

Physique Numérique – Semaine 7

Rappel de la semaine 6

- Schéma adaptatif. Gravitation. Ex.3. Lagrange.

Plan de la semaine 7

- **Chapitre 3. Problème à valeurs aux bords.**
- **Section 3.3.** Forme variationnelle. Equation de Poisson. **Éléments finis.**
- Assemblage de la matrice et du membre de droite.
- Exercice 4. Electrostatique dans la matière. Géométrie cylindrique.

- **Section 3.2 Différences finies**
- Méthodes itératives: Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, ...
- Exemples en 2D

Documentation

- Lecture pour la Semaine **#7** (8): Notes de cours
 - **Section 3.3 Elements Finis**
 - (Section 3.2 Différences Finies)

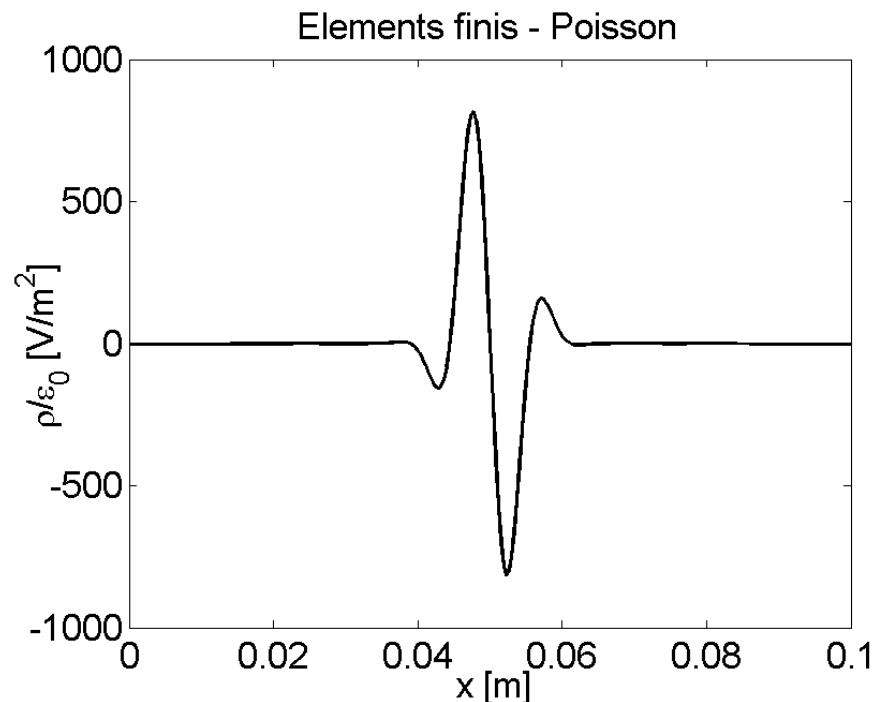
<http://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=8220>

Ch. 3 Problèmes à valeurs aux bords

3.3 Eléments finis

- Illustration sur un problème électrostatique, 1D, géométrie cartésienne
- Exercice 4: électrostatique avec diélectrique, 1D, géométrie cylindrique

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



Forme variationnelle

Éléments finis. Equation de Poisson

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

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

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

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

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

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

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

On prend $\eta(\vec{x}) = 0$ 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.

Elements finis – intégration par parties

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

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

Et le théorème de la divergence, ou théorème de Gauss :

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

On obtient

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

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 4, 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 4, 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 linéaires 1D

