

Physique Numérique I-II semaines 17-18

- **Advection-Diffusion**
- Schéma différences finies explicite à 2 niveaux
- Limites de stabilité. Analyse de Von Neuman
- Diffusion numérique
- Comparaison avec la méthode de Langevin
- Notes de cours: **4.1** et **Annexe D**

- **Problèmes à valeurs aux bords. Eléments finis**
- Forme variationnelle
- Représentation en éléments finis
- Conditions aux limites
- Notes de cours: **3.2.4** et **3.2.5**

Advection et Diffusion

4.1.1- 4.1.2

Flux de matière: $\vec{j} = f \vec{v} - D \vec{\nabla} f$

Conservation de la masse (Eq. Continuité):

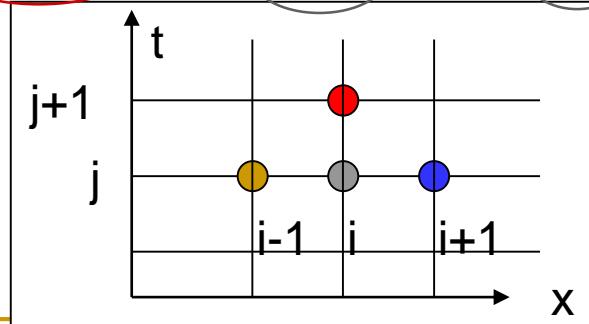
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

Cas 1D, incompressible, $D=\text{const}$, $v=\text{const}$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0 \quad (4.19)$$

Différences finies Schéma explicite 2 niveaux

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta (f_{i,j} - f_{i-1,j}) + \alpha (f_{i-1,j} - 2f_{i,j} + f_{i+1,j})$$



$$\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (\text{CFL})$$

$$\alpha = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$$

Advection – Schéma explicite 2 niveaux

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta (f_{i,j} - f_{i-1,j})$$

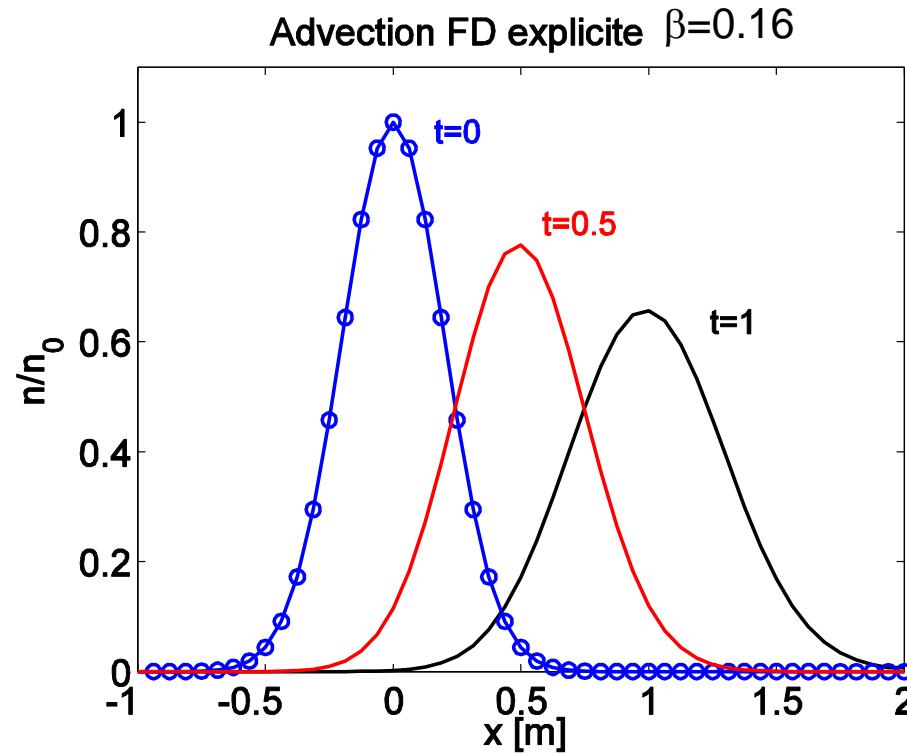
- Paramètre CFL (Courant, Friedrichs, Lewy)

$$\boxed{\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

- On verra que ce schéma est instable si $\beta > 1$ ou si $\beta < 0$
- On verra aussi que ce schéma, lorsqu'il est stable, introduit de la diffusion non-physique («diffusion numérique»)

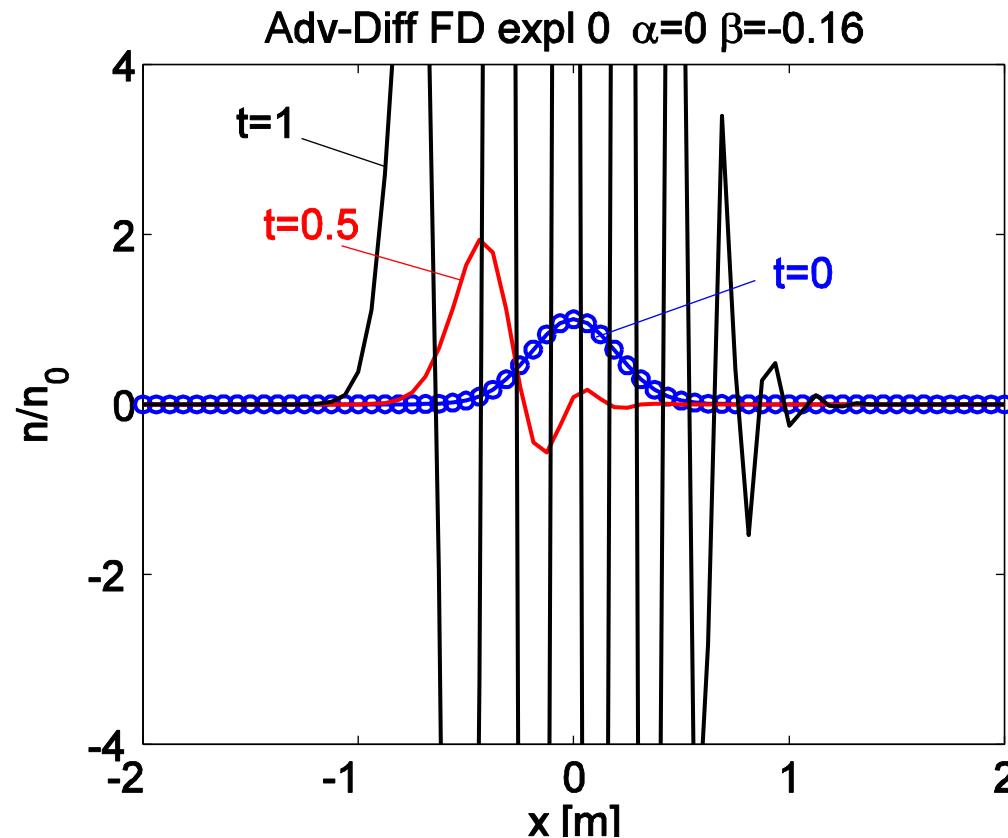
Advection

- Différences finies, explicite 2 niveaux, $v=+1$
 - Forward (t)
 - Backward (x)



Advection, $v < 0$

- Différences finies, explicite 2 niveaux, $v = -1$
 - Forward (t)
 - Backward (x)



