

Physique Numérique – Semaine 8

Rappel de la semaine 7

- ☐ **Section 3.3.** Forme variationnelle. Equation de Poisson. **Éléments finis.**
- ☐ Assemblage de la matrice et du membre de droite.

- ☐ **Section 3.2 Différences finies**
- ☐ Méthodes itératives: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, ...

Plan de la semaine 8

- ☐ **Section 3.2 Différences finies**
- ☐ Méthodes itératives: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR: coût de l'algorithme
- ☐ Electrostatique 2D

- ☐ **Chapitre 4 Intégration spatio-temporelle**
- ☐ **Section 4.1 Advection-Diffusion**
- ☐ Différences finies explicite à 2 niveaux
- ☐ Limite de stabilité: critère CFL

Documentation

- Lecture pour la Semaine #8: Notes de cours
 - **Section 3.2 Différences Finies**
 - **Section 4.1 Advection-Diffusion**

<http://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=8220>

3.2 Différences finies – Eq. De Poisson

- Cas du vide:
- Eq. de Laplace:

$$\nabla^2 \phi(\vec{x}) = 0, \forall \vec{x} \in \Omega \mid_{\partial\Omega}$$

- Conditions aux limites: $\phi(\vec{x}) = V(\vec{x}), \forall \vec{x} \in \partial\Omega$

- Différences finies, cf. Annexe (A.7)

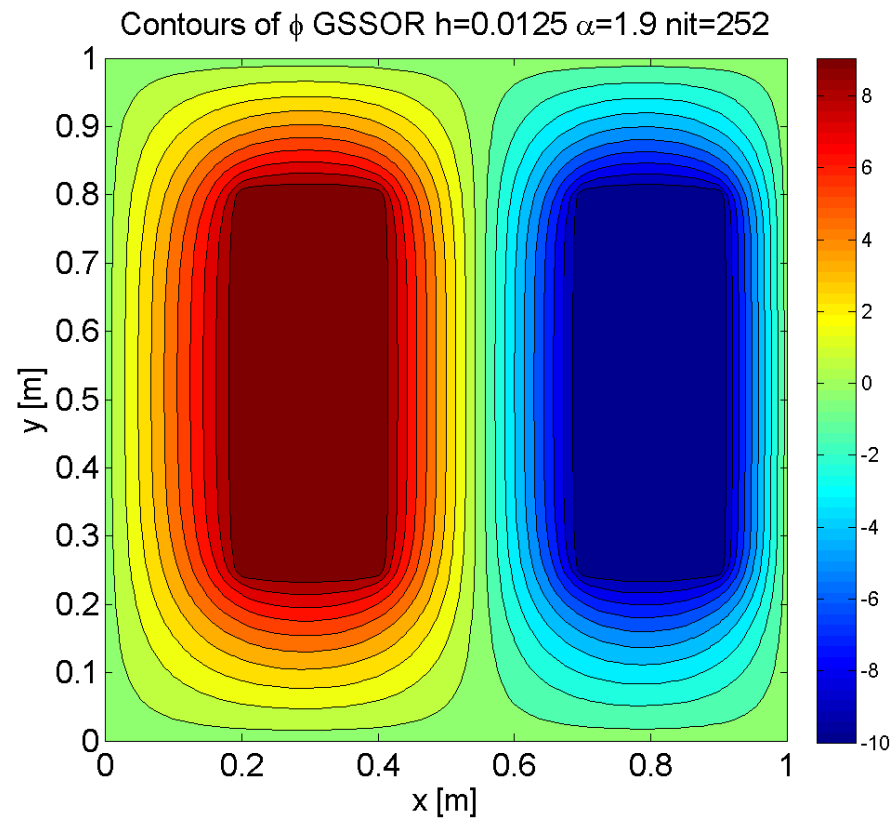
$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_{i,j,k} \approx \frac{1}{h_x^2} (\phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k})$$

- Cas 3D, cas $h_x=h_y=h_z$:

$$\phi_{i,j,k} = \frac{1}{6} (\phi_{i-1,j,k} + \phi_{i+1,j,k} + \phi_{i,j-1,k} + \phi_{i,j+1,k} + \phi_{i,j,k-1} + \phi_{i,j,k+1})$$

- Le potentiel en chaque point de maillage est la moyenne des valeurs du potentiel aux plus proches voisins

■ Exemple: 2D, électrodes rectangulaires



Méthodes itératives – 1: Jacobi

- Initialiser les valeurs aux points intérieurs de maillage ϕ_{ijk} à des valeurs arbitraires et les valeurs aux points sur les bords selon les conditions aux limites.
- Calculer le résidu r (*)
- Boucle itération numéro l , (while $r > p$)
 - Boucle sur les points de maillage intérieurs (i,j,k)

$$\phi_{i,j,k}^{(l+1)} = \frac{1}{6} \left(\phi_{i+1,j,k}^{(l)} + \phi_{i-1,j,k}^{(l)} + \phi_{i,j+1,k}^{(l)} + \phi_{i,j-1,k}^{(l)} + \phi_{i,j,k+1}^{(l)} + \phi_{i,j,k-1}^{(l)} \right)$$

- Boucle sur les points de maillage intérieurs (l,j,k)
 - Calculer le résidu r (*)

(*) Par exemple, $r = \max_{i,j,k} \left| \phi_{ijk} - \frac{1}{6} \left(\phi_{i\pm 1,j,k} + \phi_{i,j\pm 1,k} + \phi_{i,j,k\pm 1} \right) \right|$

Methodes itératives – 2: Gauss-Seidel

- Initialiser les valeurs aux points intérieurs de maillage ϕ_{ijk} à des valeurs arbitraires et les valeurs aux points sur les bords selon les conditions aux limites.
- Calculer le résidu r (*)
- Boucle itération numéro l , (while $r > p$)
 - Boucle sur les points de maillage intérieurs (i,j,k)

$$\phi_{i,j,k}^{(l+1)} = \frac{1}{6} \left(\phi_{i+1,j,k}^{(l)} + \phi_{i-1,j,k}^{(l+1)} + \phi_{i,j+1,k}^{(l)} + \phi_{i,j-1,k}^{(l+1)} + \phi_{i,j,k+1}^{(l)} + \phi_{i,j,k-1}^{(l+1)} \right)$$

- Boucle sur les points de maillage intérieurs (l,j,k)
 - Calculer le résidu r (*)

(*) Par exemple, $r = \max_{i,j,k} \left| \phi_{ijk} - \frac{1}{6} \left(\phi_{i\pm 1,j,k} + \phi_{i,j\pm 1,k} + \phi_{i,j,k\pm 1} \right) \right|$

Accélération des méthodes itératives - Gauss-Seidel avec Surrelaxation (SOR)

