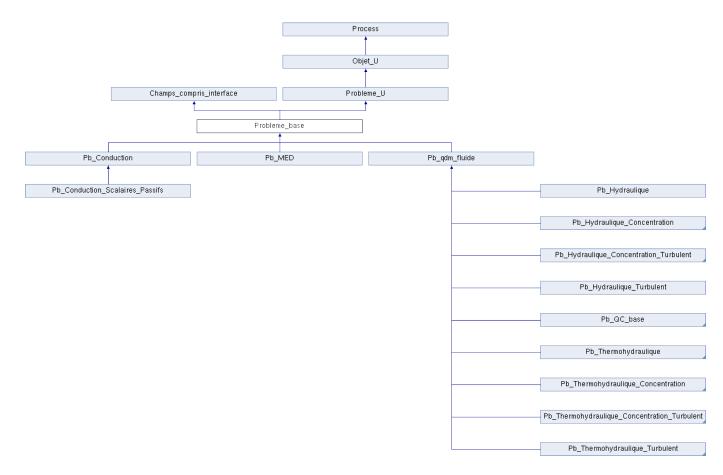


Figure 1: classe Probleme base

• équation de convection-diffusion

En analysant le graphe doxygen de la classe Equation_base (cf. figure 2), on constante qu'il existe une équation de type convection-diffusion nommée Convection_Diffusion_std (cf. figure 3). C'est une classe de base pour l'équation de transport d'un scalaire en régime laminaire et elle porte une référence au champ de la vitesse transportante [2]. Cette classe d'équation est abstraite pure et donc non instanciable. L'implémentation de cette classe n'est pas complète et elle sert de base à d'autres classes dérivées (héritées).

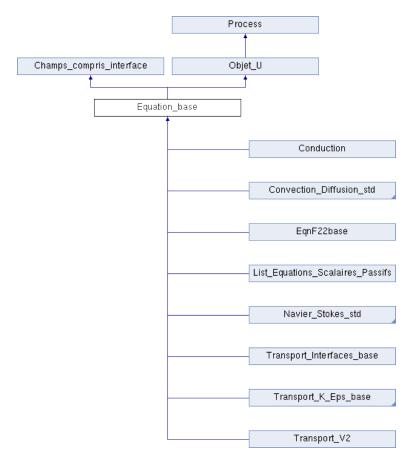
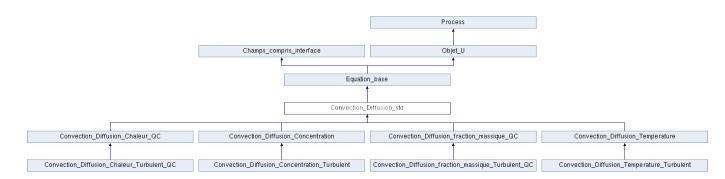


Figure 2: classe Equation_base



 $Figure \ 3: \ classe \ {\tt Convection_Diffusion_std}$

En se basant sur le graphe doxygen de la classe Convection_Diffusion_Concentration (cf. figure 4), la classe Convection_Diffusion_Concentration fille (dérivée) de la classe Convection_Diffusion_std paraît très proche de l'équation (1). Cette classe est un cas particulier de Convection_Diffusion_std pour le transport d'un ou plusieurs constituants [2].

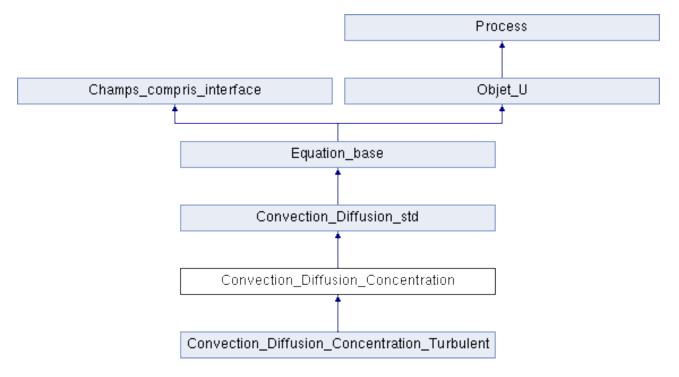


Figure 4: classe Convection Diffusion Concentration

Les spécificités de l'équation Convection_Diffusion_Concentration sont [2]:

 coefficient de diffusion [3]: ce coefficient constitue une propriété d'un constituant associé à cette équation. Cette propriété est donnée par l'utilisateur dans le jeu de données de la manière suivante:

```
Constituant constituant
Read constituant
{
    coefficient_diffusion Champ_Uniforme 1 0.001
}
```

déclaration du constituant standard TRUST

- vitesse de convection [2]: cette vitesse est obtenue par la méthode vitesse_pour_transport qui récupéré cette vitesse à partir de l'équation du problème qui la porte. En effet,

dans une utilisation standard du logiciel TRUST, cette vitesse de convection est obtenue par l'équation de l'hydraulique Navier-Stokes.

