MEC8211 – Hiver 2025
Devoir 1 – Vérification de code – 8,33%
Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Date de remise sur Moodle et GitHub : 17/02 à midi

Directives :

- *À réaliser en équipe de 3;*
- *Le langage de programmation est laissé à votre discrétion parmi les langages suivants : Python, MATLAB, C/C++ ou Fortran. Nous recommandons toutefois l'utilisation d'un langage de prototypage interprété vu la faible demande en calcul et les possibilités de post-traitement disponibles. Commentez votre code de façon approprié et en suivant les bonnes pratiques de programmation abordées en classe (entre autres, au niveau de l'organisation de projet);*
- *Les résultats aux diverses questions seront à rapporter au moyen d'une présentation de type PowerPoint (10 slides maximum). Faites des réponses courtes aux questions;*
- *Créer un projet public sur GitHub et démonter l'utilisation de Git durant la phase d'écriture du code[1] et fournir l'adresse du dépôt dans votre présentation PowerPoint;*
- *Apporter une attention particulière à qualité de vos graphiques. Tracer vos analyses de convergence sur un graphique log-log tel que mentionné en classe;*
- *Remettre un fichier zip par équipe (Devoir1-Matricule1-Matricule2-Matricule3.zip) sur Moodle contenant la présentation PowerPoint des résultats et le code source (et éventuellement, selon le choix du langage, les directives pour le compiler et une version compilée fonctionnelle);*
- *Noter que l'énoncé de ce devoir servira en fait de base aux Devoirs 1 et 2.*

Barème d'évaluation :

Item	État				
Programme	Non-fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel
Résultats et directives	Inexistant	La plupart des résultats manquants ou erronés	Environ la moitié des résultats corrects	Presque tous les résultats corrects	La totalité des résultats corrects
Note	0-30%	40-50%	60-70%	80-90%	100%

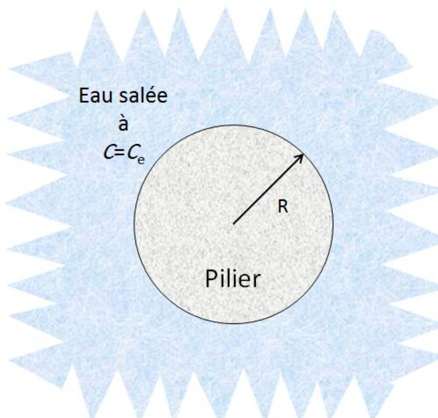
Enoncé :

Votre compagnie DUPONT & Associées Inc. est chargée de la conception d'un pont sur un lac d'eau calme et saumâtre (salée) dans la région de la baie des Chaleurs au Québec.

Devant s'absenter, la responsable du projet, Mme

[1] Je n'ai pas de requis particulier. Montrez-moi juste que vous l'avez utilisé un minimum. C'est une bonne habitude à prendre pour le développement de code en équipe et le suivi de vos propres codes.

D'AVIGNON, vous a chargé d'étudier l'évolution de la concentration du sel à l'intérieur de la structure poreuse d'un pilier de béton lorsque mis en contact avec l'eau du lac induisant une concentration en sel constante de $C = C_e = 20$ mol/m^3 à la surface du pilier et en faisant l'hypothèse que le dit pilier ne contient initialement pas de sel et ni aucune structure métallique (béton armé). Vous supposerez ici que le pilier en béton est totalement submergé, cylindrique de diamètre $D = 1$ m et infiniment haut (c'est-à-dire pas de variation de la concentration dans la hauteur du pilier). Il peut être représenté en coupe tel qu'illustré ci-dessous.



Le processus de diffusion du sel dans le pilier de béton poreux est décrit par la seconde loi de Fick :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff} \nabla^2 C - S \qquad (1)$$

où C est la concentration de sel dans la structure poreuse en mol/m^3, D_{eff} (=10^{-10} m^2/s) le coefficient de diffusion effectif du sel dans le béton poreux et S (exprimé en mol/m^3/s) une quantité de sel qui réagirait (hypothétiquement) avec un constituant du béton du pilier selon une réaction de consommation du sel de premier ordre telle que $S = kC$ avec $k = 4 \times 10^{-9}$ s^{-1} la constante de réaction (NB : cette réaction de premier ordre ne servira qu'au Devoir 2).