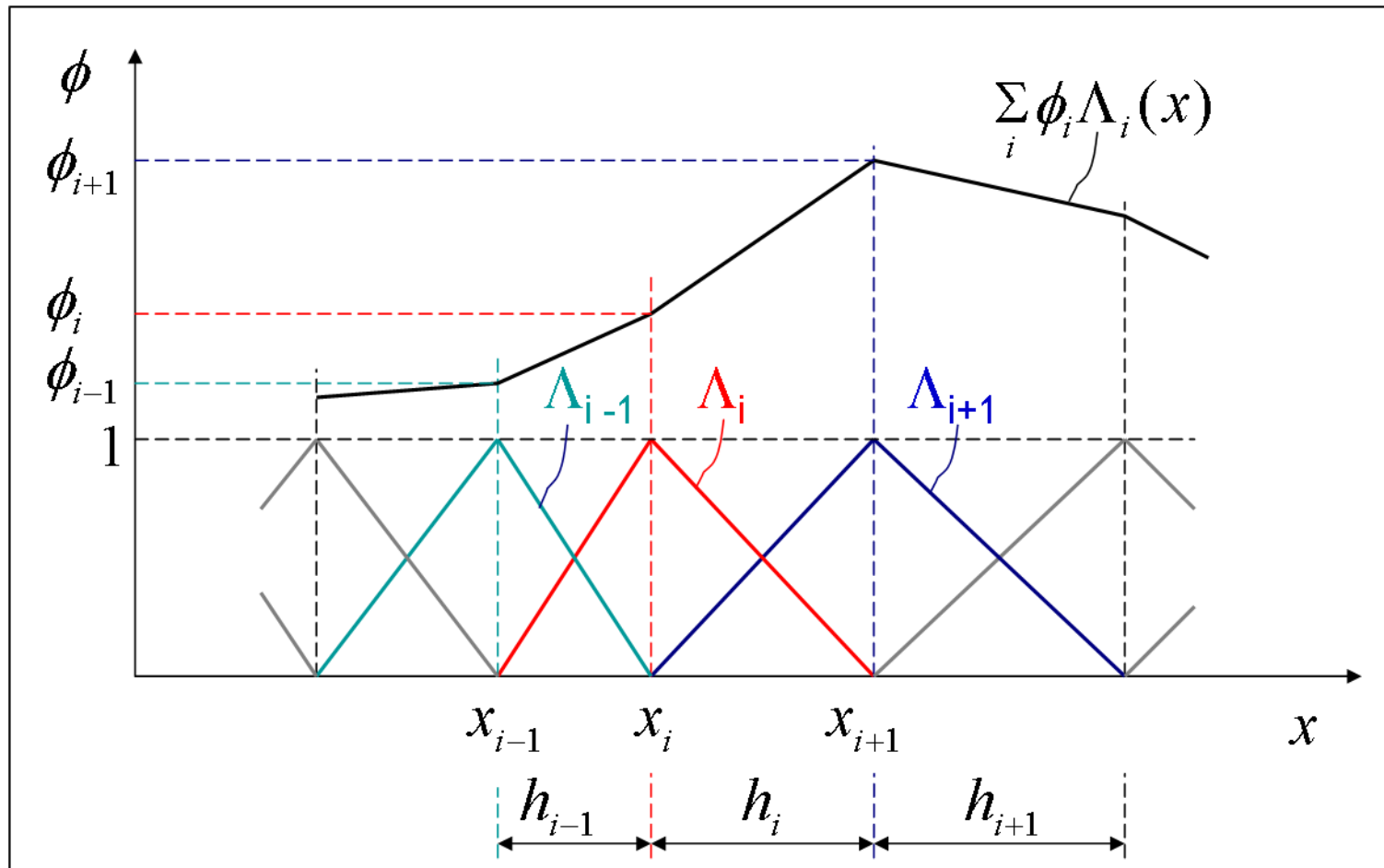


Figure 3.4 – Fonctions de base $\Lambda_i(x)$ et représentation (approximation) d'une fonction $\phi(x)$ par ces éléments finis.

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.

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

$$\eta(x) \approx \sum_{i=1}^N \eta_i \Lambda_i(x)$$

$$\eta_1=0, \eta_N=0$$

Insérant dans la forme variationnelle,

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \eta_i \int_{x_a}^{x_b} \frac{d\Lambda_i}{dx} \frac{d\Lambda_j}{dx} dx \phi_j = \sum_i \eta_i \int_{x_a}^{x_b} \Lambda_i S/\epsilon_0 dx, \quad \forall \eta_i$$

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

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

Ou, en notation matricielle, $\underline{A} \underline{\Phi} = \underline{b}$, avec :

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

$$b_i = \int_{x_a}^{x_b} \Lambda_i S/\epsilon_0 dx$$

Conditions aux limites

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

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

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

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

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

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

(*) Ex.4: cylindre, $r=0$ n'est pas un bord du domaine physique
On n'impose pas de condition explicite en $r=0$.
D'ailleurs, on ne connaît pas la valeur du potentiel en $r=0$.