- Initialiser toutes les valeurs aux points de maillage, ϕ_{ijk}
- Calculer le résidu r
- Boucle while $r > p$
 - Boucle sur les points de maillage (i,j,k)

$$\phi_{i,j,k}^{(*)} = \frac{1}{6} \left(\phi_{i+1,j,k}^{(l)} + \phi_{i-1,j,k}^{(l+1)} + \phi_{i,j+1,k}^{(l)} + \phi_{i,j-1,k}^{(l+1)} + \phi_{i,j,k+1}^{(l)} + \phi_{i,j,k-1}^{(l+1)} \right)$$

$$\phi_{i,j,k}^{(l+1)} = \phi_{i,j,k}^{(l)} + \alpha \left(\phi_{i,j,k}^{(*)} - \phi_{i,j,k}^{(l)} \right)$$

- Boucle sur les points de maillage (l,j,k)
 - Calculer le résidu r
- $\alpha=1$: Gauss-Seidel; $1 < \alpha < 2$: surrelaxation
- Converge si $0 < \alpha < 2$ *testons!*

Accélération des méthodes itératives - Jacobi avec Surrelaxation (SOR)

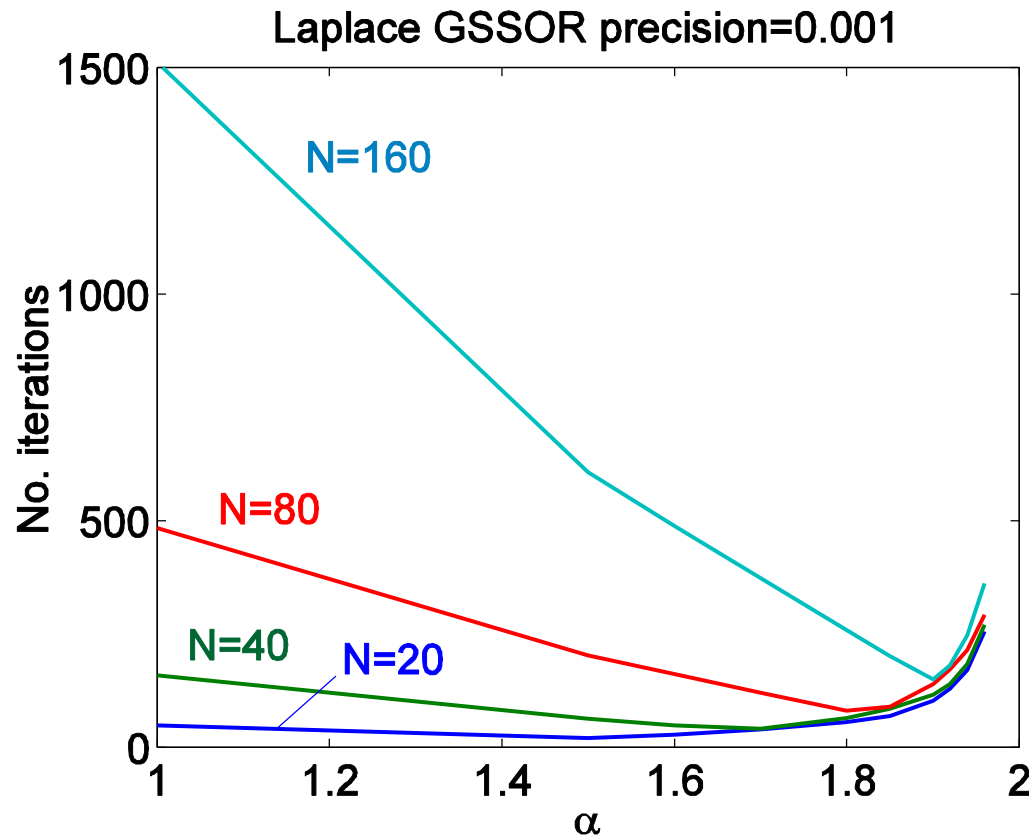
- Initialiser toutes les valeurs aux points de maillage, ϕ_{ijk}
- Calculer le résidu r
- Boucle while $r > p$
 - Boucle sur les points de maillage (i,j,k)

$$\phi_{i,j,k}^{(*)} = \frac{1}{6} \left(\phi_{i+1,j,k}^{(l)} + \phi_{i-1,j,k}^{(l)} + \phi_{i,j+1,k}^{(l)} + \phi_{i,j-1,k}^{(l)} + \phi_{i,j,k+1}^{(l)} + \phi_{i,j,k-1}^{(l)} \right)$$

$$\phi_{i,j,k}^{(l+1)} = \phi_{i,j,k}^{(l)} + \alpha \left(\phi_{i,j,k}^{(*)} - \phi_{i,j,k}^{(l)} \right)$$

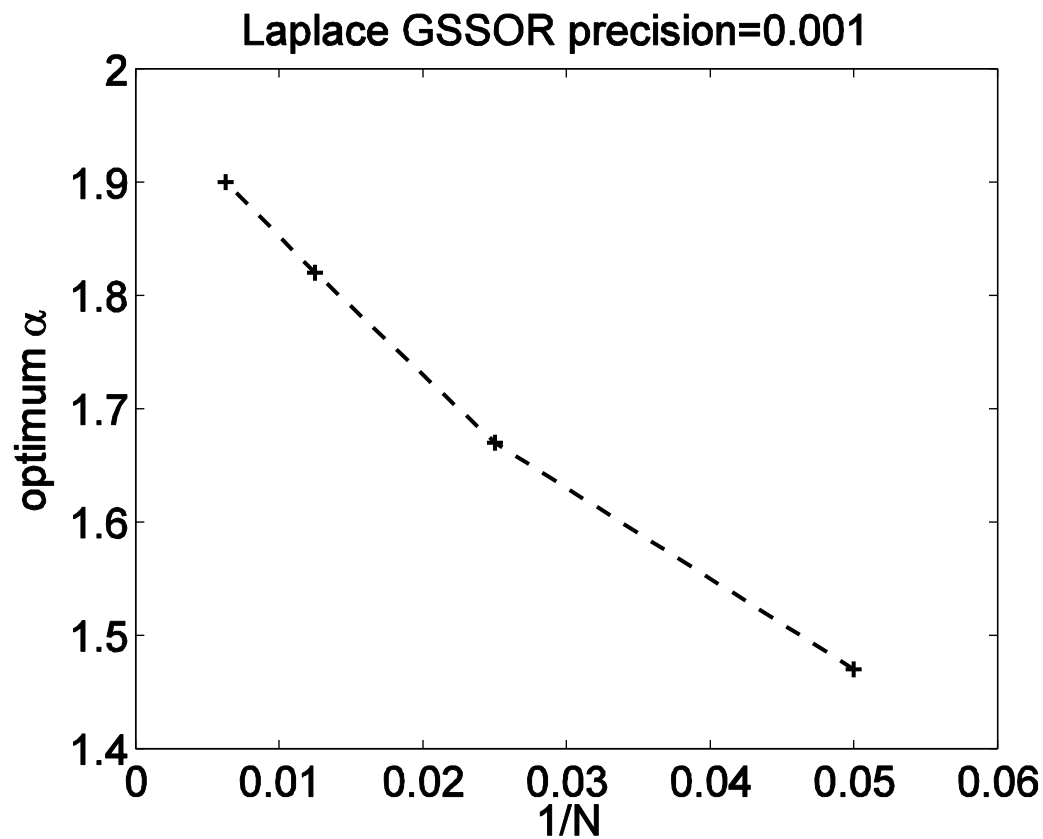
- Boucle sur les points de maillage (l,j,k)
 - Calculer le résidu r
- $\alpha=1$: Jacobi; **$1 < \alpha$: surrelaxation: DIVERGE!!!!**
- ***testons! La preuve formelle cf. 4.1.3 pour le cas 1D spatial.***

