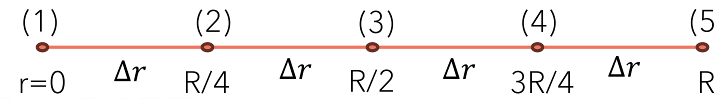
MEC8211 – Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Devoir 2 : Vérification de code - MMS

H25

Dorian Stefan Dumitru 2080089
Hieu Nhan Tran 2152473
Jacob Tremblay 2154148

a) MDF modifié pour un problème instationnaire



i. On souhaite résoudre l'équation instationnaire suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff}\nabla^2 C - S + f \text{ où } S = kC \text{ et } f \text{ représente le terme source additionnel avec la MMS}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff}\left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right] - kC + \boxed{f}$$

Les démarches concernant le choix du terme source sont détaillées en *c)*

ii. Pour tous les nœud $i \in [2, 4]$, en remplaçant les dérivées par les schémas de différenciation imposés

$$\left.\frac{\partial C}{\partial t}\right|_i^t \approx \frac{C_i^t - C_i^{t-1}}{\Delta t}$$

Approximation *Euler implicite* de la dérivée 1ère temporelle

$$\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_i^t \approx \frac{C_{i+1}^t - C_{i-1}^t}{2\Delta r}$$

Approximation centrée de la dérivée 1ère spatiale

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\right|_i^t \approx \frac{C_{i+1}^t - 2C_i^t + C_{i-1}^t}{\Delta r^2}$$

Approximation centrée de la dérivée 2ème spatiale

En remaniant l'équation instationnaire et en utilisant un schéma temporel implicite, on obtient finalement l'équation suivante au nœud i en remplaçant $t \rightarrow t+1$ et $t-1 \rightarrow t$:

$$-C_{i-1}^{t+1}\left[\Delta t D_{eff}\left(\frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_i\Delta r}\right)\right] + C_i^{t+1}\left[\Delta t D_{eff}\frac{2}{\Delta r^2} + \Delta t k + 1\right] - C_{i+1}^{t+1}\left[\Delta t D_{eff}\left(\frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_i\Delta r}\right)\right] = C_i^t - \Delta t f_i^{t+1}$$

Aux nœuds (1) et (5), on applique les conditions limites imposées:

(1), Neumann $\rightarrow$ $\left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{i=1}^t \approx \frac{-C_3^t + 4C_2^t - 3C_1^t}{2\Delta r} = 0$

(5), Dirichlet $\rightarrow$ $C|_{i=5}^t = C_e$

À noter que la condition initiale imposée est $C|_i^{t=0} = 0$

a)

- Comme les concentrations C_i^t sont connues (à la suite à la suite de la condition initiale à $t = 0$ avant d'entrer dans la boucle pour chaque pas de temps), il suffit de résoudre le système matriciel formé des équations précédentes pour obtenir les concentrations au pas de temps $t+1$. Avec 5 points en espace, le système matriciel à résoudre est le suivant :

$$\begin{bmatrix} -3 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ -D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}-\frac{1}{2r_2\Delta r}\right) & D_{eff}\Delta t\frac{2}{\Delta r^2}+k\Delta t+1 & D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}+\frac{1}{2r_2\Delta r}\right) & 0 & 0 \\ 0 & -D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}-\frac{1}{2r_3\Delta r}\right) & D_{eff}\Delta t\frac{2}{\Delta r^2}+k\Delta t+1 & D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}+\frac{1}{2r_3\Delta r}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}-\frac{1}{2r_4\Delta r}\right) & D_{eff}\Delta t\frac{2}{\Delta r^2}+k\Delta t+1 & D_{eff}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta r^2}+\frac{1}{2r_4\Delta r}\right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{t+1} \\ C_2^{t+1} \\ C_3^{t+1} \\ C_4^{t+1} \\ C_5^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_2^t + f_2^{t+1} \\ C_3^t + f_3^{t+1} \\ C_4^t + f_4^{t+1} \\ C_e \end{bmatrix}$$

où $f_i^{t+1} = 0$ lorsque la MMS n'est pas utilisée à la suite à la vérification du code (voir en *f*)).

- Ce système est résolu pour chaque pas de temps jusqu'à ce que le temps final imposé soit atteint.