3.4 Fonctionnalités spécifiques

L'analyse des fonctionnalités du logiciel TRUST dans la section précédente a permis d'identifier une équation Convection_Diffusion_Concentration très proche de l'équation (1) avec un coefficient de diffusion donné par l'utilisateur à travers un constituant. Nous faisons donc le choix d'utiliser cette équation comme base pour développer une nouvelle équation qu'on notera Convection_Diffusion. A cette équation, on associe un nouveau constituant Constituant_Avec_Vitesse basé sur l'ancien en lui rajoutant comme propriété la vitesse de convection.

La nouvelle classe de constituant Constituant_Avec_Vitesse sera appelée dans le jeu de données de la manière suivante:

```
Constituant_Avec_Vitesse constituant
Read constituant
{
    coefficient_diffusion Champ_Uniforme 1 0.001
    vitesse_convection Champ_Fonc_txyz dom 2 x*t y*t
}
```

déclaration du constituant spécifique à l'application BALTIK

4 Développements

4.1 Environnement de développement : Application BALTIK

Un environnement de développement Application BALTIK est mis à disposition pour les applications reposant, soit sur le logiciel TRUST soit, sur son noyau numérique « Kernel » soit sur une autre application BALTIK. Cet environnement permet une gestion de compilation de ces applications (sources spécifiques) ainsi que les sources modifiées et/ou rajoutées du logiciel TRUST. Dans ce cadre, une application est constituée :

- du noyau numérique « Kernel » ou du logiciel TRUST ou d'une autre application BALTIK,
- des sources spécifiques à l'application.

En pratique, les sources spécifiques à l'application sont rassemblées dans un répertoire de travail appelé \mathtt{src}^1 , celui-ci est compilé suivant le processus classique de compilation du logiciel TRUST. On peut inclure à cette application des sources du « Kernel » ou de TRUST que l'on souhaite modifier par rapport à leurs versions standards.

¹L'emplacement du répertoire src dans l'arborescence de l'application BALTIK est indiqué dans la section 4.1.1

4.1.1 Création et configuration de l'application BALTIK

La création d'une application BALTIK consiste à créer un répertoire qui prend le nom de cette application (convection_diffusion par exemple).

```
$ mkdir convection_diffusion
```

La mise en place d'une application BALTIK se traduit par la création dans le répertoire convection_diffusion d'un fichier de configuration project.cfg.

```
# description section (required)
[description]
name : convection_diffusion  # name of the project (
    required)
author : MEKKAS  # author of the project (
    optional)
executable : convection_diffusion_exe  # name of the executable (
    optional)
```

project.cfg

Dans ce fichier de configuration, seul le nom de l'application est obligatoire. En revanche, il existe un certain nombre de paramètres optionnels tels que l'auteur, le nom de l'exécutable à générer, etc.

Pour configurer notre application BALTIK, il faut exécuter les instructions sivantes:

• initialisation de l'environnement du logiciel:

```
$ cd convection_diffusion
$ mkdir src

src est le répertoire contenant soit des sources modifiées du logiciel

TRUST soit du Kernel TRUST soit des sources supplémentaires spécifiques
à notre application.
```

• configuration de l'application BALTIK:

```
$ source $TRUST_ROOT/env_TRUST.sh

$ cd convection_diffusion
$ baltik_build_configure

La variable d'environnement $TRUST_ROOT est le chemin où le
    logiciel
```

```
TRUST est installé.

La première instruction sert à initialiser l'environnement TRUST.

La deuxième instruction génère un fichier configure. Il est important de

noter que cette instruction doit être exécuter dans le répertoire convection_diffusion.
```

4.1.2 Compilation de l'application BALTIK

La compilation de notre application BALTIK est assez standard. En effet, la génération du fichier Makefile se fait via l'exécution dans le répertoire convection_diffusion de l'instruction suivante:

```
$ cd convection_diffusion
$ ./configure

Il est important de noter que lors du rajout de nouvelles sources
dans

le répertoire src, il est impératif de re-exécuter cette
instruction
pour mettre à jour le fichier Makefile.
```

Une fois le fichier Makefile généré, deux modes de compilation de l'application BALTIK sont possibles:

• compilation en mode debug:

```
$ cd convection_diffusion
2 $ make debug
```

• compilation en mode optimisé:

```
$ cd convection_diffusion
2 $ make optim
```

4.2 Développements

4.3 Classe constituant Constituant_Avec_Vitesse

Comme spécifié dans la section 3, les paramètres utilisateurs vitesse de convection et coefficient de diffusion sont attribués à la nouvelle classe de constituant Constituant_Avec_Vitesse basée (héritage) sur la classe Constituant du logiciel TRUST. La spécificité de cette nouvelle classe est que cette dernière possède un champ de vitesse de convection du constituant.