Optimisation de SOR - 1

2D

- Niter dépend de la taille du maillage N et de α

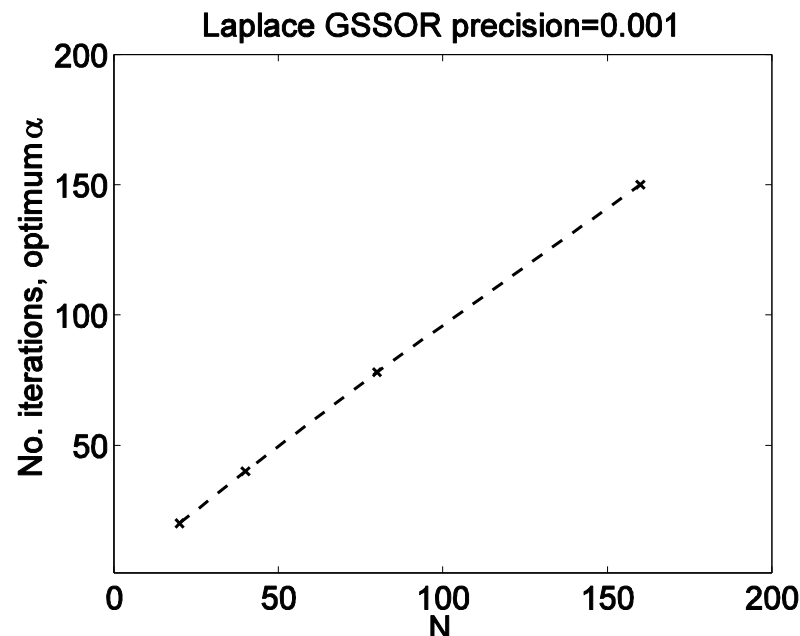
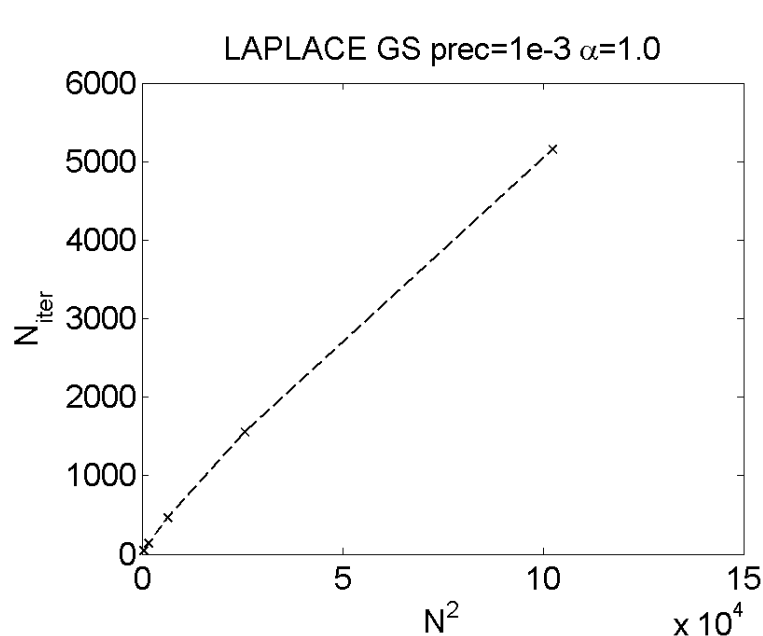
Optimisation de SOR - 2

2D

- La valeur optimale de α dépend de N

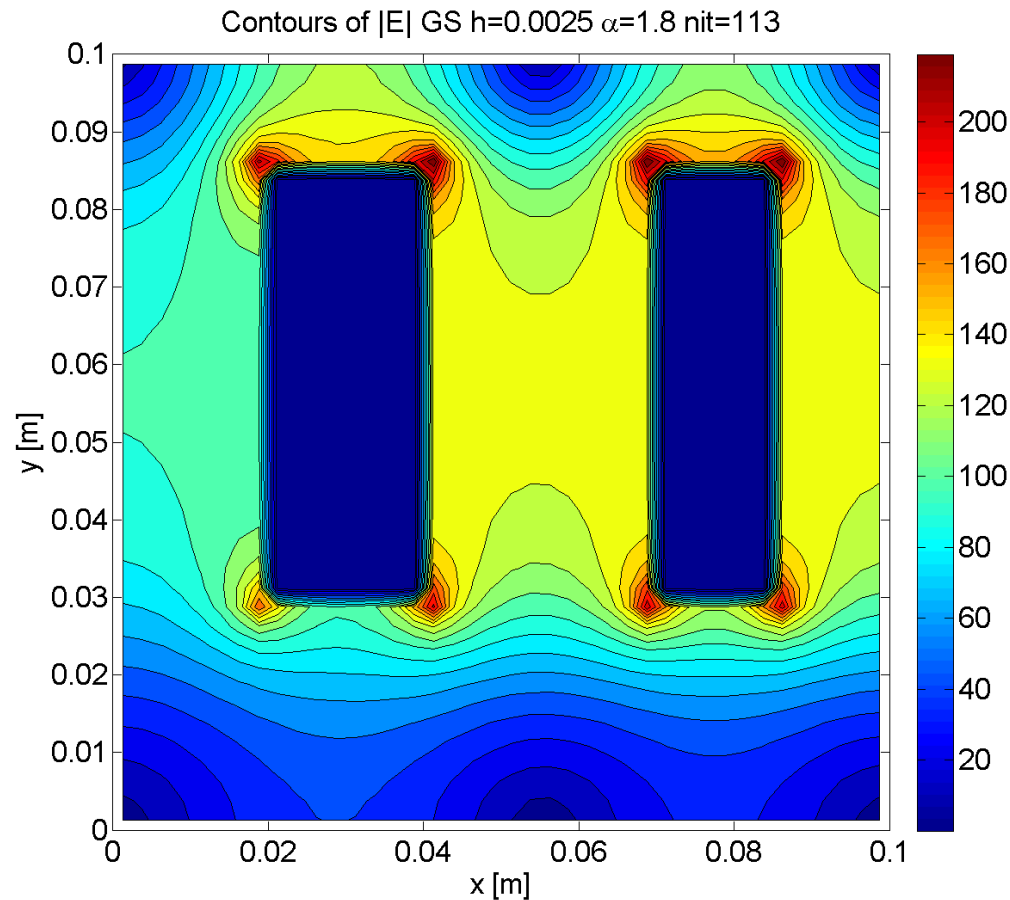
Optimisation de SOR - 3

2D $N \times N$



- Le nombre d'itérations requises pour une précision donnée augmente **linéairement** avec la taille du maillage (N) *lorsqu'on choisit chaque fois le paramètre α à l'optimum*
- Alors que sans SOR, Niterations augmente **quadratiquement** (N^2)
- SOR diminue le « coût » de l'algorithme d'un ordre de grandeur! Chaque itération coûte $\sim N^2$ opérations, donc le coût total N^4 (sans SOR) $\rightarrow N^3$ (avec SOR α optimal)