Advection – schéma upwind

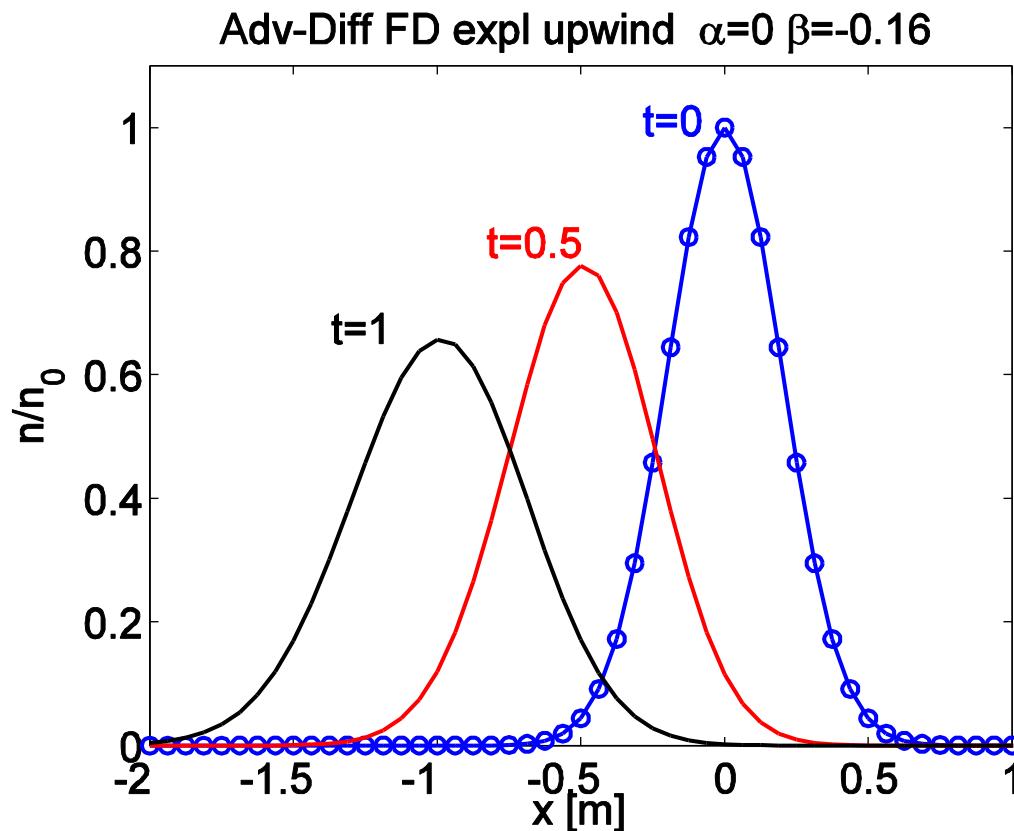
- Différences finies, explicite 2 niveaux, $u=-1$

- Forward (t)

- Forward (x) (UPWIND)

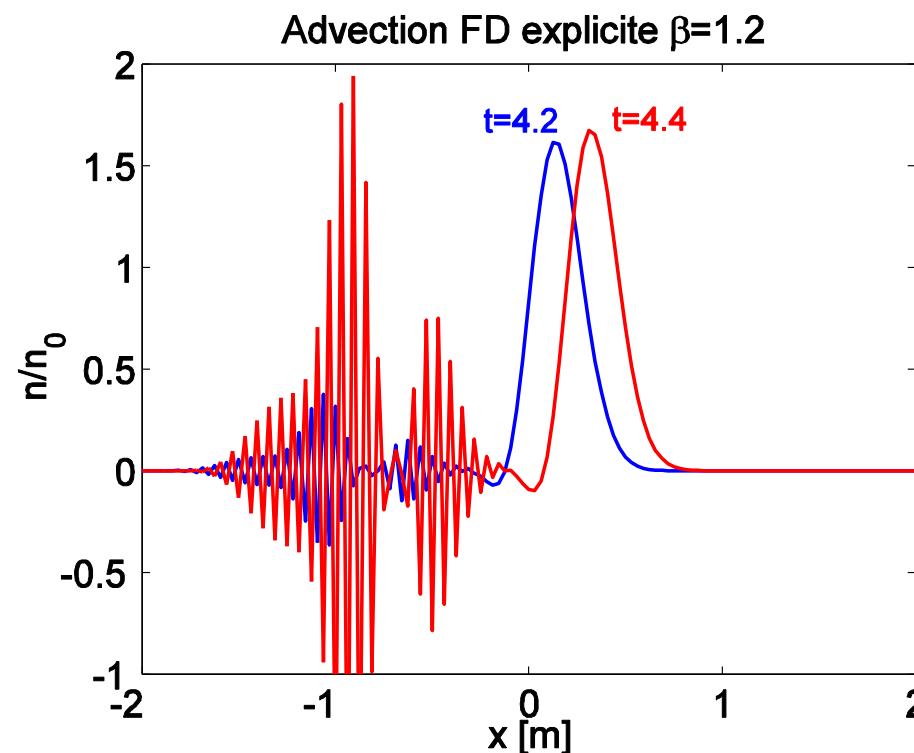
$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta (f_{i,j} - f_{i-1,j}) \text{ si } \beta \geq 0$$

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta (f_{i+1,j} - f_{i,j}) \text{ si } \beta < 0$$



Advection - Instabilité

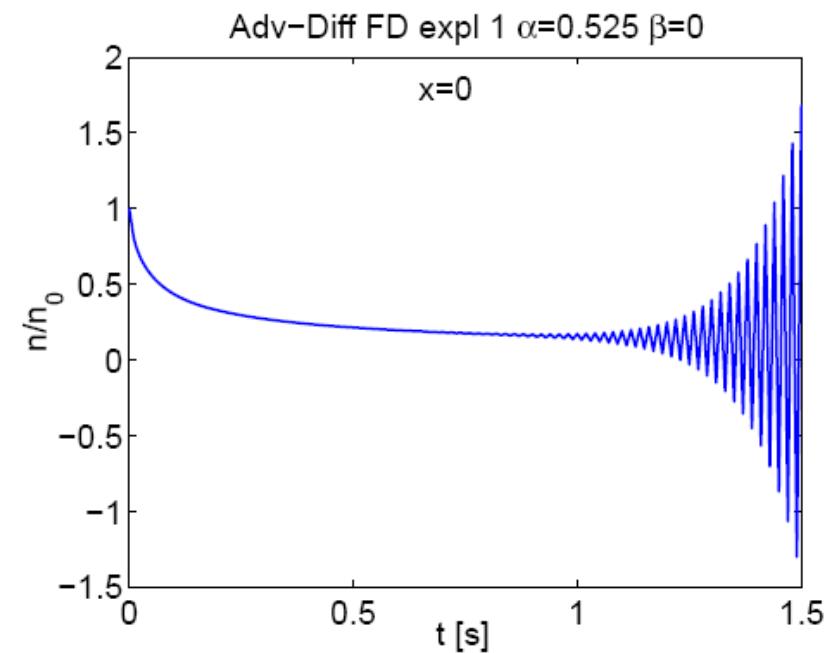
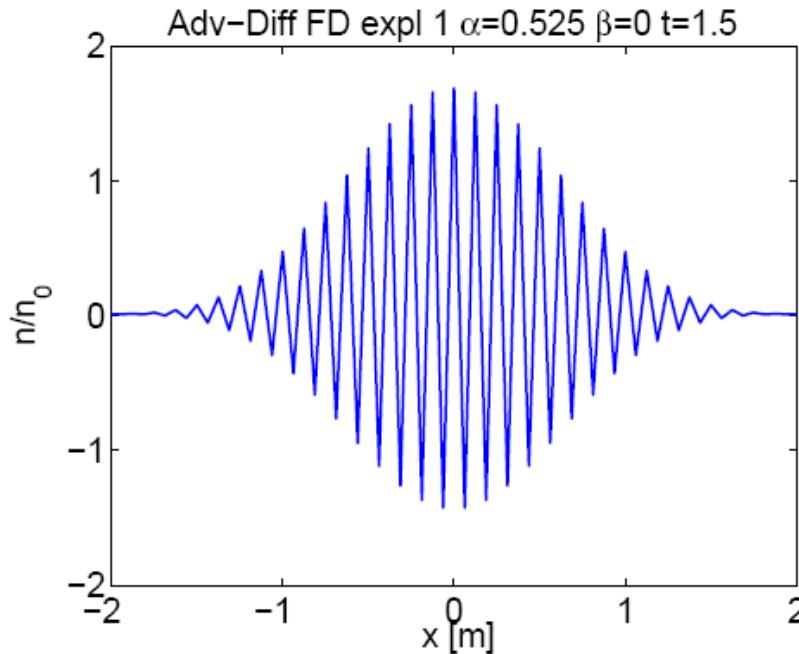
- Différences finies, explicite 2 niveaux, $u=1$
 - Forward (t)
 - Forward (x) (UPWIND) $\text{CFL}=1.2$ $nx=128$