Le traitement de cet attribut supplémentaire nécessite les actions suivantes:

- 1. le rajout d'attributs:
 - C: il contiendra le contenu du vitesse_convection du jeu de données (cf. section 3).
 - vitesse_transport: il contiendra la vitesse de convection discrétisée.
 - champs_compris_: il contiendra les champs post-traitables.
- 2. la surcharge des méthodes suivantes²:
 - initialiser: évaluer la vitesse de convection en espace au temps initial.
 - set_param: affecter le contenu de vitesse_convection du jeu de données (cf. section 3) à l'attribut C de cette classe.
 - mettre_a_jour: évaluer la vitesse de convection en espace au temps courant.
 - discrétiser: discrétise la vitesse de convection à partir de la vitesse de convection donné par l'utilisateur.
 - get_champ et get_noms_champs_postraitables: rendre la vitesse de convection discrétisée post-traitable à partir du jeu de données.
- 3. le développement de nouvelles méthodes:
 - vit_convection_constituant: renvoie l'attribut contenant la vitesse de convection non discrète.
 - vitesse_pour_transport: renvoie la vitesse de convection discrétisée sur les faces du maillage.
- 4. le développement des méthodes print0n et read0n: la classe Constituant_Avec_Vitesse est utilisable dans le jeu de données et donc instantiable. Pour déclarer ce type de classe, il suffit d'utiliser la macro Declare_instanciable. Dans cette macro, on déclare les entêtes des méthodes print0n et read0n qui sont nécessaires à la lecture des objets sur les flux d'entrée (jeu de données) et l'écriture des objets sur les flux de sortie.

²Seules les fonctionnalités spécifiques de la nouvelle classe Constituant_Avec_Vitesse sont décrites.

4.3.1 Fichier entête

```
#ifndef Constituant_Avec_Vitesse_included
2 #define Constituant_Avec_Vitesse_included
 #include <Constituant.h>
 #include <Champ_Inc.h>
 class Constituant_Avec_Vitesse : public Constituant
    Declare_instanciable(Constituant_Avec_Vitesse);
10 public :
          initialiser(const double& temps);
    int
         set_param(Param& param);
   void
         mettre_a_jour(double temps);
   const Champ_Don& vit_convection_constituant() const;
    const Champ_base& vitesse_pour_transport() ;
   virtual void discretiser(const Probleme_base& pb, const
    Discretisation_base& dis);
 protected:
   Champ_Don C;
 private:
   Champ_Inc vitesse_transport;
 };
22 #endif
```

Constituant Avec Vitesse.h

4.3.2 Fichier source

Il est à noter que dans le fichier source, qui contient le corps des méthodes définies dans le fichier entête, la macro Implemente_instanciable sert, d'une part, à définir le mot clé utilisable dans le jeu données pour représenter la classe Constituant_Avec_Vitesse et, d'autre part, la classe mère de de Constituant_Avec_Vitesse. Dans notre cas, on choisit le nom de la classe Constituant_Avec_Vitesse comme mot clé dans le jeu de données.

```
// XD constituant_avec_vitesse constituant constituant_avec_vitesse
      -1
10 Sortie& Constituant_Avec_Vitesse::printOn(Sortie& os) const
    return os;
 }
 Entree& Constituant_Avec_Vitesse::readOn(Entree& is)
16
    Constituant::readOn(is);
    return is;
18
 void Constituant_Avec_Vitesse::set_param(Param& param)
    Constituant::set_param(param);
    param.ajouter("vitesse_convection",&C,Param::REQUIRED); //
    XD_ADD_P field_base not_set
26
 void Constituant_Avec_Vitesse::discretiser(const Probleme_base& pb,
                                         const Discretisation_base&
28
    dis)
 {
    const Zone_dis_base& zone_dis=pb.equation(0).zone_dis();
    dis.nommer_completer_champ_physique(zone_dis,"
     coefficient_diffusion", "m2/s", D. valeur(), pb);
   dis.nommer_completer_champ_physique(zone_dis,"
    vitesse_convection_lu", "m/s", C. valeur(), pb);
    champs_compris_.ajoute_champ(D.valeur());
    champs_compris_.ajoute_champ(C.valeur());
    const Schema_Temps_base& sch=pb.schema_temps();
    dis.discretiser_champ("vitesse",zone_dis,"vitesse_convection","m/
    s",
                           dimension,sch.nb_valeurs_temporelles(),
                           sch.temps_courant(), vitesse_transport);
    champs_compris_.ajoute_champ(vitesse_transport.valeur());
    Milieu_base::discretiser(pb,dis);
40
    if (C.non_nul())
      vitesse_transport.valeur().affecter_(C.valeur());
42
    else
44
      Cerr<<"To must read "<<que_suis_je()<<" before discretiser "<<</pre>
    finl:
```

```
exit();
   }
 }
48
 const Champ_base& Constituant_Avec_Vitesse::vitesse_pour_transport
     ()
    return vitesse_transport;
54
 const Champ_Don& Constituant_Avec_Vitesse::
     vit_convection_constituant() const
 {
    return C;
 }
58
 void Constituant_Avec_Vitesse::mettre_a_jour(double temps)
    Constituant::mettre_a_jour(temps);
    if (C.non_nul())
      C.mettre_a_jour(temps);
    vitesse_transport.valeur().affecter_(C.valeur());
    vitesse_transport.changer_temps(temps);
 }
 int Constituant_Avec_Vitesse::initialiser(const double& temps)
 {
70
    Constituant::initialiser(temps);
    if (C.non_nul())
      C.initialiser(temps);
    return 1;
 }
```

 $Constituent_Avec_Vitesse.cpp$

4.4 Classe équation Convection_Diffusion

La spécificité de cette nouvelle classe d'équation Convection_Diffusion par rapport à la classe de base Convection_Diffusion_Concentration (3) est que la classe Convection_Diffusion possède une référence sur la nouvelle classe de constituant Constituant_Avec_Vitesse et que la vitesse de convection est donnée par cette dernière classe et non pas donnée par une résolution d'une équation de l'hydraulique Navier-Stokes.