Champ électrique – Effet de pointe



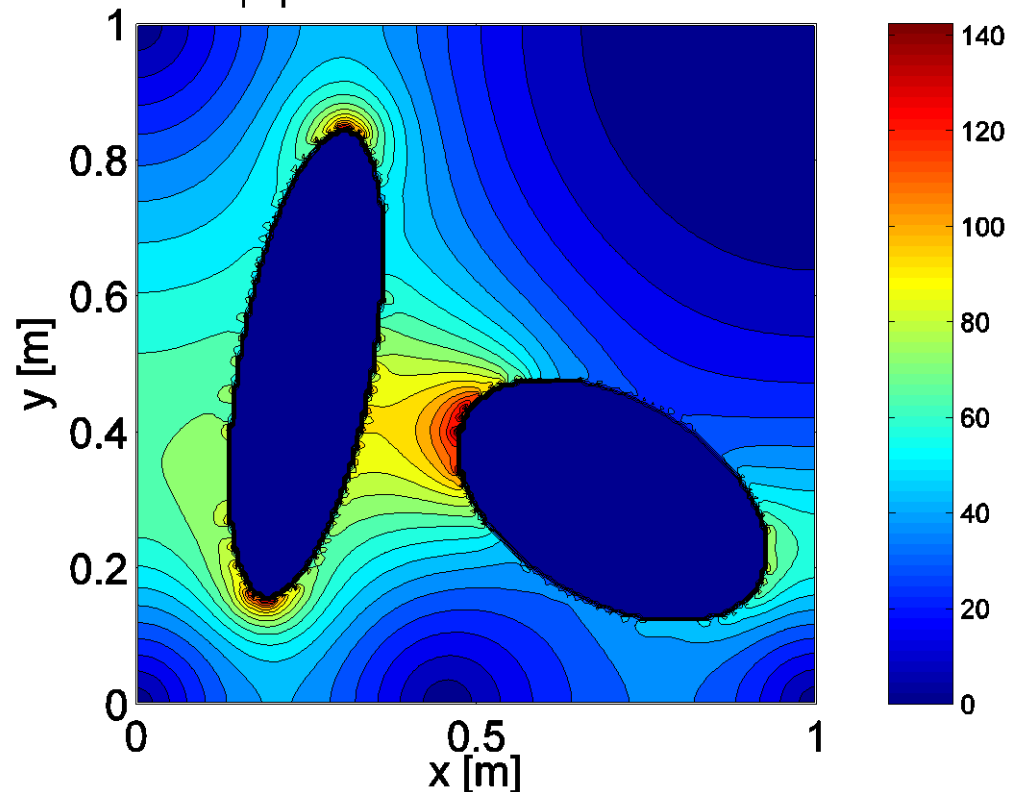
L'intensité du champ E est très grande aux angles de la surface...
... en fait, le champ E est **singulier** aux angles de la surface

Champ E – effet de pointe numérique

Laplacien 2-D

Problème des différences finies sur un maillage cartésien pour des surfaces non alignées avec les lignes de coordonnées

Contours of $|E|$ GSSOR $h=0.00625$ $\alpha=1.9$ nit=147



Champ électrique – Loi de Gauss

Champ électrique – Loi de Faraday

- Simulations faites en cours et démos au tableau
- Quizz
 - Que vaut $\nabla^2 \phi$ sur $\partial\Omega$?
 - Que vaut $\vec{E}$ sur $\partial\Omega$?
 - Où sont les charges $\rho(\vec{x})$?
 - Le champ $\vec{E}$ est nul en dehors de la boîte. Donc la somme des charges à l'intérieur est nulle. Vrai ou faux?
 - Si $V_a = -V_b$, alors $Q_a = -Q_b$. Vrai ou faux?
 - Si on déplace une électrode, par exemple (a), en gardant V_a et V_b constants, les charges sur les électrodes changent-elles? Et comment? (1): Seulement Q_a ? (2) Q_a et Q_b avec $Q_a + Q_b = \text{const}$
 - ...

4.1 Advection - Diffusion

Advection:

- Transport (de matière, ou de chaleur, ou...)
- Illustration: particules de fumée emportées par le vent
- Décrite par un champ de vitesse v (vitesse d'advection)
- Flux (#particules par unité de surface et par unité de temps)

$$\vec{j} = n \vec{v}$$

Diffusion:

- Transport (de matière, ou de chaleur, ou...)
- Illustration: particules de fumée emportées même en l'absence de vent
- Description microscopique: mouvement Brownien
- Description macroscopique: coefficient de diffusion D

- Flux
$$\vec{j} = -D \nabla n$$

Equation d'advection-diffusion

Conservation de la quantité transportée:

- Décrite par une équation de continuité

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

Equation d'Advection-Diffusion:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{v} - D\nabla n)$$

Advection

- Transport d'une quantité scalaire $f(\vec{x}, t)$, p.ex. la densité
- Quantité conservée au cours du mouvement $\rightarrow$ éq. de continuité

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

- Avec le flux $\vec{j} = f \vec{v}$, dans un écoulement. (p.ex. $\vec{v}$ vitesse du vent)
- Dans le cas incompressible, cela donne:
- Dans le cas incompressible 1D, $v = \text{const}$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) f = 0$$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0}$$

- Avec la condition initiale $f(x, 0) = f_0(x)$ donné
- La solution exacte est $f(x, t) = f_0(x - vt)$
- ... une simple translation de la condition initiale, à la vitesse v

Advection - Schéma explicite à 2 niveaux

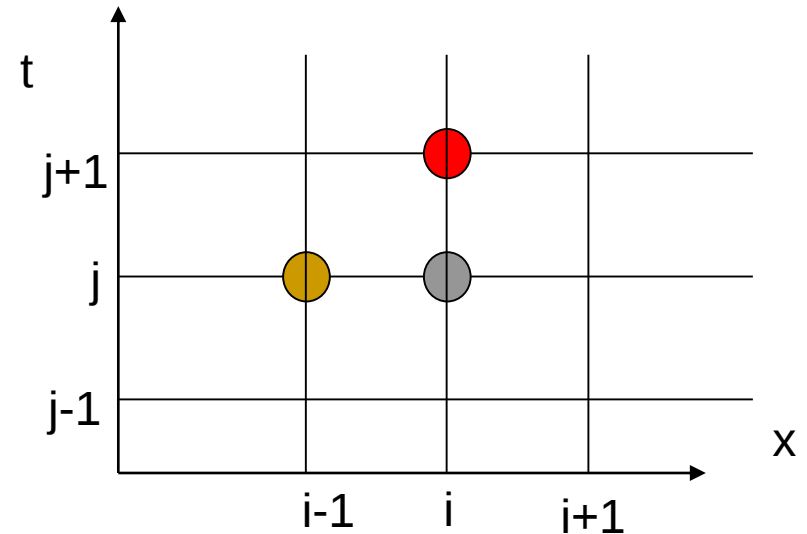
- Discrétisation $\{x_i, t_j\}$
- Différences finies