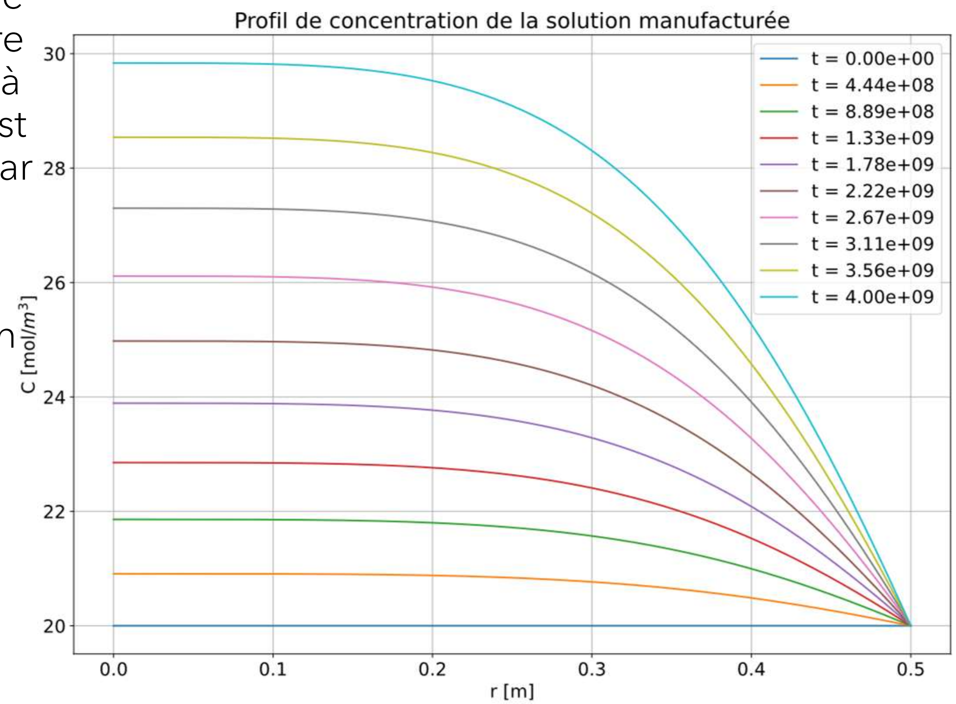
b)

- La solution manufacturée est : $$\hat{C} = C_e \left(e^{1.0 \cdot 10^{-10} t} - 1\right) \cos\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right) + C_e$$
- Elle a été choisie arbitrairement (en prenant compte que les dérivées doivent être lisses et non-nulles) de manière à respecter les conditions limites du problème originel à résoudre. La condition initiale du problème originel n'est toutefois pas respectée, ce qui n'est pas un problème car on ne cherche qu'à vérifier note code et non à avoir un résultat physique réel.
- Le graphique suivant présente le profil de concentration de la solution manufacturée à différent temps.
- Les conditions limites et initiale de la solution manufacturée, calculé à l'aide de SymPy donne :

$$\left.\frac{\partial \hat{C}}{\partial r}\right|_{r=0} = -\frac{\pi C_e r}{R^2}\left(e^{1.0 \cdot 10^{-10} t} - 1\right) \sin\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right)\Bigg|_{r=0} = 0$$

$$\left.\hat{C}\right|_{r=R} = C_e$$

$$\left.\hat{C}\right|_{t=0} = C_e$$



En effet, on remarque que

- La pente à $r = 0$ est toujours nulle.
- La concentration à $r = R$ est toujours égale à $C_e = 20$.
- Le profil de concentration au temps initial $t = 0$ est égale à C_e.