Mme D'AVIGNON vous demande d'écrire rapidement un **code de différences finies** pour résoudre d'abord ce problème à l'état stationnaire et de vérifier votre code. Pour ce faire, elle vous propose d'y aller par étapes en considérant initialement un terme source constant dans le domaine de calcul pour simplifier le problème et obtenir une solution analytique, en prenant $S = 2 \times 10^{-8}$ mol/m^3/s:

A) Simplifier et établir le problème stationnaire :

a. préciser de quel type est le problème résultant en stationnaire (c'est-à-dire parabolique, hyperbolique ou elliptique, mixte) ;
b. préciser votre choix de système de coordonnées;
c. réduire au maximum la dimensionnalité du problème (c-à-d appliquer les simplifications de circonstances), préciser l'existence ou non de symétrie dans le domaine et justifier vos choix;
d. présenter en conséquence une discrétisation du domaine en N_{tot}=5 nœuds (faire un schéma et montrer la position exacte de tous les nœuds sur le rayon). Préciser la taille des intervalles Δr choisis;
e. d'après l'énoncé, préciser:
   i. les conditions frontières (et leurs types) nécessaires à la résolution du problème;
   ii. la condition initiale requise, si nécessaire.

B) Résoudre analytiquement en considérant les conditions frontières choisies et obtenir le profil de concentration à l'état stationnaire :
   a. spécifiquement, montrer que le profil de concentration en sel est de forme quadratique et s'écrit comme:

$$C(r) = \frac{1}{4}\frac{\mathrm{S}}{\mathrm{D_{eff}}}R^2\left(\frac{r^2}{R^2} - 1\right) + C_e \,. \tag{2}$$

C) En donnant suffisamment de détails et vous basant sur les diapos du rappel concernant les différences finies (cf. Moodle - diapo 4), approximer l'Éq. (1) à l'état stationnaire, avec un terme source constant, et les conditions frontières appropriées par les schémas de différenciation suivants en espace :

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_i = \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} \quad \text{et} \quad \left.\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\right|_i = \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} \tag{3}$$

Préciser entre autres**:**
   a. l'équation obtenue en chacun des nœuds (incluant les nœuds frontières);
   b. la procédure générale pour résoudre le problème;
   c. l'erreur de troncature et donc l'ordre de précision attendu du schéma global ?

D) Écrire un code de calcul générique (c-à-d pour un N_{tot} non précisé d'avance) pour résoudre l'Éq. (1) (à l'état stationnaire et avec S constant), puis :

a. tracer le profil de concentration obtenu à l'état stationnaire et comparer le à la solution analytique (Eq.(2)) - préciser clairement tous les paramètres de la simulation utilisés;

b. faire une vérification du code appropriée comme vu en classe, en utilisant la solution analytique (Eq.(2)). Entre autres, mais pas seulement, tracer sur un même graphique les erreurs L_1, L_2 et L_∞;

E) Remplacer maintenant les schémas de différenciation précédents par ceux-ci[2] :

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_i = \frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta r} \quad \text{et} \quad \left.\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\right|_i = \frac{C_{i+1}-2C_i+C_{i-1}}{\Delta r^2} \tag{4}$$

et les implanter dans votre code.

a. préciser l'erreur de troncature et donc l'ordre de précision attendu de ce nouveau schéma global ?

b. refaire les vérifications;

c. tracer les profils de concentration obtenus avec les deux schémas numériques (questions C/D et E) et comparer à la solution analytique (question B);

d. que constatez-vous maintenant ? Comment expliquer le résultat obtenu ?

À suivre au Devoir 2 avec la MMS… !

Avant de partir, Mme D'AVIGNON a laissé une note manuscrite à votre intention qui pourrait s'avérer utile…

Notes à votre intention :

$$\frac{\partial}{\partial x}\big(f(x)g(x)\big) = f(x)\frac{\partial}{\partial x}\big(g(x)\big) + g(x)\frac{\partial}{\partial x}\big(f(x)\big)$$

En coordonnées cylindriques :

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

Bien à vous,
Mme D'Avignon

[2] Pour les conditions frontières qui feraient apparaitre un flux, veiller à choisir un schéma de différenciation décentré (cf. Diapo 4 du rappel sur les différences finies) qui maintienne l'ordre de précision des schémas ici proposés pour l'intérieur du domaine.