$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta t} \quad \text{"forward"}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} \quad \text{"backward"}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \frac{v\Delta t}{\Delta x} (f_{i,j} - f_{i-1,j})$$



- Paramètre CFL (Courant, Friedrichs, Lewy)

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

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)

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

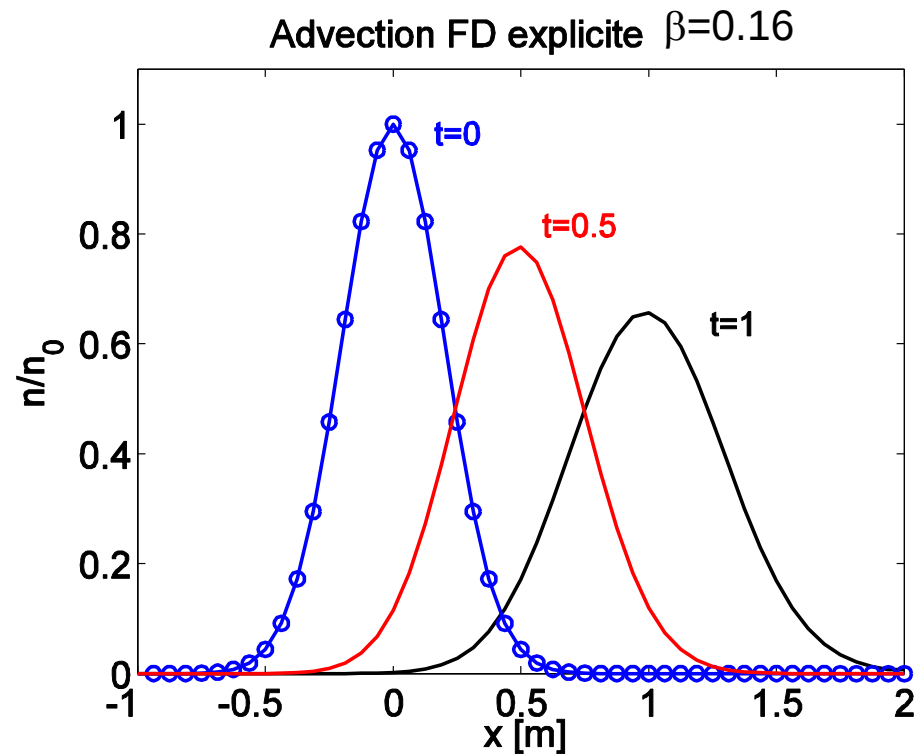
- On verra que ce schéma est instable si $\beta > 1$ ou si $\beta < 0$
- On verra aussi que ce schéma, lorsqu'il est stable, introduit de la diffusion non-physique («diffusion numérique»)

Testons le schéma explicite 2 niveaux pour l'advection!

- (Demos)
- (Testons empiriquement la limite de stabilité)