Le traitement de cette nouvelle référence nécessite les actions suivantes:

 le rajout de la référence le_constituant. Pour ce faire, il est nécessaire d'implémenter les deux sources ci-dessous. Cette technique, non standard C++, est utilisée dans le logiciel TRUST pour éviter aux développeurs de manipuler des pointeurs qui peuvent être source des fuites mémoires.

```
#ifndef Ref_Constituant_Avec_Vitesse_included
#define Ref_Constituant_Avec_Vitesse_included

#include <Ref.h>
class Constituant_Avec_Vitesse;
Declare_ref(Constituant_Avec_Vitesse);
#endif
```

Ref Constituant Avec Vitesse.h

```
#include <Ref_Constituant_Avec_Vitesse.h>
#include <Constituant_Avec_Vitesse.h>
Implemente_ref(Constituant_Avec_Vitesse);
```

Ref Constituant Avec Vitesse.cpp

- 2. la surcharge des méthodes suivantes ³:
 - associer_milieu_base: Associate le milieu à l'équation de convection diffusion et plus précisément associer le nouveau constituant Constituant_Avec_Vitesse à l'équation.
 - associer_constituant: Associate le constituant à l'équation Convection_Diffusion. Cette méthode est appelée par la méthode précédente associer_milieu_base.
 - lire_motcle_non_standard: Read les mots clé non standard du jeu de données tel que convection pour Associate la vitesse de convection à l'équation de convection diffusion
- 3. le développement des méthodes print0n et read0n.

4.4.1 Fichier entête

```
#ifndef Eq_Conv_Diff_included
#define Eq_Conv_Diff_included

#include <Convection_Diffusion_Concentration.h>
#include <Ref_Constituant_Avec_Vitesse.h>

class Eq_Conv_Diff : public Convection_Diffusion_Concentration
```

³Seul les fonctionnalités spécifiques de la nouvelle classe Convection_Diffusion sont décrites.

```
Declare_instanciable(Eq_Conv_Diff);
public :
    void associer_milieu_base(const Milieu_base& un_milieu);
    void associer_constituant(const Constituant_Avec_Vitesse& un_constituant);
    int lire_motcle_non_standard(const Motcle& mot, Entree& is);

protected :
    REF(Constituant_Avec_Vitesse) le_constituant;
};
#endif
```

Eq Conv Diff.h

4.4.2 Fichier source

```
#include <Eq_Conv_Diff.h>
# include < Constituant_Avec_Vitesse.h>
 #include <Discret_Thyd.h>
# #include < Probleme_base.h>
6 | Implemente_instanciable(Eq_Conv_Diff, "Convection_Diffusion",
     Convection_Diffusion_Concentration);
 // XD convection_diffusion eqn_base convection_diffusion -1
     not_set
 Sortie& Eq_Conv_Diff::printOn(Sortie& is) const
   return Convection_Diffusion_Concentration::printOn(is);
12 }
14 Entree& Eq_Conv_Diff::readOn(Entree& is)
   Convection_Diffusion_Concentration::readOn(is);
   return is;
<sub>18</sub> }
20 int Eq_Conv_Diff::lire_motcle_non_standard(const Motcle& mot,Entree
    & is)
if (mot == "convection")
24 Cerr << "Reading and typing of the convection operator : "<< finl;
```

```
terme_convectif.associer_vitesse(le_constituant->
     vitesse_pour_transport());
    is >> terme_convectif;
   return 1;
  }else
28
   Cout << mot << finl;</pre>
    return Convection_Diffusion_Concentration::
     lire_motcle_non_standard(mot,is);
32
  return 1;
34 }
 void Eq_Conv_Diff::associer_milieu_base(const Milieu_base&
    un_milieu)
 {
    Convection_Diffusion_Concentration::associer_milieu_base(
     un_milieu);
    const Constituant_Avec_Vitesse& un_constituant=ref_cast(
     Constituant_Avec_Vitesse,un_milieu);
    if (un_constituant.vit_convection_constituant().non_nul())
      associer_constituant(un_constituant);
    else
      Cerr << "The dye (constituant) convection has not been defined."
     << finl;
      exit();
46
 }
 void Eq_Conv_Diff::associer_constituant(const
     Constituant_Avec_Vitesse& un_constituant)
 {
50
    le_constituant = un_constituant;
 }
52
```

Eq_Conv_Diff.cpp

4.5 Classe Problème Probleme_Convection_Diffusion

Dans la section 3 dédiée à la spécification, aucun problème n'a été identifié pour servir de base au nouveau problème Probleme_Convection_Diffusion. Nous prenons donc la classe abstraite pure Probleme_base comme classe de base (mère) pour la nouvelle classe Probleme_Convection_Diffusion. Pour utiliser cette nouvelle classe de problème Probleme_Convection_Diffusion, il faut:

- 1. rajouter l'attribut eq_conv_diff qui représente l'équation de convection-diffusion (1).
- 2. compléter l'implémentation de la classe Probleme_base en développant les méthodes suivantes:
 - nombre_d_equations: renvoie le nombre d'équation qui compose ce problème. Dans notre cas c'est une seule équation.
 - equation: renvoie l'attribut contenant l'équation de convection-diffusion (eq_conv_diff).
- 3. surcharger la méthode associer_milieu_base pour Associate le milieu à l'équation de convection de diffusion eq_conv_diff.
- 4. le développement des méthodes print0n et read0n.