- Le schéma est instable pour $|\text{CFL}|>1.0$

Diffusion - Instabilité

- Différences finies, explicite 2 niveaux. Diffusion seule



Croissance exponentielle dans le temps d'une perturbation de courte longueur d'onde (2 points de maillage par longueur d'onde)

Advection et diffusion. Différences finies. Schéma explicite 2 niveaux. Critères de **stabilité** numérique.

$$0 \leq \beta \leq 1$$

$$\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \text{CFL}$$

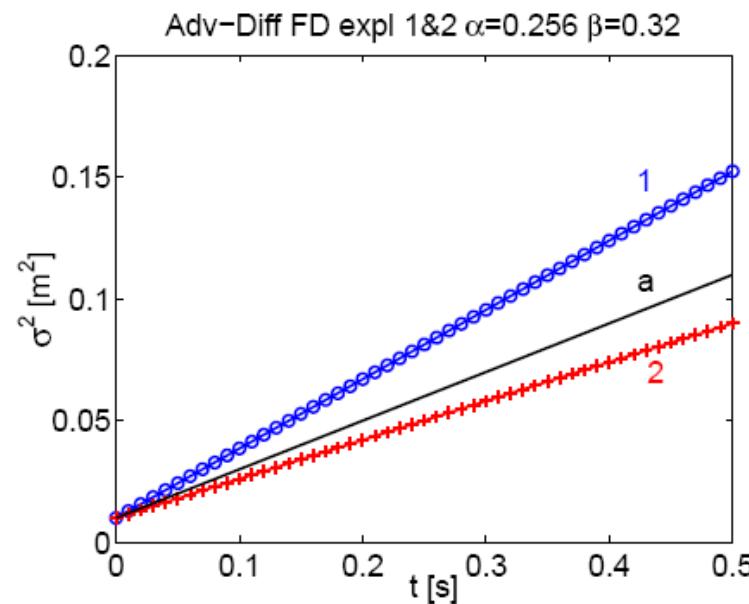
Courant-Friedrichs-Lowy

$$0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}$$

$$\alpha = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$$

La démonstration sera présentée ultérieurement. Voir Notes de Cours 4.1.3

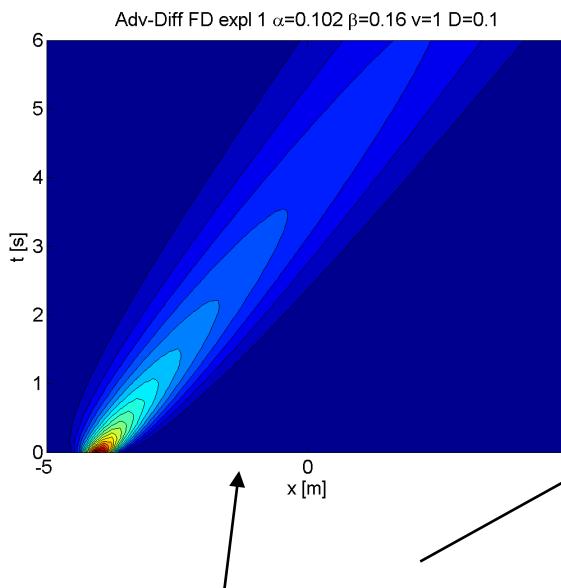
Advection-Diffusion. Diffusion numérique



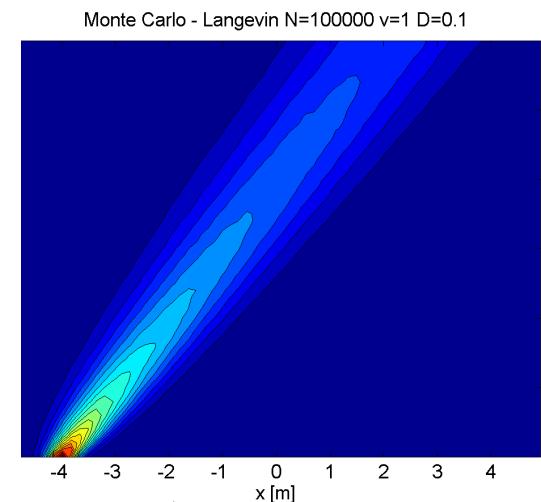
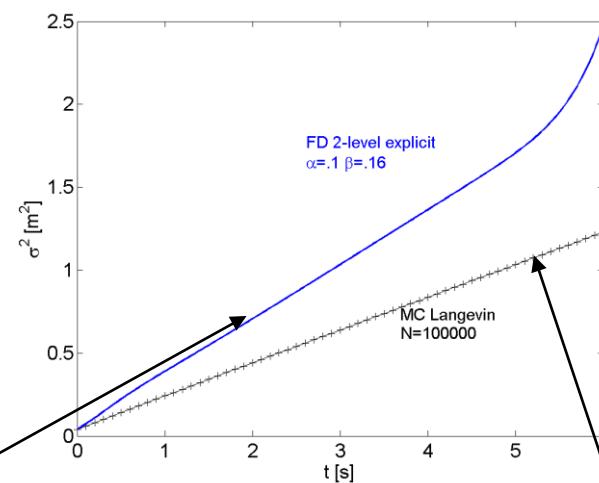
- Evolution de la variance: (a) solution analytique, (1) solution numérique avec schéma explicite à 2 niveaux et advection upwind, (2) advection centrée
- Le surcroît de diffusion est un artefact dû à la diffusion numérique créée par le schéma de l'advection upwind

Euler ou Lagrange? Radar ou mouchard?