Questions algorithmiques

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

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

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

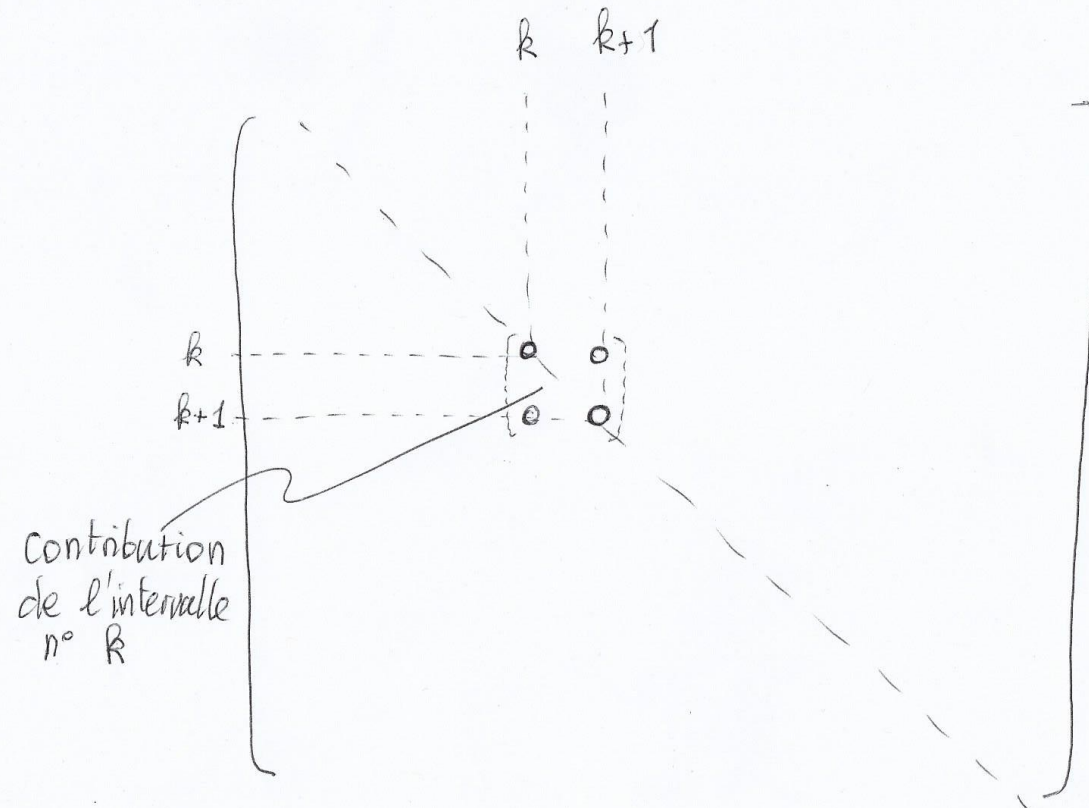
- Boucle sur les intervalles k**

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

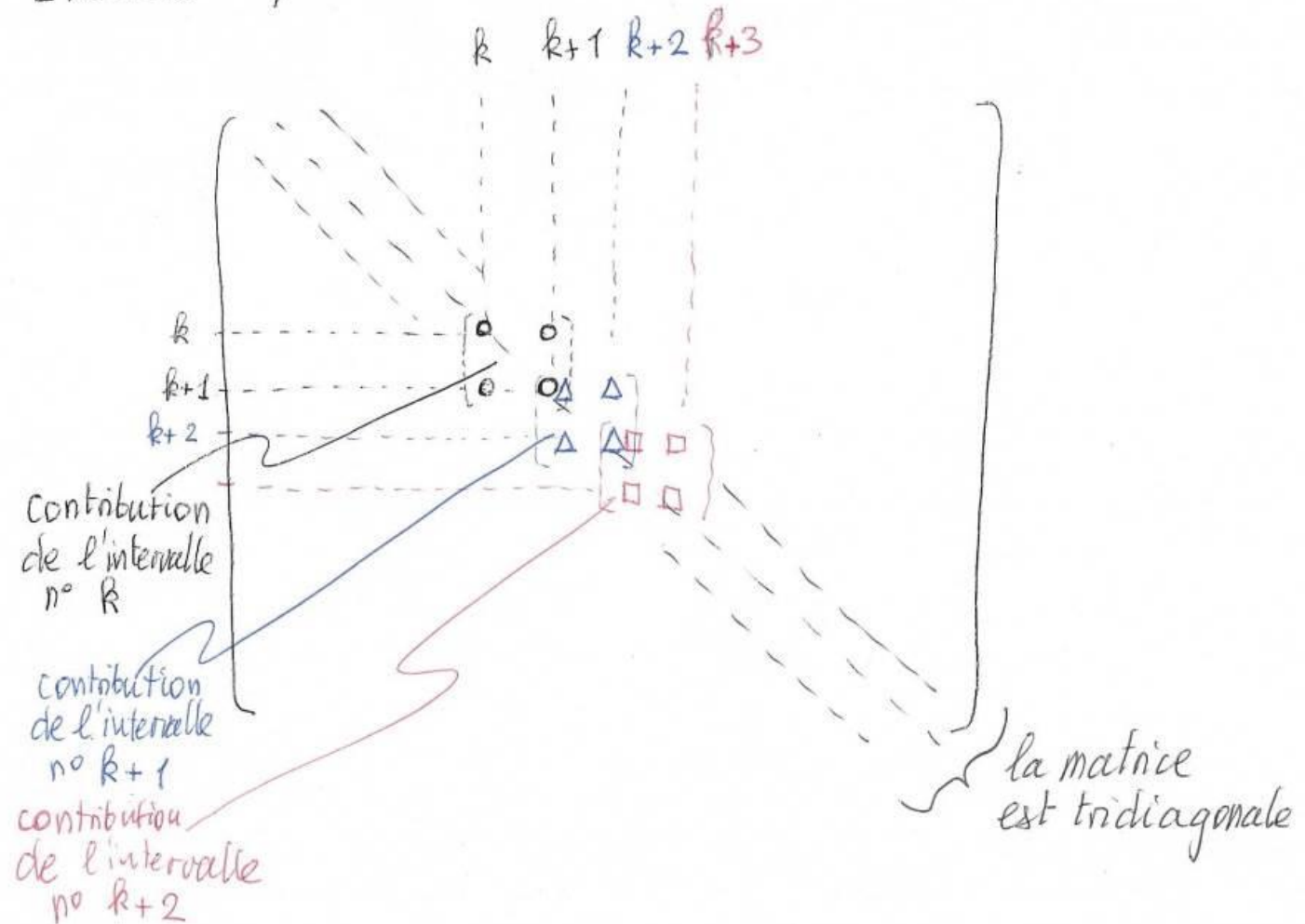
$$b_k = b_k + h_k \left(p \frac{\rho(x_k)}{2\varepsilon_0} + (1-p) \frac{\rho(x_{k+1/2})}{2\varepsilon_0} \right)$$