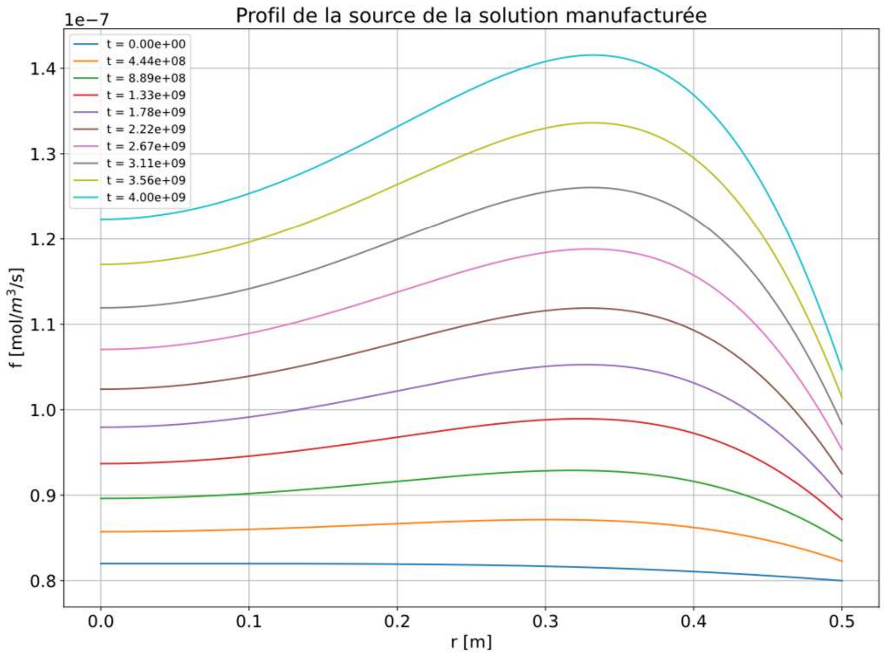
Les conditions limites et initiale calculées par SymPy sont validées graphiquement.

c)

- L'équation à résoudre avec un terme source quelconque est : $\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff}\nabla^2 C - S + f$
- En isolant le terme source f, on retrouve : $f = \frac{\partial C}{\partial t} - D_{eff}\nabla^2 C + S = \frac{\partial C}{\partial t} - D_{eff}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial C}{\partial r}) + kC$
- En insérant la solution manufacturée $\hat{C}$ de la question *b)* dans l'équation du terme source et en utilisant la librairie SymPy pour faire des calculs symboliques, on retrouve :

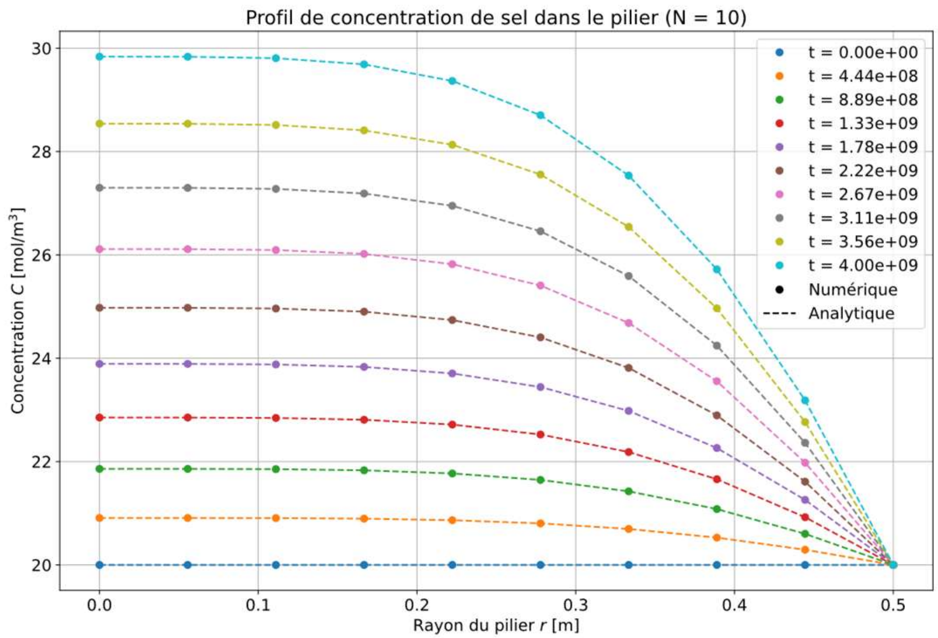
$$
\begin{aligned}
f = \frac{1}{R^4}\Bigg[&C_e\Bigg(-\pi Deff\left(1-e^{1.0\cdot10^{-10}t}\right)\left(2R^2\sin\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right)+\pi r^2\cos\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right)\right)\\
&+R^4\left(k\left(-\left(1-e^{1.0\cdot10^{-10}t}\right)\cos\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right)+1\right)+1.0\cdot10^{-10}e^{1.0\cdot10^{-10}t}\cos\left(\frac{\pi r^2}{2R^2}\right)\right)\Bigg)\Bigg]
\end{aligned}
$$