Comparaison entre schéma numérique «Eulérien» et schéma numérique «Lagrangien» ou «particle»



Eulerien, différences finies explicite 2 niveaux Limite de stabilité Diffusion numérique

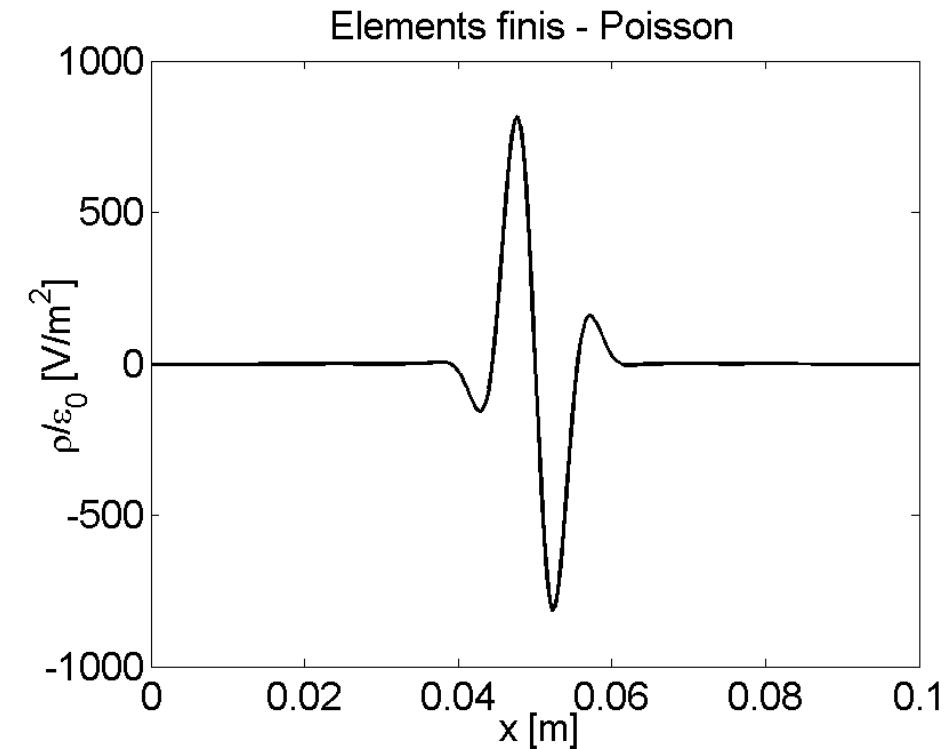


Lagrangien, Langevin: Pas de diffusion numérique Pas de limite de stabilité CFL! (Δt arbitraire)

Eléments finis

- Eléments finis
 - Notes de Cours, Section 3.2.4
- Illustration sur un problème électrostatique 1D
 - Notes de Cours, Section 3.2.5

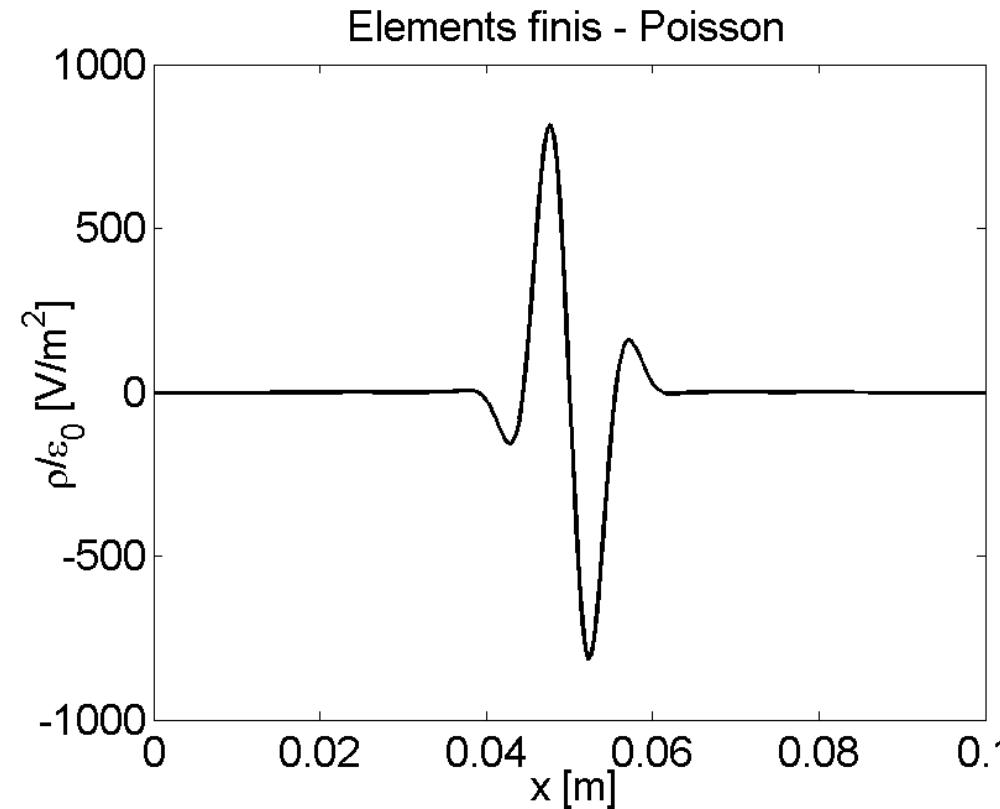
La présentation sera faite au tableau noir, pour le cas de l'électrostatique avec charges libres, sans diélectrique



Elements finis 1D

■ Cas de l'équation de Poisson 1-D

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}(x) = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_0} \quad \forall x \in]x_a, x_b[\quad \phi(x_a) = V_a, \phi(x_b) = V_b$$



Elements finis linéaires 1D

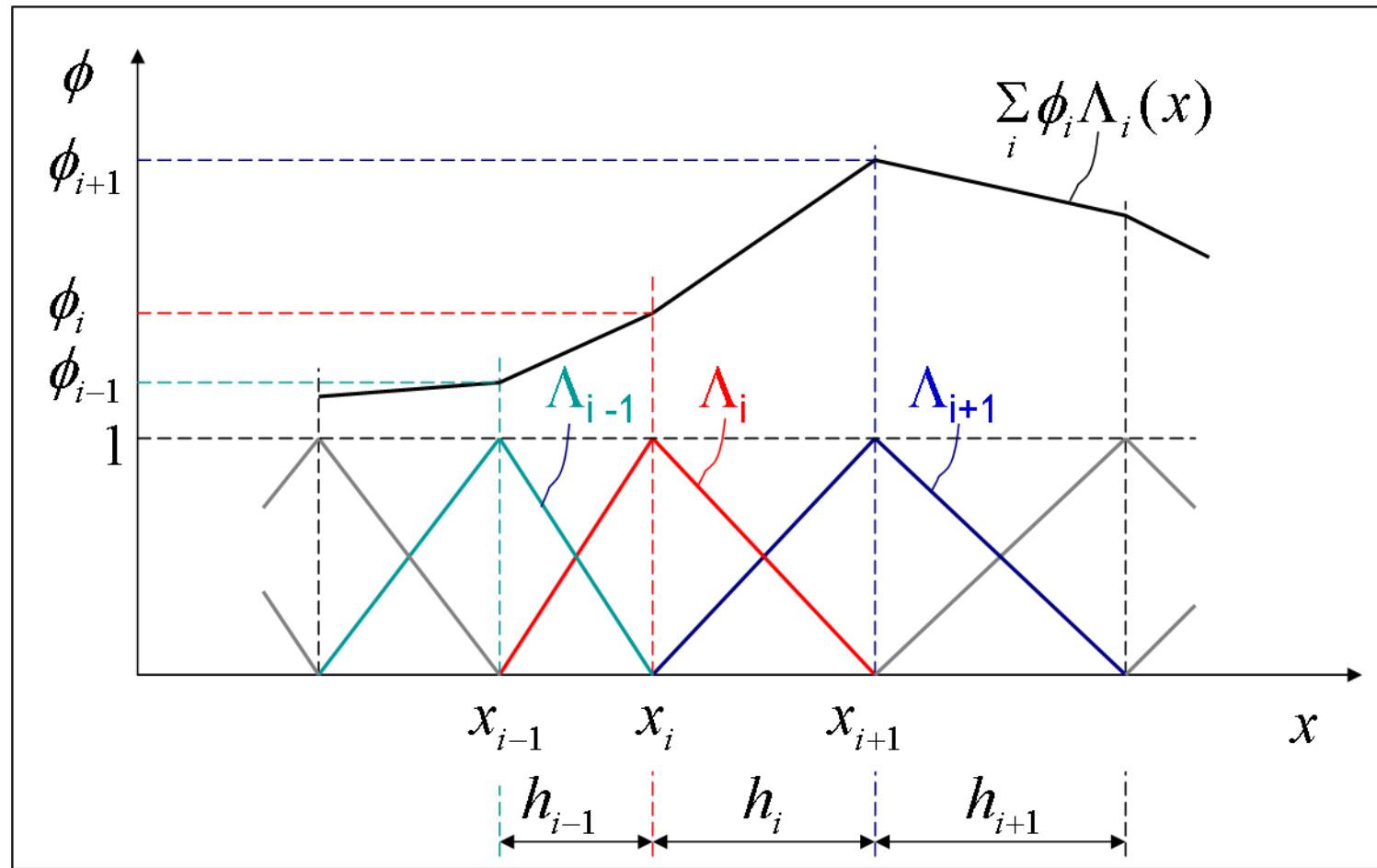


Figure 3.4 – Fonctions de base $\Lambda_i(x)$ et représentation (approximation) d'une fonction $\phi(x)$ par ces éléments finis.

