MEC8211 – Hiver 2024
Devoir 1 – Vérification de code – 8,33%
Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Date de remise sur Moodle et GitHub : 12/02 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;*
- *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 le GitHub du cours et démonter l'utilisation de Git durant la phase d'écriture du code et fournir l'adresse du dépôt dans votre présentation PowerPoint;*
- *Apporter une attention particulière à qualité de vos graphiques. Tracez 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 les directives pour le compiler et une version compilée);*
- *Noter que l'énoncé de ce devoir servira en fait de base aux devoirs 1 et 2.*

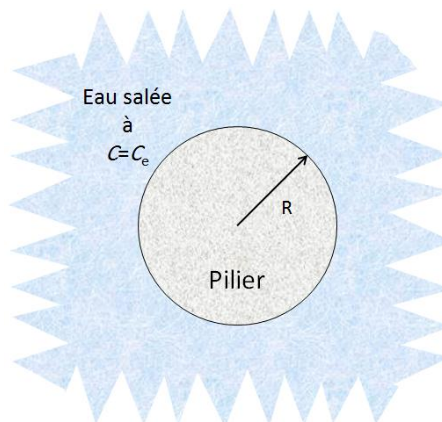
Barème d'évaluation :

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 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 $C = C_e = 12$ 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.

Mme D'AVIGNON vous demande d'écrire rapidement un **code de différences finies** pour résoudre ce problème transitoire 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 $S = 8 \times 10^{-9}$ mol/m^3/s:

A) Simplifier et établir le problème :

a. préciser de quel type est l'Éq. (1);

b. réduire au maximum la dimensionnalité du problème, préciser l'existence ou non de symétrie dans le domaine et justifier vos choix;

c. présenter en conséquence une discrétisation du domaine en N_{tot}=5 nœuds (faire un schéma et montrer la position exacte de tous les nœuds) tout en veillant à minimiser la taille des intervalles dans le but de maximiser la précision. Préciser la taille des intervalles choisis;

d. d'après l'énoncé, préciser:

   i. les conditions frontières (et leurs types) nécessaires à la résolution du problème;

   ii. si nécessaire, la condition initiale requise.

B) 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) et les conditions frontières par les schémas de différenciation suivants en espace :

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

et un schéma d'Euler implicite en temps. Préciser entre autres**:**

a. l'équation obtenue en chacun des nœuds (incluant les nœuds frontières);

b. la méthode générale pour résoudre le système d'équations en présence;

c. ce que l'on peut dire sur les ordres de précision attendus du schéma global ?

d. s'il y a lieu, la condition de stabilité du schéma numérique.

C) L'Éq. (1) décrivant un processus diffusif, obtenir l'équation elliptique résultante lorsque le régime stationnaire est atteint. Résoudre analytiquement l'équation elliptique obtenue en considérant les conditions frontières choisies :

a. spécifiquement, montrer que le profil de concentration en sel est de forme quadratique et s'écrit comme:

$$C(r) = \frac{1}{4}\frac{\mathrm{S}}{\mathrm{D_{eff}}}R^2\left(\frac{r^2}{R^2}-1\right) + C_e\ ; \tag{3}$$

D) Écrire un code de calcul générique (c-à-d pour un N_{tot} non précisé d'avance) pour résoudre l'Éq. (1) (avez S une réaction du premier ordre ou un terme source constant en fonction des spécifications du problème). Celui-ci nous servira particulièrement pour le Devoir 2. Tracer le profil de concentration obtenu à l'état stationnaire.

E) A partir de ce code générique, soit écrire un code pour résoudre le cas stationnaire directement ou soit faire rouler le code jusqu'à la solution stationnaire (c-à-d l'Eq.(3) développée avec S constant).

a. préciser tous les paramètres de la simulation utilisés.

b. tenter de faire une vérification appropriée du code en utilisant la solution analytique

(Eq.(3)). Entre autres, tracer sur un même graphique les erreurs L_1, L_2 et L_∞.

c. constatez-vous un problème avec cette procédure de vérification ?

F) Remplacer maintenant les schémas de différenciation précédents par ceux-ci :

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

et les implanter dans votre code.

a. refaire les vérifications.

b. tracer les profils de concentration obtenus avec les deux schémas numériques.

c. que constatez-vous maintenant ?

A 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 :

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

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