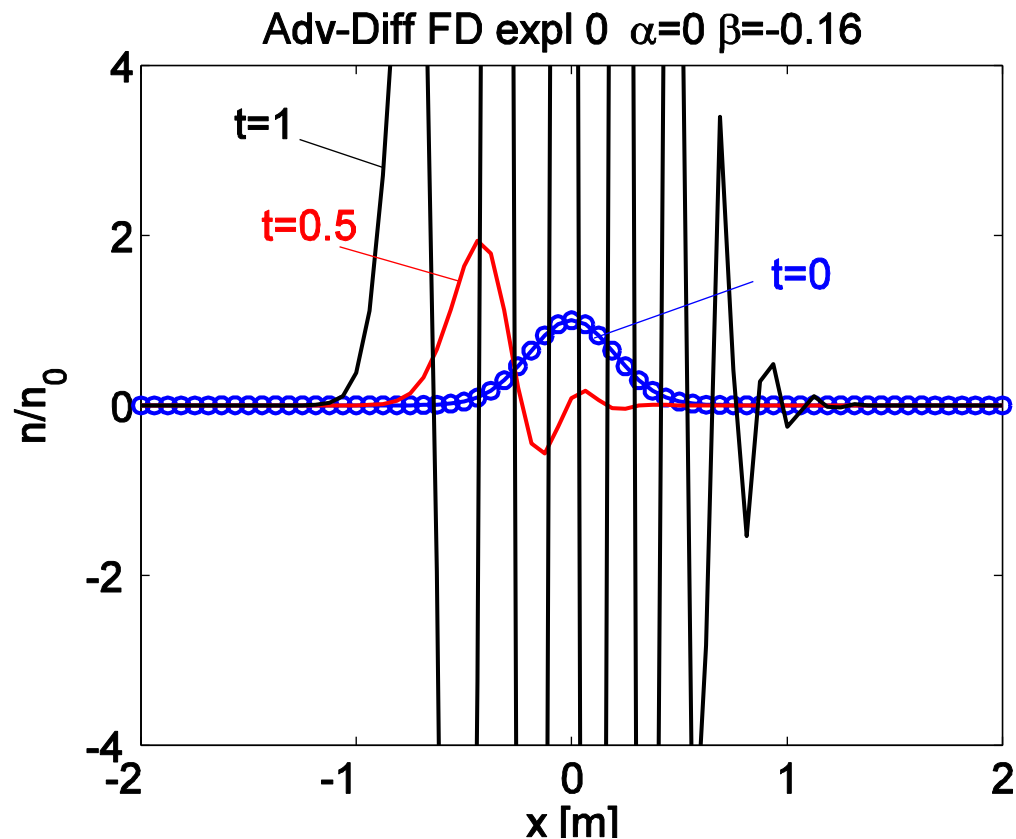
4.1.1 Advection

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



Advection

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



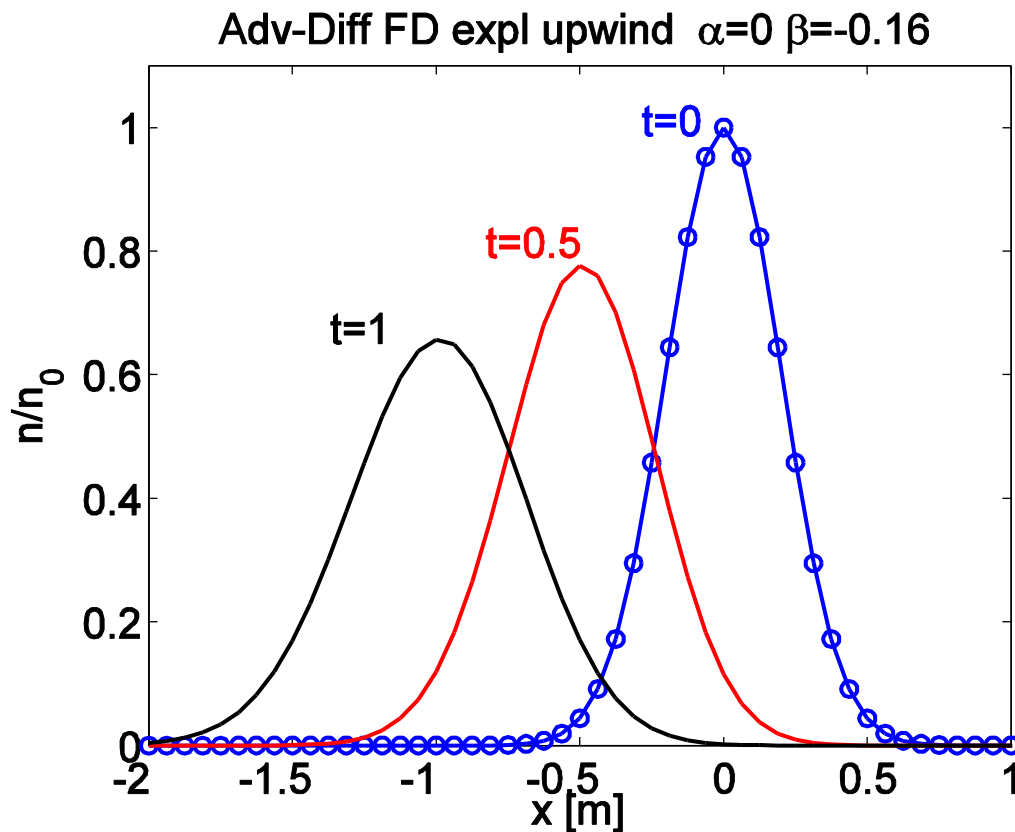
Advection

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

□ Forward (t)

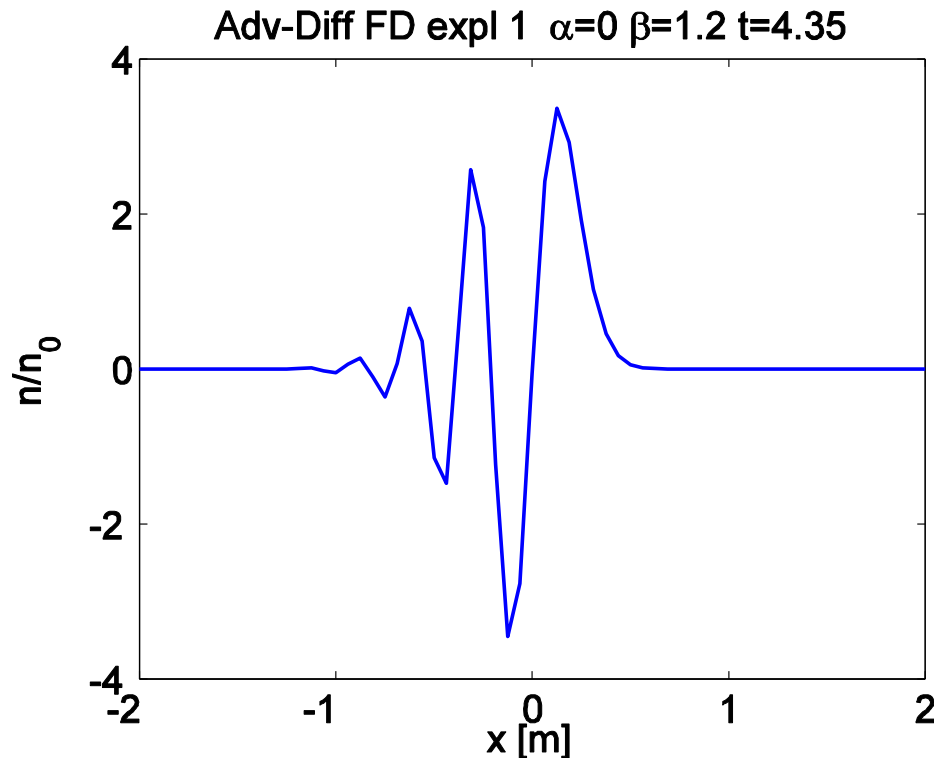
□ Forward (x) (UPWIND) $f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta (f_{i,j} - f_{i-1,j})$ si $\beta \geq 0$

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



Advection

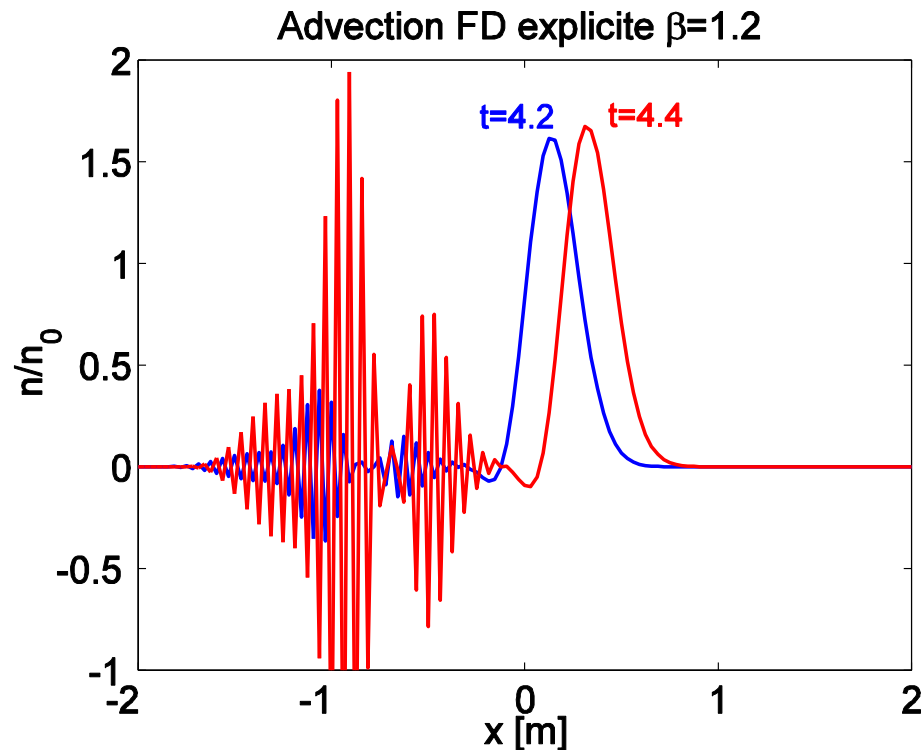
- Différences finies, explicite 2 niveaux, $u=1$
 - Forward (t)
 - Forward (x) (UPWIND) $\text{CFL}=1.2$ $n_x=64$



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

Advection

- Différences finies, explicite 2 niveaux, $u=1$
 - Forward (t)
 - Forward (x) (UPWIND) $CFL=1.2$ $n_x=128$