Éléments finis – forme variationnelle

Éléments finis. Équation de Poisson

3D.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$

Soit $g(\vec{x}) \in C^0(\Omega)$

Soit $\gamma(\vec{x}) \in C^1(\Omega) \mid \gamma(\vec{x}) = 0, \forall \vec{x} \in \partial\Omega$

Soit $V(\vec{x})$ donné $\forall \vec{x} \in \partial\Omega$

Pour l'Ex. 6, cette Eq. n'est pas correcte!

- Trouver $\phi(\vec{x}) \in C^2(\Omega)$ tel que: $\nabla^2 \phi(\vec{x}) = -g(\vec{x})/\epsilon_0, \forall \vec{x} \in \Omega \setminus \partial\Omega$
et $\phi(\vec{x}) = V(\vec{x}), \forall \vec{x} \in \partial\Omega$

- Forme variationnelle du problème:

Trouver $\phi(\vec{x}) \in C^2(\Omega)$ tel que :

$$\int_{\Omega} \gamma(\vec{x}) \nabla^2 \phi(\vec{x}) d\vec{x} = - \int_{\Omega} \gamma(\vec{x}) g(\vec{x}) / \epsilon_0 d\vec{x}, \forall \gamma \in C^1(\Omega) \mid \gamma(\vec{x}) = 0 \setminus \partial\Omega$$

et $\phi(\vec{x}) = V(\vec{x}), \forall \vec{x} \in \partial\Omega$

On prend $\gamma(\vec{x}) = 0$ sur $\partial\Omega$ ~~mais~~, ce qui veut dire qu'on ne fait pas la variation sur les points du bord, mais on impose explicitement les conditions aux limites.

Éléments finis – intégration par parties

L'étape suivante est une intégration par parties.
On utilise l'identité vectorielle :

$$\vec{\nabla} \cdot (\eta \vec{\nabla} \phi) = \vec{\nabla} \eta \cdot \vec{\nabla} \phi + \eta \vec{\nabla}^2 \phi$$

Et de l'héorème de la divergence, ou théorème de Gauss :

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} d^3x = \oint_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \hat{d}\sigma$$

On obtient

$$-\int_{\Omega} \vec{\nabla} \eta \cdot \vec{\nabla} \phi d^3x + \int_{\partial\Omega} \eta \vec{\nabla} \phi \cdot \hat{d}\sigma = -\int_{\Omega} \eta S/\epsilon_0 d^3x, \quad \forall \eta \mid \eta(\vec{x})=0 \text{ sur } \partial\Omega$$

et $\phi(\vec{x}) = V(\vec{x})$, $\forall \vec{x} \in \partial\Omega$. Le 2^e terme est nul, puisque η est nul sur $\partial\Omega$.

Pour l'exercice 6, il est recommandé de suivre jusqu'à ce point une démarche similaire, générale en 3D, et seulement à partir de ce point de spécifier les coordonnées.

Pour l'exercice 6, coordonnées cylindriques. Pour le cours, coord. cartésiennes en 1D: $\Omega = [x_a, x_b]$; $V(x_a) = V_a$; $V(x_b) = V_b$.

$$-\int_{x_a}^{x_b} \frac{d\eta}{dx} \frac{d\phi}{dx} dx = -\int_{x_a}^{x_b} \eta S/\epsilon_0 dx, \quad \forall \eta \mid \eta(a)=\eta(b)=0$$

et $\phi(x_a) = V_a$, $\phi(x_b) = V_b$.

Elements finis – fonctions de base

- C'est à ce point que l'on introduit les éléments finis : on approxime les fonctions $\phi(x)$ et $\eta(x)$ sur une base de fonctions $\Lambda_j(x)$, $j=1..N$, polynômes par morceaux, de support fini. Voir Figure 3.4 Notes de Cours.

$$\phi(x) \approx \sum_{j=1}^N \phi_j \Lambda_j(x)$$

$$\eta(x) \approx \sum_{i=1}^N \eta_i \Lambda_i(x) \quad \eta_1 = 0, \eta_N = 0$$

Insérant dans la forme variationnelle,

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \eta_i \int_{x_a}^{x_b} \frac{d\Lambda_i}{dx} \frac{d\Lambda_j}{dx} dx \phi_j = \sum_i \eta_i \int_{x_a}^{x_b} \Lambda_i S/E_0 dx, \quad \forall \eta_i$$

Cette relation doit être valable pour tout choix de $\{\eta_i\}$, $i=2..N-1$, elle doit être satisfaite pour chacun des termes de la somme sur i , et donc

$$\sum_j A_{ij} \phi_j = b_i$$

Du, en notation matricielle, $\underline{A} \underline{\phi} = \underline{b}$, avec :

$$A_{ij} = \int_{x_a}^{x_b} \frac{d\Lambda_i}{dx} \frac{d\Lambda_j}{dx} dx$$

$$b_i = \int_{x_a}^{x_b} \Lambda_i S/E_0 dx$$

Elements finis – conditions aux limites

Il faut, en plus, imposer les conditions aux limites.

$$\phi(x_a) = V_a \Rightarrow \Phi_1 = V_a$$

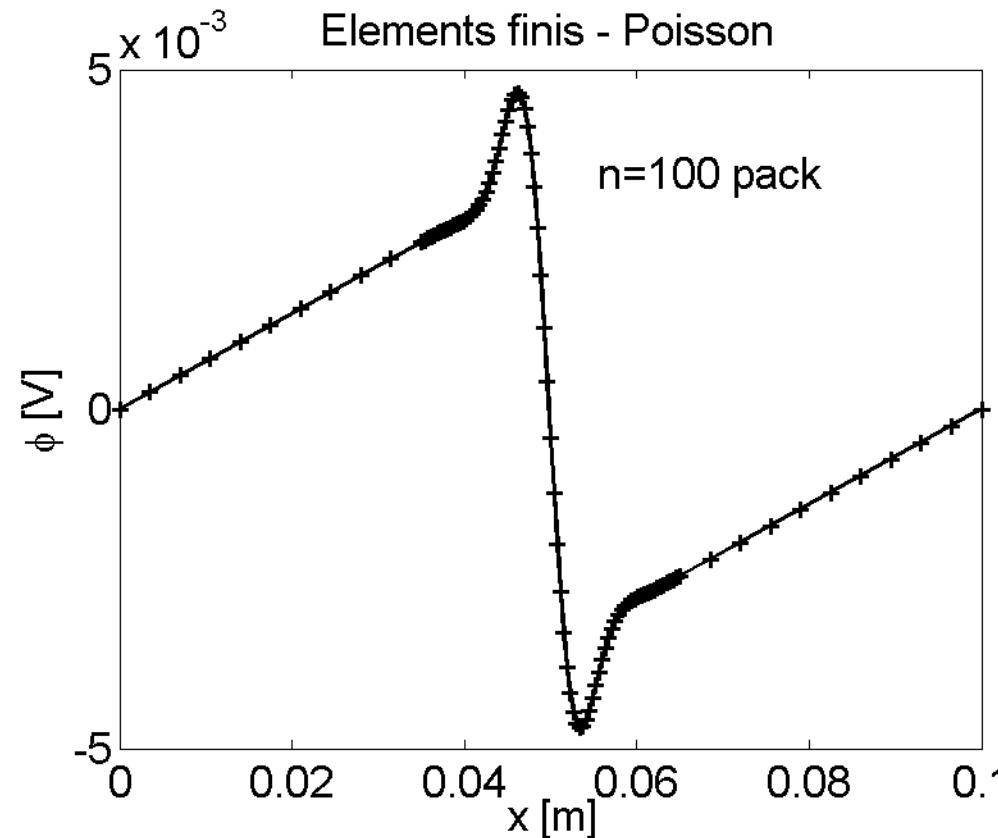
$$\phi(x_b) = V_b \Rightarrow \Phi_N = V_b$$

