

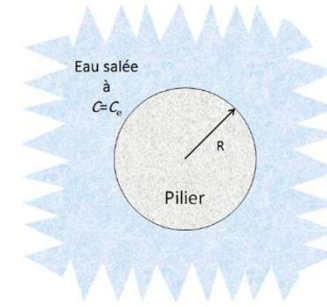


# MEC8211 – Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Devoir 1 : Vérification de code  
H25

Dorian Stefan Dumitru 2080089  
Hieu Nhan Tran 2152473  
Jacob Tremblay 2154148

## Question A)



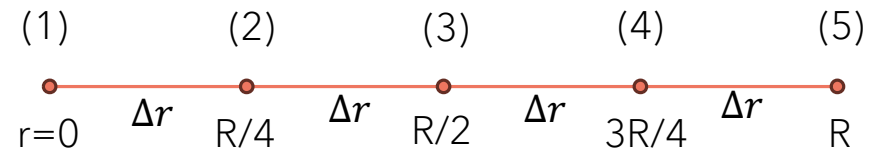
a) On veut résoudre 
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{eff} \nabla^2 C - S$$

- En régime stationnaire, la dérivée temporelle est nulle : 
$$0 = D_{eff} \nabla^2 C - S$$
- Le déterminant est  $\Delta = B^2 - 4AC$  avec  $B=0$  et  $A=C=D_{eff}$
- On trouve ainsi  $\Delta < 0$  ce qui indique un problème elliptique
  - On note aussi l'association avec un problème stationnaire de diffusion comme dans les notes de cours Moodle (MDF, diapo 42):  $0 = \alpha \nabla^2 U + f$ , où  $\alpha \equiv D_{eff}$ ,  $\nabla^2 U \equiv \nabla^2 C$ ,  $f \equiv -S$ .
- b) Notre domaine étant de forme cylindrique, on choisit un système de coordonnées cylindriques  $(r, \theta, z)$
- c) Notre pilier étant infiniment long, la variation en  $z$  peut être négligée. Le domaine étant axisymétrique, la variation en  $\theta$  est nulle.

## Question A) (suite)

d) Notre domaine est ainsi  $r \in [0, R]$ , où  $R = 0.5m$

- On le discrétise avec N points équidistants (ici N=5)
- Ainsi  $\Delta r = \frac{R}{N-1} = \frac{R}{4} = 0.125m$



e) Selon l'énoncé, la concentration de sel à la surface du pilier en  $r = R$  est constante de  $C = C_e = 20 \text{ mol/m}^3$ . Cela définit la première condition limite (1).

- De plus, le domaine étant axisymétrique, on aura une condition de symétrie en  $r = 0$ . Cela définit la deuxième condition limite (2).
- Finalement, les conditions frontières sont :
  - (1) Condition de Dirichlet:  $C|_{r=R} = C_e$
  - (2) Condition de Neumann:  $\frac{\partial C}{\partial r}|_{r=0} = 0$
- En régime stationnaire, il n'est pas nécessaire de spécifier une condition initiale.

## Question B)

1) On part de l'équation en régime stationnaire:

$$D_{eff} \cdot \nabla^2 C - S = 0$$

2) On utilise les notes de Mme D'Avignon pour exprimer le Laplacien de la concentration en coordonnées cylindriques, en utilisant les simplifications trouvées en A c):

$$D_{eff} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) \right] - S = 0$$

3) En reformulant l'équation, il est possible d'intégrer les deux côtés de l'équation:

$$\int \partial \left( r \frac{\partial C}{\partial r} \right) = \int r \frac{S}{D_{eff}} \partial r \Rightarrow r \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{r^2}{2} \frac{S}{D_{eff}} + C_1$$

4) En appliquant la condition de Neumann  $\left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$ , il est possible de trouver la valeur de la constante  $C_1$ :

$$0 \cdot 0 = \frac{0^2}{2} \frac{S}{D_{eff}} + C_1 \Rightarrow C_1 = 0$$

5) En reformulant l'équation trouvée en 3) avec  $C_1 = 0$ , il est à nouveau possible d'intégrer les deux côtés de l'équation:

$$\int \partial C = \int \frac{r}{2} \frac{S}{D_{eff}} \partial r \Rightarrow C(r) = \frac{r^2}{4} \frac{S}{D_{eff}} + C_2$$