4.5.1 Fichier entête

```
#ifndef Pb_Conv_Diff_included

#define Pb_Conv_Diff_included

#include <Probleme_base.h>
#include <Eq_Conv_Diff.h>

class Pb_Conv_Diff : public Probleme_base
{
    Declare_instanciable(Pb_Conv_Diff);
    public:
        int nombre_d_equations() const;
        const Equation_base& equation(int i) const;
        Equation_base& equation(int i);
        void associer_milieu_base(const Milieu_base& un_milieu);
    protected:
        Eq_Conv_Diff eq_conv_diff;
};
#endif
```

 $Pb_Conv_Diff.h$

4.5.2 Fichier source

```
// XD probleme_convection_diffusion Pb_base
    probleme_convection_diffusion -1 not_set
5 // XD
          attr convection_diffusion convection_diffusion
    convection_diffusion 1 not_set
 Sortie& Pb_Conv_Diff::printOn(Sortie& os) const
   return Probleme_base::printOn(os);
 }
Entree& Pb_Conv_Diff::readOn(Entree& is)
   return Probleme_base::readOn(is);
 int Pb_Conv_Diff::nombre_d_equations() const
   return 1;
19 }
const Equation_base& Pb_Conv_Diff::equation(int i) const
   assert (i==0);
   return eq_conv_diff;
<sub>25</sub> }
27 Equation_base& Pb_Conv_Diff::equation(int i)
   assert (i==0);
    return eq_conv_diff;
31 }
void Pb_Conv_Diff::associer_milieu_base(const Milieu_base&
    un_milieu)
    eq_conv_diff.associer_milieu_base(un_milieu);
 }
```

Pb Conv Diff.cpp

5 Processus de vérification des développements

Dans cette section, nous présentons:

• la mise en place des tests de vérification,

- la génération automatique d'un rapport de vérification des développements via l'outil de génération genererCourbes,
- la vérification de la non-régression.

5.1 Mise en place des tests de vérification

La mise en place des tests de vérification consiste à créer:

• un répertoire pour chaque test de vérification,

```
$ cd convection_diffusion
$ mkdir -p share/Validation/Rapports_automatiques/Cas-tests/src
    /cas-test1
$ mkdir -p share/Validation/Rapports_automatiques/Cas-tests/src
    /cas-test2

Cas-tests est le répertoire contenant les tests de vérification
    .
cas-test1 est le répertoire contenant le premier cas de
    vérification.
cas-test2 est le répertoire contenant le deuxième cas de
    vérification.
```

- un fichier PRM dans le répertoire convection_diffusion/share/Validation/Rapports_automatiques/Caqui sert à générer automatiquement un rapport de vérification (section 6). Ce fichier PRM est présenté dans la section 6.4.
- un jeu de donnée pour chaque test de vérification (sections 6.5.1 et 6.5.2).

5.2 Génération de rapport de vérification

La génération consiste à exécuter la commande make validation dans le répertoire convection_diffusion. Dans ce même répertoire, l'exécution de cette commande générera le rapport de vérification validation.pdf. Ce rapport est inclus dans cette note technique à la section 6.

5.3 Vérification de la non-régression

Pour utiliser les tests mis en place précédemment dans le rapport de vérification comme des tests de non-régression, il suffit de:

• créer un répertoire qui contiendra les résultats de référence dans le répertoire convection_diffusion:

```
$ cd convection_diffusion
$ mkdir -p tests/Reference/Validation
```

• lancement des tests et vérification de la non-régression en exécutant la commande make check_optim dans le répertoire convection_diffusion. Le résultat de cette commande est illustré dans la figure (cf. figure 5.3). Cette figure montre que les résultats en séquentiel et en parallèle ne présentent aucune régression.

Figure 5: Résultats des tests de non-régression

6 Rapport de vérification

6.1 Introduction

Validation made by : A. MEKKAS. Report generated 12/05/2017.

6.1.1 Description

Dans cette fiche de tests, deux cas-tests ont été dévéloppés pour une vérification qualitative des dévéloppements d'une équation de convection-diffusion.