Ces conditions sont satisfaites si, dans le problème algébrique linéaire $\underline{A}\underline{\Phi} = \underline{b}$ on modifie ainsi les éléments de matrice et du membre de droite :

$$A_{11} = 1, \quad A_{12} = 0, \quad \dots, \quad A_{1N} = 0, \quad b_1 = V_a$$

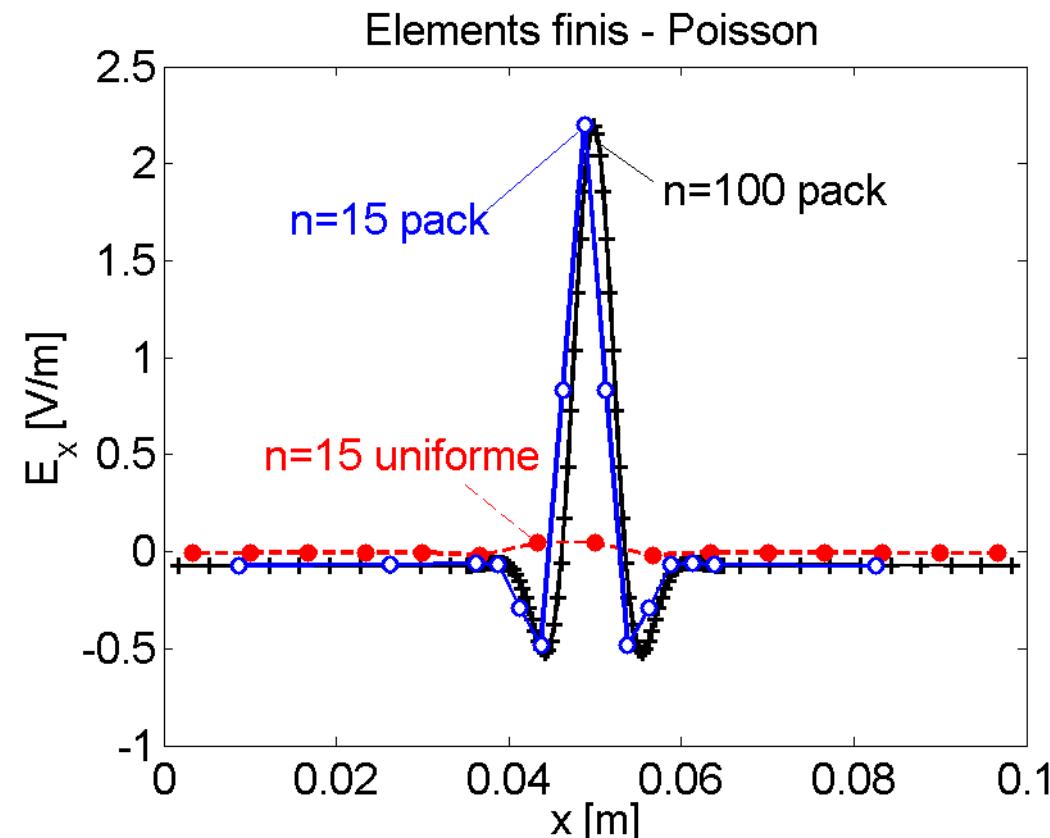
$$A_{N1} = 0, \quad \dots, \quad A_{N,N-1} = 0, \quad A_{NN} = 1, \quad b_N = V_b$$

Elements finis linéaires 1D



- La méthode des éléments finis permet naturellement d'utiliser des maillages non-équidistants ...

Elements finis linéaires 1D



- ... ce qui améliore la convergence numérique

Questions algorithmiques

- Il est fortement recommandé de procéder à l'assemblage de la matrice et du membre de droite **intervalle par intervalle**

$$A_{ij} = \int_{x_a}^{x_b} \frac{d\Lambda_i}{dx} \frac{d\Lambda_j}{dx} dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{d\Lambda_i}{dx} \frac{d\Lambda_j}{dx} dx$$

$$b_i = \int_{x_a}^{x_b} \frac{\rho}{\varepsilon_0} \Lambda_i dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{\rho}{\varepsilon_0} \Lambda_i dx .$$

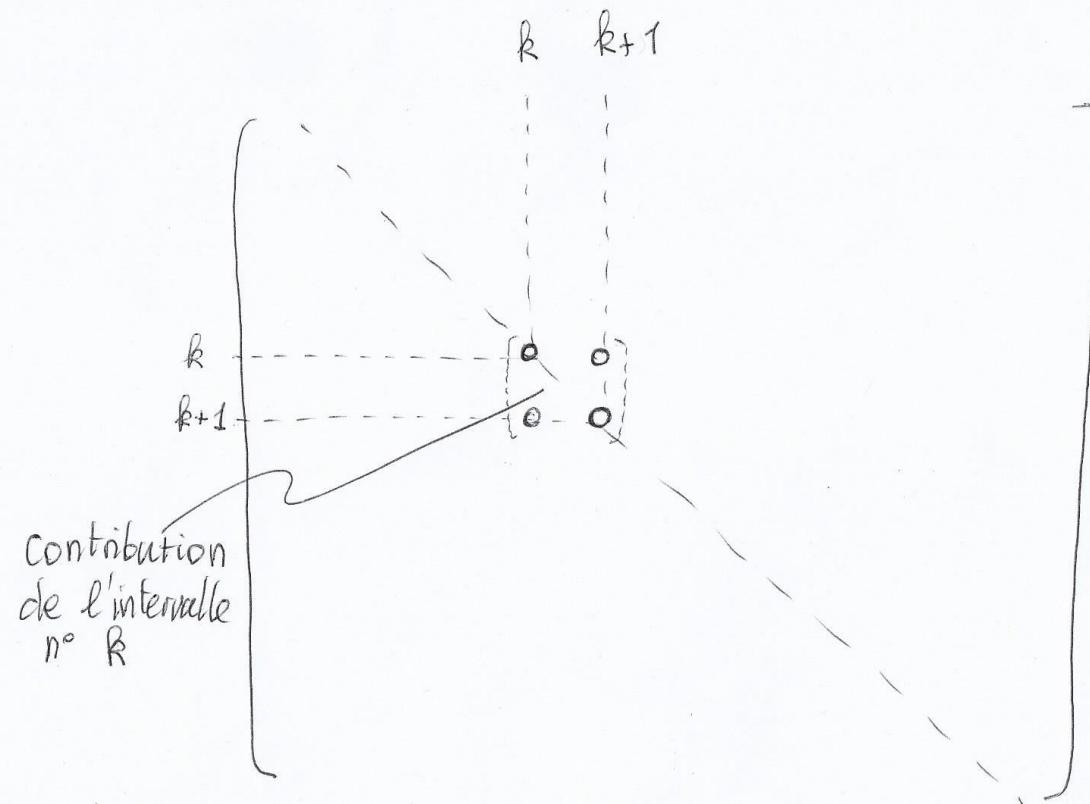
- Boucle sur les **intervalles k**

$$\mathbf{A} = \mathbf{A} + \begin{pmatrix} & (k) & (k+1) \\ & \cdot & \cdot \\ (k) & \cdot & 1/h_k & -1/h_k \\ (k+1) & -1/h_k & 1/h_k & \cdot \\ & & & \cdot \end{pmatrix}$$