- Le graphique suivant présente le profil de la source de la solution manufacturée à différents temps.



d)

- Le graphique suivant compare la solution MMS analytique avec les résultats obtenus par le schéma numérique avec le terme source ajouté.
- On remarque qu'avec seulement 10 points, les solutions numérique et analytique sont confondues graphiquement. Cela indique possiblement que le rayon de convergence est atteint à partir de 10 points.



d) Ordres de convergence formels – temporel et spatial

- Pour un terme source nul ($f = 0$), l'opérateur continu est $L(u) = \frac{\partial C}{\partial t} - D_{eff}\left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right] + kC$
- Comme rappel, voici les schémas d'approximation d'ordre 2 spatial et d'ordre 1 temporel:

$$\left.\frac{\partial C}{\partial t}\right|_i^t \approx \frac{C_i^t - C_i^{t-1}}{\Delta t}$$

Approximation *Euler implicite* de la dérivée 1ère temporelle

$$\left.\frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r}\right|_i^t \approx \frac{1}{r_i} \cdot \frac{C_{i+1}^t - C_{i-1}^t}{2\Delta r}$$

Approximation centrée de la dérivée 1ère spatiale

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}\right|_i^t \approx \frac{C_{i+1}^t - 2C_i^t + C_{i-1}^t}{\Delta r^2}$$

Approximation centrée de la dérivée 2ème spatiale

- L'opérateur discret devient donc: $L(\tilde{u}) = \frac{C_i^{t+1} - C_i^t}{\Delta t} - D_{eff}\left[\frac{C_{i+1}^{t+1} - 2C_i^{t+1} + C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2} + \frac{1}{r_i}\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{2\Delta r}\right] + kC_i^{t+1}$
- Développements en série de Taylor pour les approximations spatiales (autour de r_i ; $C_i^t = C(r_i)$)

$$C_{i+1}^t = C(r_i) + C'(r_i)\Delta r + C''(r_i)\frac{\Delta r^2}{2} + C'''(r_i)\frac{\Delta r^3}{6} + O(\Delta r^4)$$

$$C_{i-1}^t = C(r_i) - C'(r_i)\Delta r + C''(r_i)\frac{\Delta r^2}{2} - C'''(r_i)\frac{\Delta r^3}{6} + O(\Delta r^4)$$

- Développements en série de Taylor pour l'approximation temporelle (autour de t_i ; $C_i^t = C(t)$)

$$C_i^{t+1} = C(t) + C'(t)\Delta t + C''(t)\frac{\Delta t^2}{2} + C'''(t)\frac{\Delta t^3}{6} + O(\Delta t^4)$$

d) Ordres de convergence formels – temporel et spatial

- On introduit donc les Développements de Taylor dans chaque approximation :

Approximation *Euler implicite* de la dérivée 1ère temporelle
$$\frac{C_i^{t+1}-C_i^t}{\Delta t}=C'(t)+C''(t)\frac{\Delta t}{2}+C'''(t)\frac{\Delta t^2}{6}+O(\Delta t^4)$$

Approximation centrée de la dérivée 1ère spatiale
$$\frac{C_{i+1}^t-2C_i^t+C_{i-1}^t}{\Delta r^2}=C''(r_i)+O(\Delta r^4)$$

Approximation centrée de la dérivée 2ème spatiale
$$\frac{1}{r_i}\cdot\frac{C_{i+1}^t-C_{i-1}^t}{2\Delta r}=\frac{1}{r_i}\cdot C'(r_i)+\frac{1}{6r_i}\cdot C'''(r_i)\Delta r^2+O(\Delta r^4)$$