6.1.2 Parameters TRUST

- Version TRUST :
- Version Trio_U from out: /users/fauchet/VUES/beta/TRUST/doc/TRUST/exercices/e-quation_convection_diffusion/convection_diffusion_exe_opt (1.7.5_beta)

6.1.3 Test cases

- cas-test1/cas-test1.data:
- \bullet cas-test2/cas-test2.data:

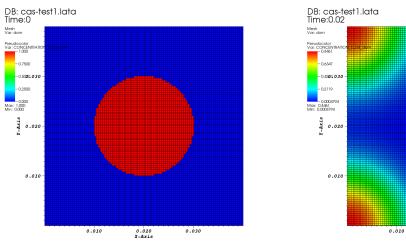
6.2 Cas-test 1

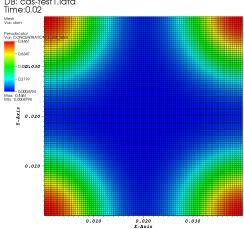
Ce premier cas-test vise à vérifier la solution d'une équation de convection-diffusion sur un domaine $2D [0, 0.04] \times [0, 0.04]$ pour une vitesse de convection constante, un coefficent de diffusion constant et des conditions aux limites périodiques:

- $\bullet \ \overrightarrow{V}(\overrightarrow{X},t) = (1,1),$
- $D(\overrightarrow{X}, t) = 0.0005.$

6.2.1 Concentration

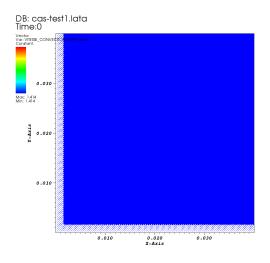
Les figures ci-dessous représentent la concentration à l'instant initial et à l'instant t = 0.02. La figure représentant la solution à t = 0.02 montre la bonne prise en compte de la vitesse de convection, de la diffusion de la concentration initiale et des conditions aux limites périodiques.

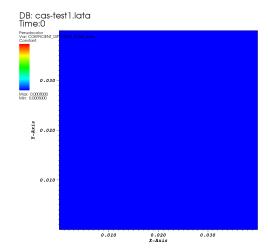




6.2.2 Vitesse de convection et coefficient de diffusion

Les figures ci-dessous représentent la vitesse de convection et le coeffcient de diffusion à l'instant initial. Ces figures montrent la bonne prise en compte de la vitesse de convection et du coefficient de diffusion. Ceci vérifie également que le rajout de la vitesse de convection en tant que variable post-traitable est bien pris en compte.





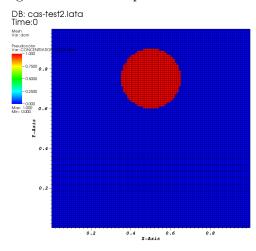
6.3 Cas-test 2

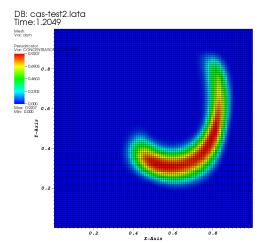
Le deuxieme cas-test vise à vérifier la solution d'une équation de convection-diffusion sur un domaine $2D [0,1] \times [0,1]$ pour une vitesse de convection variable en temps et en espace et un coefficient de diffusion nul:

- $\bullet \ \overrightarrow{V}(\overrightarrow{X},t) = (-2\sin(\pi x)^2\sin(\pi y)\cos(\pi y)\cos(t\tfrac{\pi}{2}), 2\sin(\pi y)^2\sin(\pi x)\cos(\pi x)\cos(t\tfrac{\pi}{2})),$
- $D(\overrightarrow{X},t)=0.$

6.3.1 Concentration

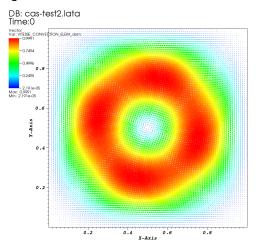
Les figures ci-dessous représentent la concentration à l'instant initial et à l'instant t = 1.2049.

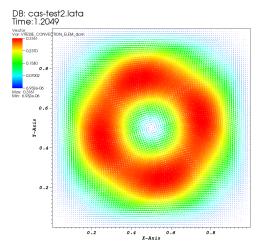




6.3.2 Vitesse de convection

Les figures ci-dessous représentent la vitesse de convection à l'instant initial et à l'instant t=1.2049. La figure représentant la solution à t=1.2049 montre la bonne prise en compte d'une vitesse de convection variable en temps et en espace. En effet, Les figures ci-dessous mettent en évidence le changement de signe à l'instant t=1.2049 dû au changement de signe du terme $\cos(t\frac{\pi}{2})$.