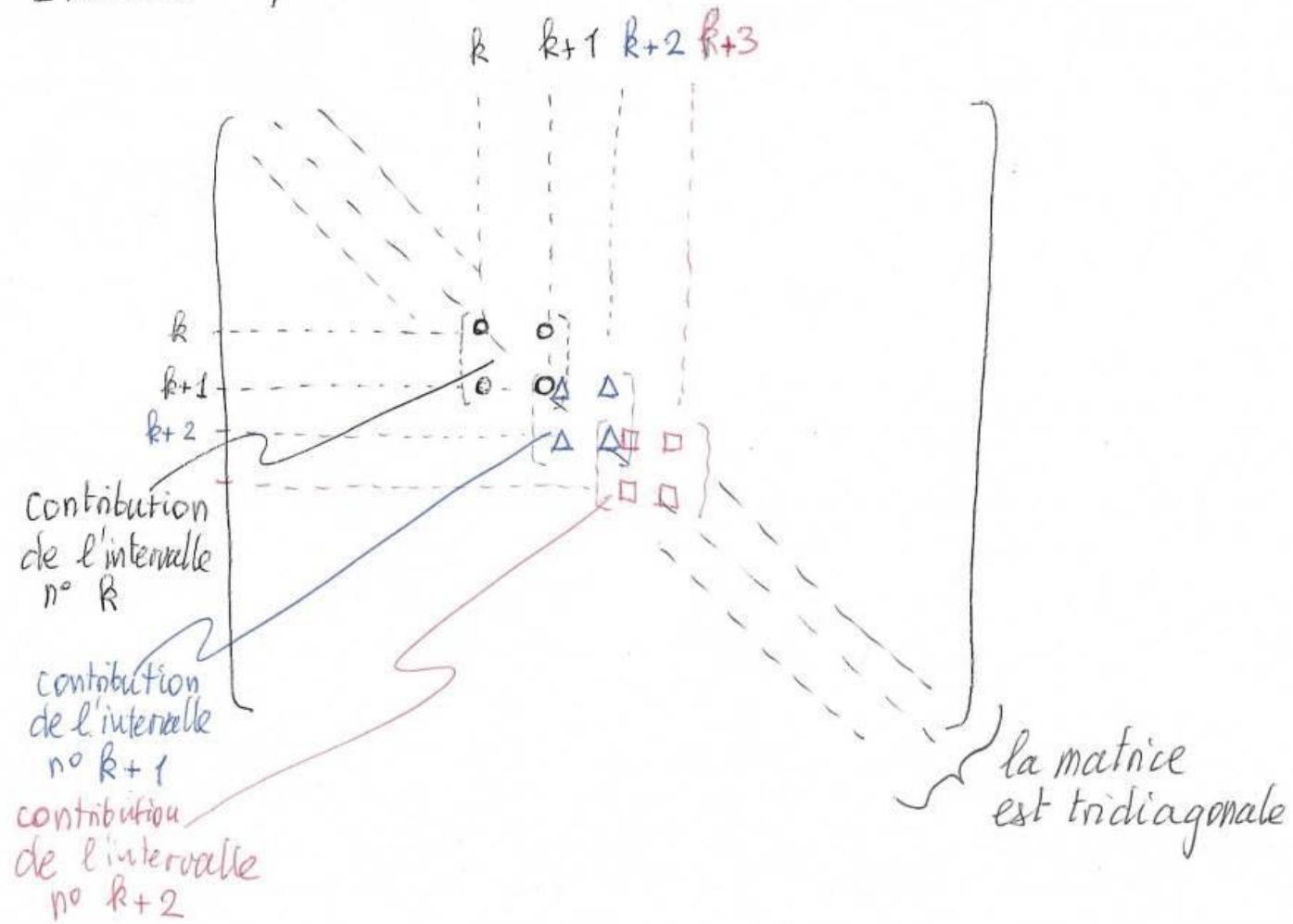
$$b_k = b_k + h_k \left(p \frac{\rho(x_k)}{2\varepsilon_0} + (1-p) \frac{\rho(x_{k+1/2})}{2\varepsilon_0} \right)$$

$$b_{k+1} = b_{k+1} + h_k \left(p \frac{\rho(x_{k+1})}{2\varepsilon_0} + (1-p) \frac{\rho(x_{k+1/2})}{2\varepsilon_0} \right) .$$

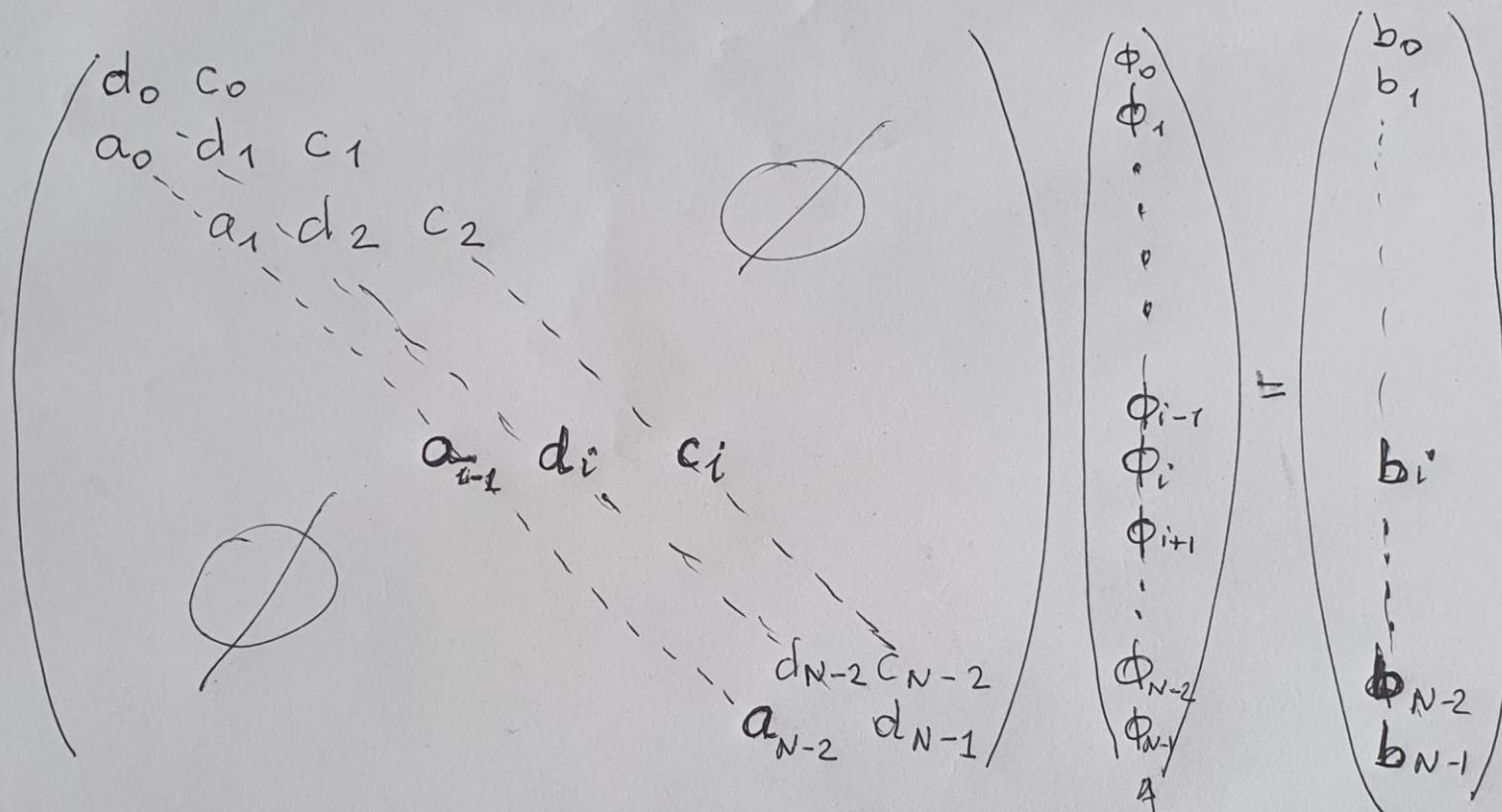
Eléments finis - Structure de la matrice