- En combinant tous les termes dans l'équation de l'opérateur continu, on obtient $\boxed{L_h(C)=L(C)+TE_h(C)}$

$$\Rightarrow\frac{C_i^{t+1}-C_i^t}{\Delta t}-D_{eff}\left[\frac{C_{i+1}^{t+1}-2C_i^{t+1}+C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2}+\frac{1}{r_i}\frac{C_{i+1}^{t+1}-C_{i-1}^{t+1}}{2\Delta r}\right]+kC_i^{t+1}=$$
$$C'(t)+C''(t)\frac{\Delta t}{2}+C'''(t)\frac{\Delta t^2}{6}+O(\Delta t^4)-D_{eff}\left[C''(r_i)+O(\Delta r^4)+\frac{1}{r_i}\cdot C'(r_i)+\frac{1}{6r_i}\cdot C'''(r_i)\Delta r^2+O(\Delta r^4)\right]$$
$$+k\left(C(t)+C'(t)\Delta t+C''(t)\frac{\Delta t^2}{2}+C'''(t)\frac{\Delta t^3}{6}+O(\Delta t^4)\right)=$$
$$C'(t)+C''(t)\frac{\Delta t}{2}+O(\Delta t^2)-D_{eff}\left[C''(r_i)+\frac{1}{r_i}\cdot C'(r_i)+\frac{1}{6r_i}\cdot C'''(r_i)\Delta r^2+O(\Delta r^4)\right]$$
$$+k\left(C(t)+C'(t)\Delta t+O(\Delta t^2)\right)$$
$$\Rightarrow\frac{C_i^{t+1}-C_i^t}{\Delta t}-D_{eff}\left[\frac{C_{i+1}^{t+1}-2C_i^{t+1}+C_{i-1}^{t+1}}{\Delta r^2}+\frac{1}{r_i}\frac{C_{i+1}^{t+1}-C_{i-1}^{t+1}}{2\Delta r}\right]+kC_i^{t+1}=$$
$$C'(t)-D_{eff}\left[C''(r_i)+\frac{1}{r_i}\cdot C'(r_i)\right]+kC(t)+\left[\frac{C''(t)}{2}+kC'(t)\right]\Delta t+\left[-D_{eff}\frac{1}{6r_i}\cdot C'''(r_i)\right]\Delta r^2+O(\Delta t^2,\Delta r^4)$$

- Ainsi, $\boxed{TE_h(C)=\left[\frac{C''(t)}{2}+kC'(t)\right]\boxed{\Delta t}+\left[-D_{eff}\frac{1}{6r_i}\cdot C'''(r_i)\right]\boxed{\Delta r^2}+O(\Delta t^2,\Delta r^4)}$

La méthode est donc formellement
- *d'ordre 1 en temps*
- *d'ordre 2 en espace*

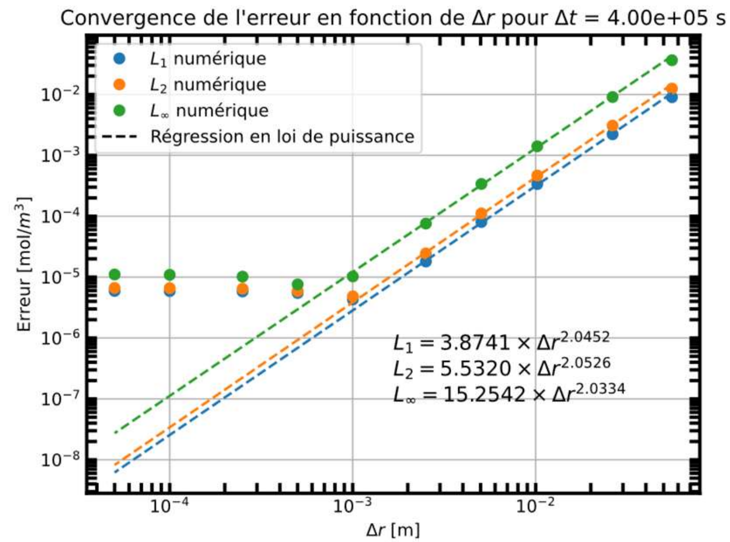
d)