6.4 Fichier prm

```
Parametres {
  Titre "Tests de vérification"
  Description "Dans cette fiche de tests, deux cas-tests ont été dévéloppés
    pour une vérification qualitative des dévéloppements d'une équation de
   convection-diffusion."
  IncludeData 0
  Auteur "A. MEKKAS"
  CasTest "cas-test1" "cas-test1.data"
  CasTest "cas-test2" "cas-test2.data"
Chapitre {
  Titre "Cas-test 1"
  Description "Ce premier cas-test vise à vérifier la solution d'une
   équation de convection-diffusion sur un domaine 2D \setminus latex (\$[0,0.04] \setminus latex)
   times[0,0.04] \lambda \lambda latex_) pour une vitesse de convection constante, un
   coefficent de diffusion constant et des conditions aux limites
   périodiques:"
         Description "\latex (\begin{itemize} \item \\overrightarrow{V}(\
   overrightarrow \{X\}, t) = (1,1)$, \item D(\operatorname{verrightarrow}\{X\}, t) = 0.0005$.
   end{itemize}\latex_)"
Table {
```

```
titre "Concentration"
  description "Les figures ci-dessous représentent la concentration à l'
   instant initial et à l'instant \latex ($t=0.02$\latex ). La figure
   représentant la solution à \text{latex} (\text{$t=0.02\$}/\text{latex}) montre la bonne
   prise en compte de la vitesse de convection, de la diffusion de la
   concentration initiale et des conditions aux limites périodiques."
  description
  description
Visu {
  Width 7cm
  \operatorname{mesh} \operatorname{cas-test1/cas-test1.lata} dom
  pseudocolor cas-test1/cas-test1.lata dom CONCENTRATION ELEM
  cycles 0 350
        # MultiVisu 1 #
        nb img without newline 2
Table {
  titre "Vitesse de convection et coefficient de diffusion"
  description "Les figures ci-dessous représentent la vitesse de convection
    et le coeffcient de diffusion à l'instant initial. Ces figures montrent
    la bonne prise en compte de la vitesse de convection et du coefficient
   de diffusion. Ceci vérifie également que le rajout de la vitesse de
   convection en tant que variable post-traitable est bien pris en compte."
  description
Visu {
        vector cas-test1/cas-test1.lata dom VITESSE CONVECTION ELEM
  Width 7cm
  cycles 0
        nb\_img\_without\_newline \ 2
  pseudocolor\ cas-test 1/cas-test 1.\ lata\ dom\ COEFFICIENT\ DIFFUSION\ ELEM
  Width 7cm
  cycles 0
Chapitre {
  Titre "Cas-test 2"
  Description "Le deuxieme cas-test vise à vérifier la solution d'une
   équation de convection-diffusion sur un domaine 2D \latex ($[0,1]\times
   [0,1] $\latex_) pour une vitesse de convection variable en temps et en
   espace et un coefficient de diffusion nul:"
  overrightarrow \{X\}, t) = (-2 \sin(\pi x)^2 \sin(\pi y) \cos(\pi y) \cos(t \pi c)
   pi{2}), 2 \sin(pi y)^2 \sin(pi x) \cos(pi x) \cos(t frac{pi}{2}),
   item $D(\operatorname{verrightarrow}\{X\},t)=0$. $\operatorname{latex}(X)=0$. $\operatorname{ditemize}(X)=0$. $\operatorname{ditemize}(X)=0$. }
Table {
```

```
titre "Concentration"
  description "Les figures ci-dessous représentent la concentration à l'
   instant initial et à l'instant \latex ($t=1.2049$\latex)."
  description
  description
Visu {
  Width 7cm
  mesh cas-test2/cas-test2.lata dom
  pseudocolor cas-test2/cas-test2.lata dom CONCENTRATION ELEM
  cycles 0 88
        nb img without newline 2
Table {
  titre "Vitesse de convection"
  description "Les figures ci-dessous représentent la vitesse de convection
    à l'instant initial et à l'instant \latex ($t=1.2049$\latex ). La
   figure représentant la solution à \text{latex} (\text{\$t}=1.2049\$\text{latex} ) montre la
   bonne prise en compte d'une vitesse de convection variable en temps et
   en espace. En effet, Les figures ci-dessous mettent en évidence le
   changement de signe à l'instant \text{latex}(\$t=1.2049\$\text{latex}) d\text{latex}(\hat{u})
   latex_) au changement de signe du terme latex_({\c os(t\frac{\pi c}{pi}{2})})
   latex_)."
  description
  description
Visu {
 Width 7cm
        vector cas-test2/cas-test2.lata dom VITESSE CONVECTION ELEM
  cycles 0 88
        nb_img_without_newline 2
Chapitre {
  Titre "Fichier prm"
  Description \latex_(\label{prm}\\latex_)
  Description include text file (fiche.prm)
Chapter {
  Title Data Files
  Table {
  titre cas-test1
  Description \langle latex_( \langle label \{ cas1 \} \rangle )
  Description include text file(cas-test1/cas-test1.data)
  Table {
  titre cas-test2
  Description \langle latex ( label{cas2} \rangle latex )
  Description include text file(cas-test2/cas-test2.data)
```