- Le schéma est instable pour $|CFL|>1.0$

Advection et Diffusion

4.1.1- 4.1.2

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

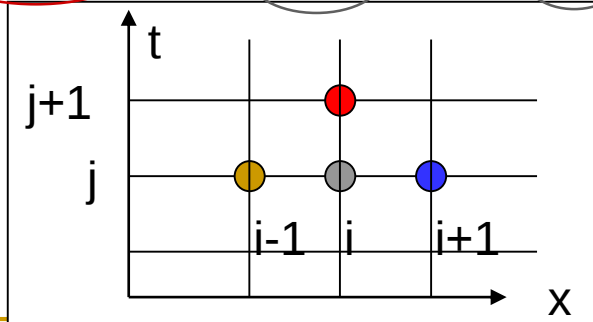
Conservation de la masse (Eq. Continuité): $\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$

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

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

Différences finies Schéma explicite 2 niveaux

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

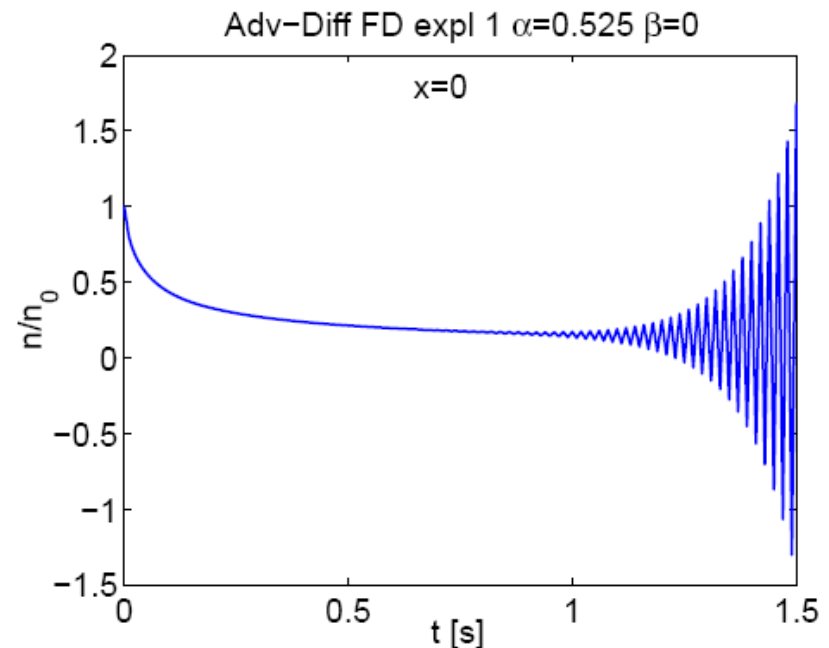
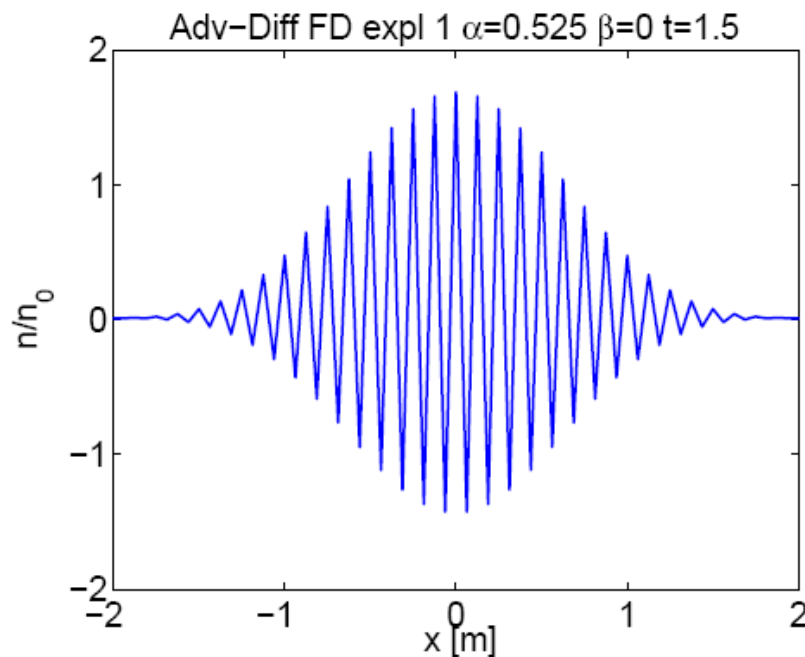


$$\boxed{\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x} \text{ (CFL)}}$$

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

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.

$$\boxed{0 \leq \beta \leq 1} \quad \beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \text{CFL}$$

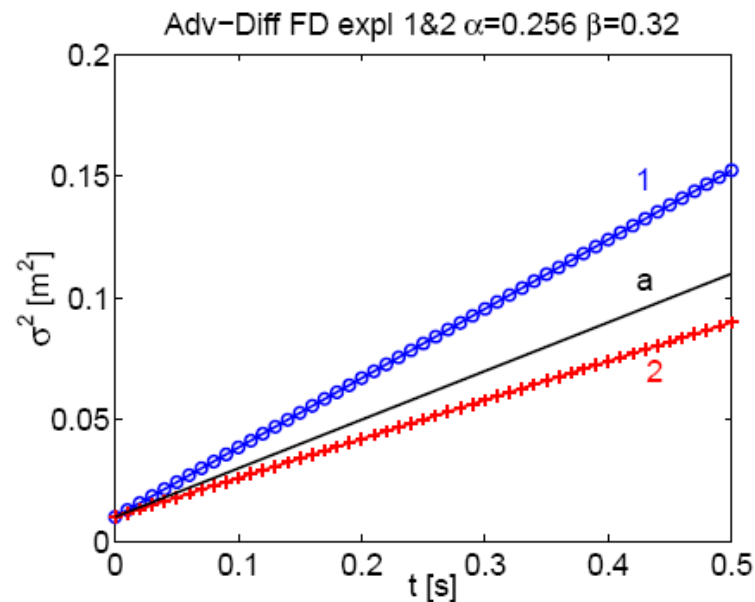
Courant-Friedrichs-Lewy

$$\boxed{0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}} \quad \alpha = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$$

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

Schéma différences finies explicite 2 niveaux

4.1.2 Advection et Diffusion - résumé

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

Paramètre CFL : $\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta x}$ $\alpha = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$
 Courant-Friedrichs-Lewy