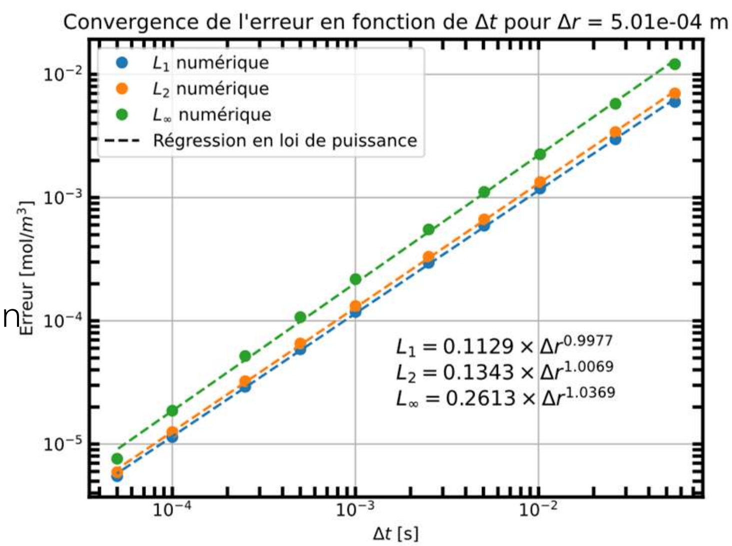
- Pour l'analyse de convergence, les propriétés du problème originel sont utilisées :
  - $R = 0.5\ m$
  - $C_e = 20\ mol/m^3$
  - $D_{eff} = 10^{-10} m^2/s$
  - $k = 4 \times 10^{-9}\ s^{-1}$
  - $t_{final} = 4 \times 10^9\ s$

$$\left.\begin{array}{l} \\ \end{array}\right\} Da = \frac{k\overset{n=1}{\overset{\uparrow}{C_e^{n-1}}}R^2}{D_{eff}} = 10 \left.\begin{array}{l} \\ \end{array}\right\}$$

Le nombre adimensionnel de Damköhler respecte l'ordre de grandeur souhaité entre 0.1 et 10.

- L'analyse de convergence en espace montre que l'erreur entre la solution numérique et la solution manufacturée suit une relation d'ordre 2 avec la taille des éléments, ce qui est attendu pour un schéma en différences finies d'ordre 2 en espace (*voir diapos 7-8*). Cependant, lorsque le pas spatial devient très petit ($\approx 10^{-3}$), la diminution de l'erreur sature, indiquant que l'erreur temporelle devient dominante. Le pas de temps Δt a été choisi aussi petit que possible tout en maintenant un temps de calcul raisonnable.
- Ce phénomène s'explique par le fait que l'erreur globale est influencée à la fois par la discrétisation spatiale et temporelle. Une fois l'erreur spatiale suffisamment réduite, l'erreur temporelle due au choix de Δt limite la précision de la solution.
- L'analyse de convergence en temps montre que l'erreur entre la solution numérique et la solution manufacturée suit une relation d'ordre 1 avec le pas de temps, ce qui est attendu pour un schéma en différences finies d'ordre 1 en temps (*voir diapos 7-8*). Dans cette étude, le pas en espace Δr a été choisi suffisamment fin pour ne pas limiter la précision de la solution. Ainsi, la diminution de l'erreur est directement liée à la réduction du pas de temps Δt, sans être influencée par des erreurs d'approximation spatiale.





e)

- Tous les codes nécessaires pour l'obtention des résultats se trouvent dans le répertoire *src/Devoir2* du GitHub : https://github.com/NhanT2002/MEC8211_Devoir
- Le code principal *main.cpp* pour les calculs a été écrit en C++ en raison de la rapidité de calcul nécessaire pour effectuer l'étude de convergence. Les instructions pour compiler le code sont dans le ficher *README.md*.
- Pour l'étude de convergence, un script Bash automatisé *convergence_analysis.sh* a été utilisé où les valeurs de discrétisation spatiale (N) et temporelle (K) sont modifiées automatiquement dans un fichier de paramètres. Ce script exécute ensuite le programme principal en C++ pour chaque configuration et extrait les erreurs L_1, L_2 et L_∞ à partir de leur affichage dans la console. Les résultats sont enregistrés dans des fichiers *CSV* afin de faciliter leur post-traitement et la génération des graphiques d'analyse de convergence.

f)

- Comme on peut l'observer, les conditions limites et initiale sont respectées; à chaque pas de temps, la concentration à $r = 0.5$m est de 20 mol/m^3. De plus, la concentration initiale est nulle dans l'entièreté du pilier et la condition de Neumann en $r = 0$ m liée à la symétrie du problème est aussi toujours respectée.

- Les deux dernières courbes étant superposées, la solution en régime permanent semble être atteinte au temps final d'environ 126 ans.