6) En appliquant la condition de Dirichlet  $C|_{r=R} = C_e$ , il est possible de trouver la valeur de la constante  $C_2$ :

$$C_e = \frac{R^2}{4} \frac{S}{D_{eff}} + C_2 \Rightarrow C_2 = C_e - \frac{R^2}{4} \frac{S}{D_{eff}}$$

7) En reformulant l'équation trouvée en 5) avec  $C_2$  trouvé en 6), il est possible de trouver le profil de concentration de sel, qui est sous forme quadratique:

$$C(r) = \frac{r^2}{4} \frac{S}{D_{eff}} + C_e - \frac{R^2}{4} \frac{S}{D_{eff}}$$

$$C(r) = \frac{1}{4} \frac{S}{D_{eff}} (r^2 - R^2) + C_e$$

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

## Question C)

a) Comme le domaine cylindrique est axisymétrique, on a  $\nabla^2 C = \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}$

- En réarrangeant l'équation à résoudre en régime permanent, on obtient  $\frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} = \frac{S}{D_{eff}}$

- En remplaçant enfin les dérivées par les schémas de différenciation imposés, on obtient finalement l'équation suivante au nœud i :

$$\frac{1}{r_i} \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta r} + \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} = \frac{S}{D_{eff}}$$

- On peut réécrire cette dernière équation de cette manière :

$$\frac{1}{\Delta r^2} C_{i-1} - \left( \frac{1}{r_i \Delta r} + \frac{2}{\Delta r^2} \right) C_i + \left( \frac{1}{r_i \Delta r} + \frac{1}{\Delta r^2} \right) C_{i+1} = \frac{S}{D_{eff}}$$

## Question C) (suite)

- L'équation précédente peut être appliquée à chaque nœud intérieur au domaine, soit les nœuds (2), (3) et (4)
- Aux nœuds (1) et (5), on applique les conditions limites posées à la question A) à l'aide des équations suivantes :

$$(1) \quad \longrightarrow \quad \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{(1)} = \frac{C_2 - C_1}{\Delta r} = 0 \quad \longrightarrow \quad C_2 - C_1 = 0$$

$$(5) \quad \longrightarrow \quad C_5 = C_e$$

c) Les schémas de différenciation utilisés pour les dérivées 1<sup>ère</sup> et 2<sup>nde</sup> ont respectivement les erreurs de troncature  $O(\Delta r)$  et  $O(\Delta r^2)$ , on s'attend donc à ce que le schéma global possède une erreur de troncature  $O(\Delta r)$ . Ainsi, le schéma global devrait être d'ordre 1.

## Question C) (suite)

b) À l'aide des équations aux 5 nœuds du domaine, on peut construire et résoudre un système matriciel pour obtenir les concentrations discrètes à chacun de ces nœuds :

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\Delta r^2} & \frac{-1}{r_2 \Delta r} - \frac{2}{\Delta r^2} & \frac{1}{r_2 \Delta r} + \frac{1}{\Delta r^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\Delta r^2} & \frac{-1}{r_3 \Delta r} - \frac{2}{\Delta r^2} & \frac{1}{r_3 \Delta r} + \frac{1}{\Delta r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\Delta r^2} & \frac{-1}{r_4 \Delta r} - \frac{2}{\Delta r^2} & \frac{1}{r_4 \Delta r} + \frac{1}{\Delta r^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ S/D_{eff} \\ S/D_{eff} \\ S/D_{eff} \\ C_e \end{bmatrix}$$