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

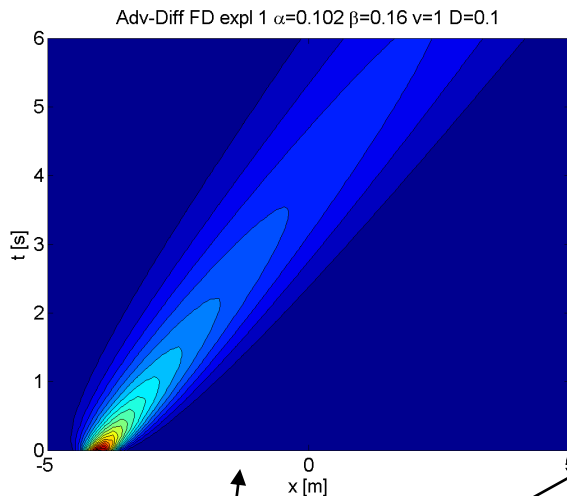
- Il peut y avoir instabilité numérique!
- Le schéma explicite upwind pour l'advection stabilise, mais introduit de la diffusion numérique
- Conditions de stabilité

$$\boxed{0 \leq \beta \leq 1}$$

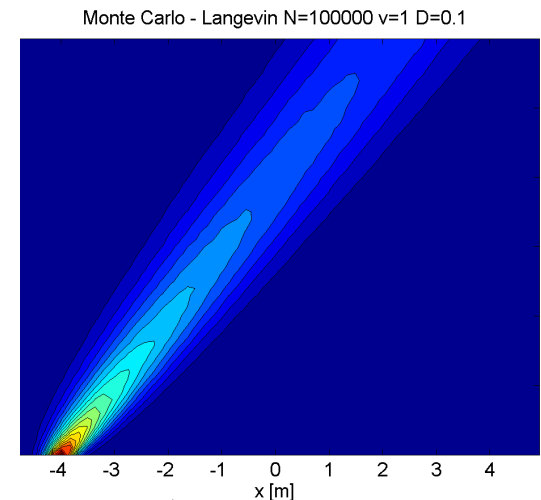
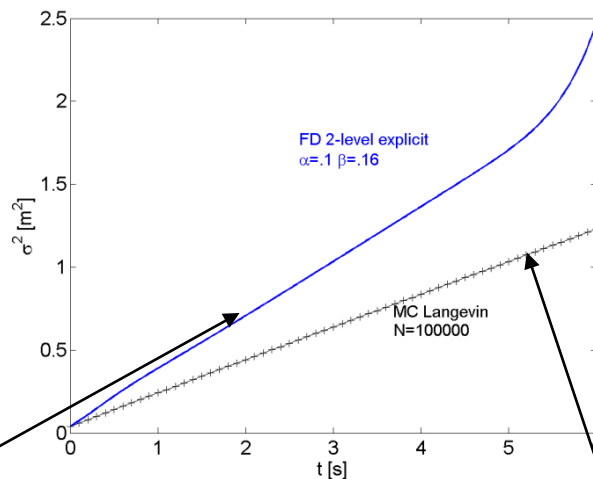
$$\boxed{0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}}$$

Euler ou Lagrange? Radar ou mouchard?

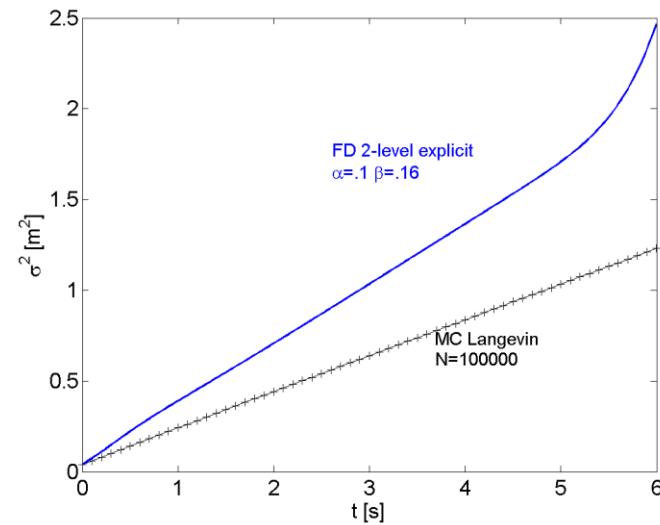
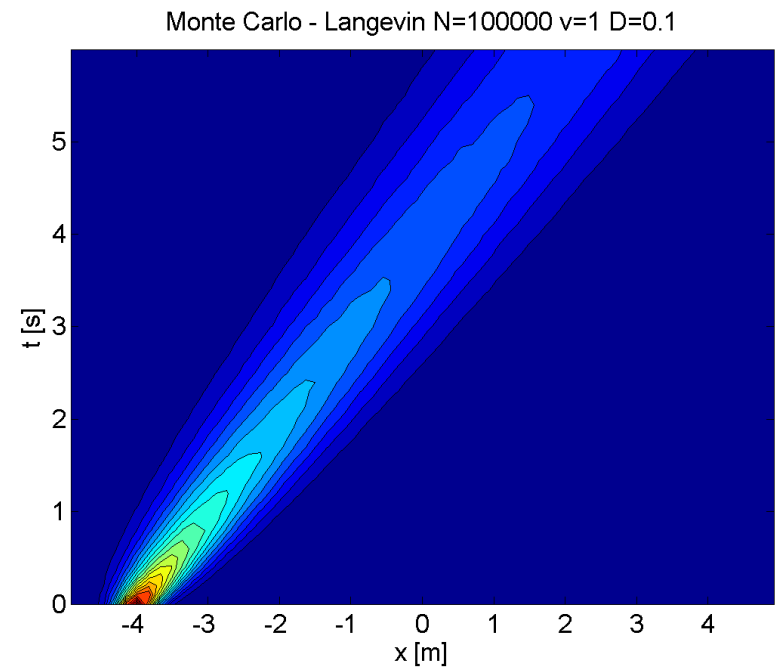
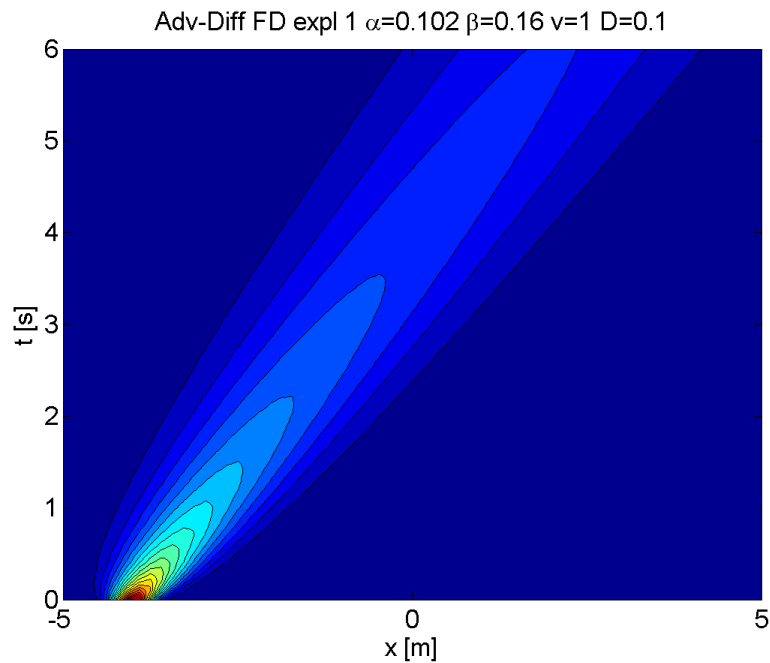
Comparaison entre schéma numérique «Eulérien»
et schéma numérique «Lagrangien» ou «particle»



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



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



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