preserve/fiche.prm

6.5 Data Files

6.5.1 cas-test1

```
\# Thermohydraulique 2D VDF \#
# PARALLEL OK #
dimension 2
Probleme_Convection_Diffusion_pb
Domaine dom
# BEGIN MESH #
mailler dom
  Pave Plaques
    origine 0. 0.
    longueurs 0.04 0.04
    nombre_de_noeuds 101 101
    bord Gauche X = 0. 0. <= Y <= 0.04
    bord Gauche X = 0.04 0. <= Y <= 0.04
    bord\ Bas\ Y=0.\qquad 0.\ <=X<=\ 0.04
    bord Bas Y = 0.04 \ 0. \le X \le 0.04
# END MESH #
# BEGIN PARTITION
Partition dom
        Partition_tool tranche { tranches 2 1 }
        Larg_joint 1
        zones name DOM
        periodique 2 Bas Gauche
End
END PARTITION #
# BEGIN SCATTER
Scatter DOM. Zones dom
END SCATTER #
vdf dis
Scheme_euler_explicit sch
Read sch
  tinit 0.
```

```
nb_pas_dt_max 500
  tmax .04
  dt min 1.e-7
  dt max 0.1
  dt_{impr} 1.e-7
  dt sauv 100.
  seuil statio 1.e-8
Constituant Avec Vitesse constituant
Read constituant
  {\tt coefficient\_diffusion Champ\_Uniforme~1~0.0005}
  vitesse convection Champ Uniforme 2 1. 1.
Associate pb dom
Associate pb sch
Associate pb constituant
Discretize pb dis
Read pb
   {\tt Convection\_Diffusion}
  diffusion { }
  convection { amont }
  initial conditions
         Concentration champ fonc xyz dom 1 (x-0.02)^2+(y-0.02)^2<(0.01)^2
  {\tt boundary\_conditions}
    Gauche periodique
    Bas
          periodique
  }
   Post_processing
    format lata
          fields dt_post 1.e-7
      Concentration elem
      vitesse\_convection elem
                         coefficient_diffusion elem
Solve pb
End
```

preserve/cas-test1/cas-test1.data

6.5.2 cas-test2

```
# Thermohydraulique 2D VDF #
# PARALLEL OK #
dimension 2
Probleme Convection Diffusion pb
Domaine dom
# BEGIN MESH #
Mailler dom
  Pave Plaques
    origine 0. 0.
    longueurs 1. 1.
    nombre de noeuds 101 101
    bord\ Gauche\ X=\ 0.\qquad 0.\ <=\ Y<=\ 1.
    bord\ Gauche\ X=\ 1.\ 0.\ <=\ Y<=\ 1.
    bord\ Bas\quad Y=\ 0.\qquad 0.\ <=\ X<=\ 1.
    bord\ Bas\ Y=1.\ 0.\ <=X<=\ 1.
# END MESH #
# BEGIN PARTITION
Partition dom
        Partition_tool tranche { tranches 2 1 }
        Larg_joint 1
        zones name DOM
        periodique 2 Bas Gauche
End
END PARTITION #
# BEGIN SCATTER
Scatter DOM. Zones dom
END SCATTER #
vdf dis
Scheme_euler_explicit sch
Read sch
  tinit 0.
  nb\_pas\_dt\_max~500
  tmax 8.
  dt min 1.e-7
  dt max 0.1
  dt impr 1.e-7
  dt_sauv 100.
  seuil statio 1.e-8
```

```
Constituant Avec Vitesse constituant
Read constituent
  coefficient diffusion Champ Uniforme 1 1.E-15
  vitesse_convection Champ_Fonc_txyz dom 2 -2*sin(pi*x)^2*sin(pi*y)*cos(pi*
   y)*cos(2.*t*pi/4.) 2*sin(pi*y)^2*sin(pi*x)*cos(pi*x)*cos(2.*t*pi/4.)
Associate pb dom
Associate pb sch
Associate pb constituant
Discretize pb dis
Read pb
   Convection Diffusion
  diffusion { }
  convection { amont }
  initial_conditions
         Concentration champ fonc xyz dom 1 ((x-0.5)^2+(y-0.75)^2<(0.15)^2
  boundary_conditions
    Gauche periodique
    Bas
           periodique
   Post_processing
    format lata
          fields dt post 1.e-7
      Concentration elem
      vitesse convection elem
                        coefficient diffusion elem
Solve pb
End
```

preserve/cas-test2/cas-test2.data

7 Conclusion

Dans ce tutoriel, nous avons décrit à travers la résolution d'une équation de convection-diffusion les aspects suivants:

- l'environnement de développement du logiciel TRUST en réalisant une nouvelle application BALTIK,
- la démarche de spécifications et de développements. Dans cette démarche, il est nécessaire de réaliser des choix techniques tels que l'association de la vitesse de convection à un constituant et non pas à l'équation ou problème). Ces choix ne sont ni uniques ni meilleurs que d'autres. Il est à noter que le but principal de ce tutoriel est de présenter une démarche accompagnée de ces propres choix techniques en donnant quelques recommandations ou méthodologies à suivre lors de sa phase de spécification.
- la mise en place des tests de non-régression et la génération automatique d'un rapport de vérification des développement via des outils proposés par le logiciel TRUST.

References

- [1] U. Bieder, V. Barthel, F. Ducros, F. Perdu, and P. Quéméré. Trio_u users manual : Methodology for incompressible single phase flow in industrial applications. Note Technique DER/SSTH/LMDL/2007-058, CEA, 2007.
- [2] M. Farvaque, Ph. Emonot, and O. Cueto. Document de conception trio_u version 1. Note Technique STR/LTML 96-20, CEA, 1996.
- [3] Trio_U teams. Trio_u user's manual v1.6.8. Note technique, CEA, 2013.