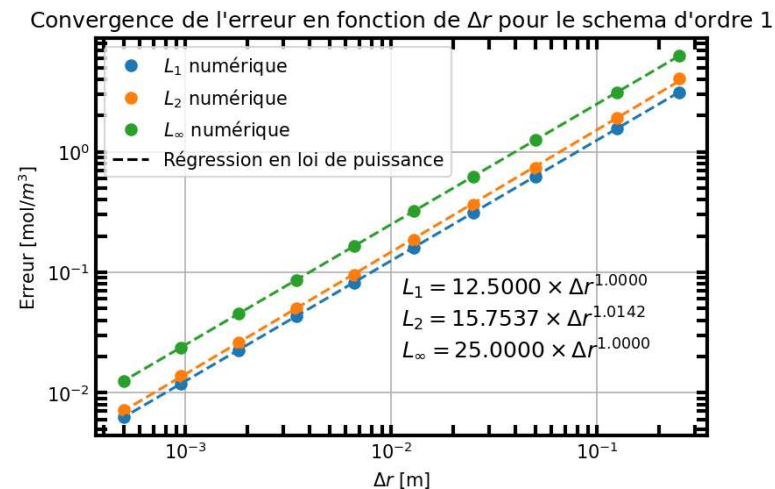
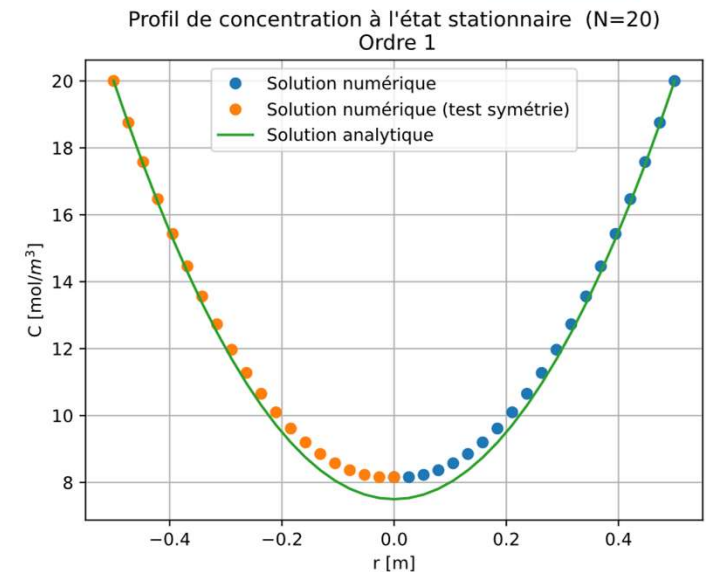
- En considérant les valeurs des variables pour une discrétisation de 5 nœuds ( $r_2 = 0.125$  ;  $r_3 = 0.25$  ;  $r_4 = 0.375$  ;  $\Delta r = 0.125$  ;  $S = 2 \cdot 10^{-8}$  ;  $D_{eff} = 10^{-10}$  ;  $C_e = 20$ ), on obtient les concentrations discrètes suivantes :

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10.625 \\ 10.625 \\ 12.1875 \\ 15.3125 \\ 20 \end{bmatrix} \text{ mol/m}^3$$

## Question D)

[https://github.com/NhanT2002/MEC8211\\_Devoir](https://github.com/NhanT2002/MEC8211_Devoir)

- a) En comparant les concentrations obtenues sur des éléments de différentes tailles avec la solution analytique, on peut remarquer que les trois erreurs calculées varient selon une relation d'ordre 1 avec la taille des éléments.
  - b) Ce résultat contribue à la vérification du code, puisqu'il concorde avec l'ordre de précision attendu du schéma global.
- Le test de symétrie a aussi été effectué pour vérifier le code. Le domaine est discrétisé de 0 à  $-R$  tout en gardant les mêmes conditions limites sur le premier et dernier nœud. Tel qu'attendu, la solution numérique est symétrique en  $r = 0$ .





## Question E)

- a) En remplaçant la dérivée 1<sup>ère</sup> par une approximation centrée, on obtient l'équation suivante aux nœuds (2), (3) et (4) :

$$\frac{1}{r_i} \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta r} + \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta r^2} = \left( \frac{1}{\Delta r^2} - \frac{1}{2r_i \Delta r} \right) C_{i-1} - \frac{2}{\Delta r^2} C_i + \left( \frac{1}{\Delta r^2} + \frac{1}{2r_i \Delta r} \right) C_{i+1} = \frac{S}{D_{eff}}$$