Eléments finis - Structure de la matrice



stockage de la matrice tridiagonale

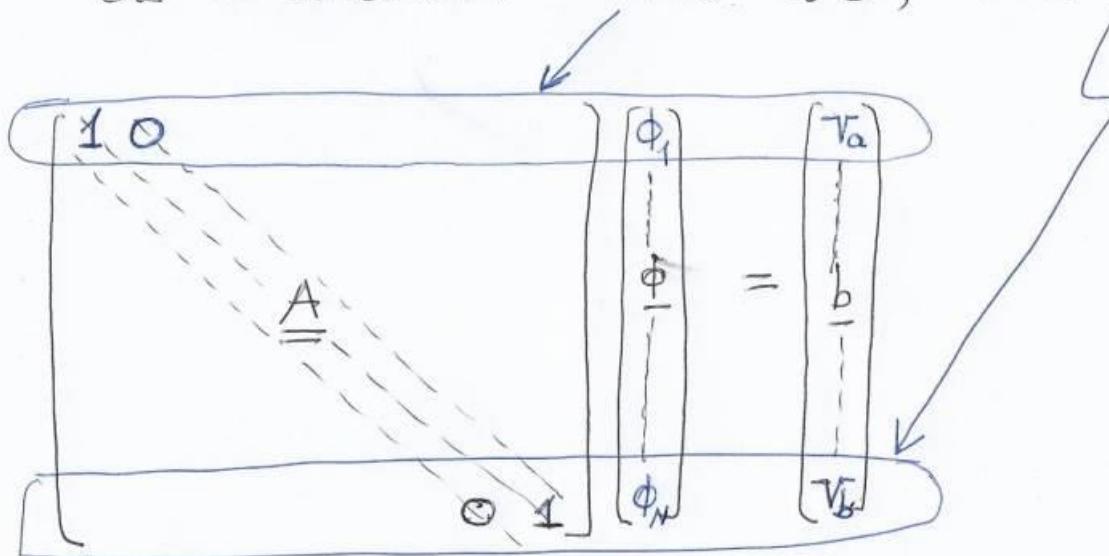


On stocke la diagonale dans un vecteur d
 " " " " " l'inférieure " \bar{a}
 " " " " " supérieure " \bar{c}
 " " " le meuble de droite " \bar{b}

\ selection: vector ϕ

Eléments finis - Conditions aux bords explicites

Cas 1D cartésien : $\nabla(x_a) = V_a \oplus; \nabla(x_b) = V_b$



$\oplus !$ Dans l'Ex. 6 (cylindre) il n'y a PAS de condition aux limites en $r=0$ (premier point de maillage) Analytiquement, c'est une condition de régularité (i.e. pas de ~~sing~~ solution singulière) Numériquement, c'est la formulation par la méthode Galerkin des éléments finis, basée sur le principe variationnel, qui assure la régularité "automatiquement".

FAQ – Elements finis - 1

- L'équation différentielle de Poisson est du 2^e ordre (elle fait intervenir $d^2\phi/dx^2$).
- Or, on a trouvé une solution numérique qui est une fonction linéaire par morceau, dont *la 1^e dérivée est discontinue aux points de maillage*, et donc *dont la 2^e dérivée est nulle presque partout, sauf aux points de maillage où elle est infinie !!!*
- Comment peut-on prétendre avoir résolu l'équation différentielle?
- Pourquoi prendre des fonctions de base linéaires par morceau?
- $\phi \approx \phi_h = \sum_j \phi_j \Lambda_{j(x)}$
- $d\phi_h/dx = \sum_j \phi_j d\Lambda_j/dx$
- $d^2\phi_h/dx^2 = \sum_j \phi_j d^2\Lambda_j/dx^2 \quad ????$

FAQ – Elements finis - 2

- En fait, on peut montrer que, malgré ce problème, la solution numérique tend vers la solution exacte dans le sens que la norme de la différence entre les deux tend vers zéro lorsque le maillage devient de plus en plus fin:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{xa}^{xb} (\phi_h(x) - \phi(x))^2 dx = 0$$

- Choisir des fonctions de bases autres que linéaires par morceau est possible. De façon générale, plus l'ordre du polynôme par morceau est élevé, plus l'ordre de convergence sera élevé.
- Dans l'exercice 6, vous vérifierez empiriquement l'ordre de convergence de la solution numérique.

FAQ-Elements finis #2

- Comment vérifier que l'équation différentielle est bien satisfaite?

- Attention lorsque $\varepsilon_r(r)$ a une discontinuité en $r=b$ pour l'évaluation des intégrales avec la règle des trapèzes

Indication pour l'Ex.6 (d) (ii)

Ex. 6 (d) (ii) vérifier $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = S_{\text{lib}}$

Avec $\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$, $\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi$: $-\vec{\nabla} \cdot (\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) = S_{\text{lib}}/\epsilon_0$

Coordonnées cylindriques :

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \epsilon_r(r) \frac{d\phi(r)}{dr} \right) = S_{\text{lib}}(r)/\epsilon_0$$

éléments finis : $\frac{d\phi}{dr} = \sum_j \Phi_j \frac{d\Lambda_j}{dr}$

Def $\alpha(r) = r \epsilon_r \frac{d\phi}{dr}$.

Evaluer α aux points milieux des intervalles

$$r_{\text{mid},k} = \frac{r_k + r_{k+1}}{2}$$

Pour évaluer $\frac{d\alpha}{dr}$, utiliser les différences finies centrées

aux milieux des points milieux, $r_{\text{midmid},\kappa} = \frac{r_{\text{mid},\kappa} + r_{\text{mid},\kappa+1}}{2}$

$$\frac{d\alpha}{dr}(r_{\text{midmid},\kappa}) \cong \frac{\alpha(r_{\text{mid},\kappa+1}) - \alpha(r_{\text{mid},\kappa})}{r_{\text{mid},\kappa+1} - r_{\text{mid},\kappa}}$$

Comparer ensuite : $\frac{1}{r_{\text{midmid},\kappa}} \frac{d\alpha}{dr}(r_{\text{midmid},\kappa}) \stackrel{?}{=} S_{\text{lib}}(r_{\text{midmid},\kappa})/\epsilon_0$