- Comme le schéma de différenciation pour la dérivée 1<sup>ère</sup> est maintenant d'ordre 2, la condition limite au nœud (1) doit être modifiée pour aussi être d'ordre 2 :

$$(1) \longrightarrow \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{(1)} = \frac{-C_3 + 4C_2 - 3C_1}{2\Delta r} = 0 \longrightarrow -C_3 + 4C_2 - 3C_1 = 0$$

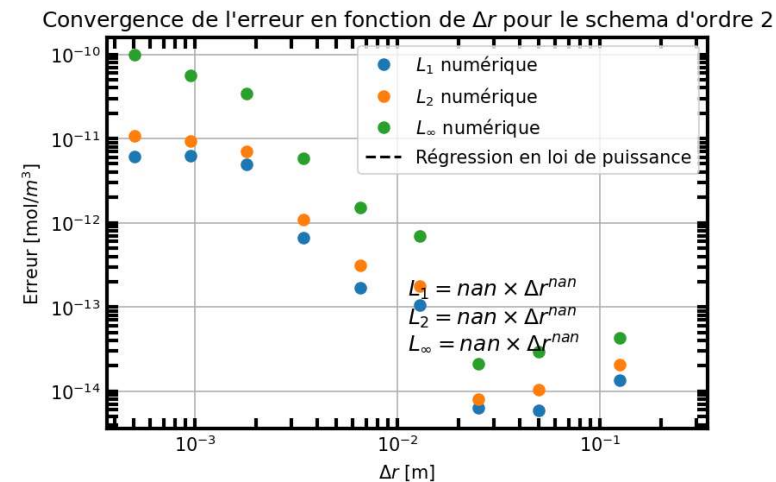
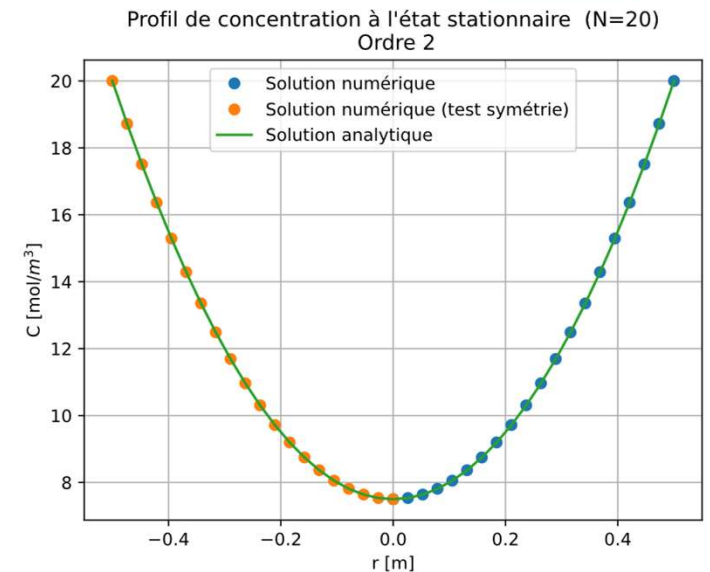
- Les nouveaux schémas de différenciation utilisés possèdent tous deux une erreur de troncature  $O(\Delta r^2)$ , on s'attend donc à ce que le schéma global possède une erreur de troncature  $O(\Delta r^2)$ . Ainsi, le schéma global devrait être d'ordre 2.

- Après résolution du système matriciel, les concentrations discrètes calculées sont :
- $$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.5 \\ 8.28125 \\ 10.625 \\ 14.53125 \\ 20 \end{bmatrix} \text{ mol/m}^3$$

## Question E) (suite)

b) On observe que graphiquement, la solution numérique est confondue à la solution analytique.

- Comme la solution analytique est une équation quadratique d'ordre 2, le schéma numérique global d'ordre 2 approxime parfaitement la solution.
- Pour cette raison, les erreurs se trouvent déjà à la précision machine au maillage le plus grossier; ces erreurs semblent augmenter lorsque le maillage se raffine puisque les erreurs à la précision machine de chaque élément sont cumulées.



## Question E) (suite)

c) En comparant les solutions numériques des deux schémas d'ordre différent, on constate que le schéma d'ordre 2 approxime mieux, même parfaitement, la solution analytique que le schéma d'ordre 1.