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

Eléments finis - Structure de la matrice



Eléments finis - Structure de la matrice




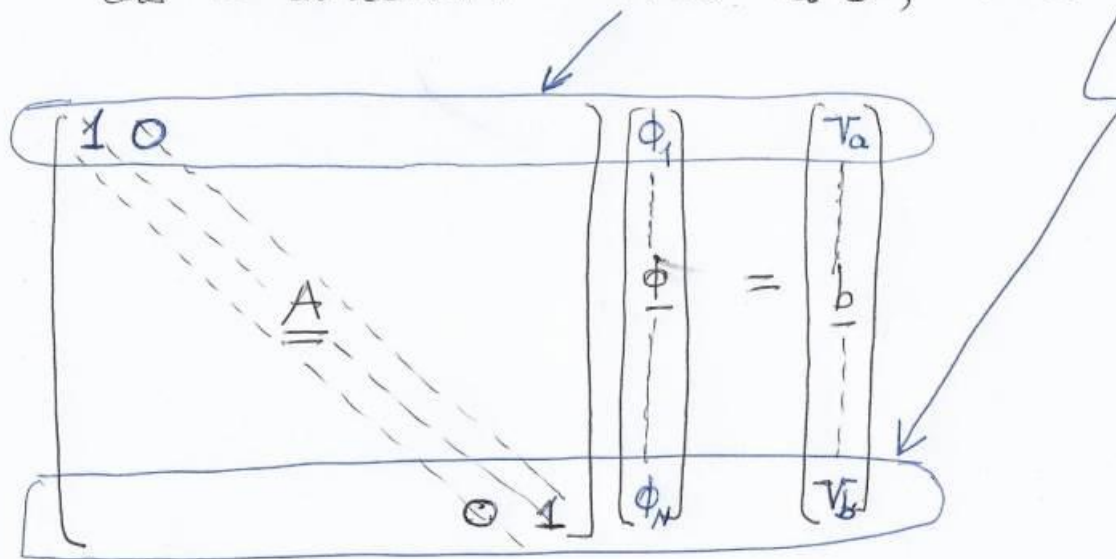
stockage de la matrice tridiagonale



$$\begin{pmatrix}
 d_0 & c_0 & & & \\
 a_0 & d_1 & c_1 & & \\
 & a_1 & d_2 & c_2 & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & a_{N-2} & d_{N-1} & c_{N-1}
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 \phi_0 \\
 \phi_1 \\
 \vdots \\
 \phi_{i-1} \\
 \phi_i \\
 \phi_{i+1} \\
 \vdots \\
 \phi_{N-2} \\
 \phi_{N-1}
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 b_0 \\
 b_1 \\
 \vdots \\
 b_i \\
 \vdots \\
 b_{N-2} \\
 b_{N-1}
 \end{pmatrix}$$

On stocke la diagonale dans un vecteur d
 " " " " inférieure " a
 " " " " supérieure " c
 " " le membre de droite " b

solution: vecteur ϕ

Eléments finis - Conditions aux bords explicites
 Cas 1D cartésien : $V(x_a) = V_a$  ; $V(x_b) = V_b$

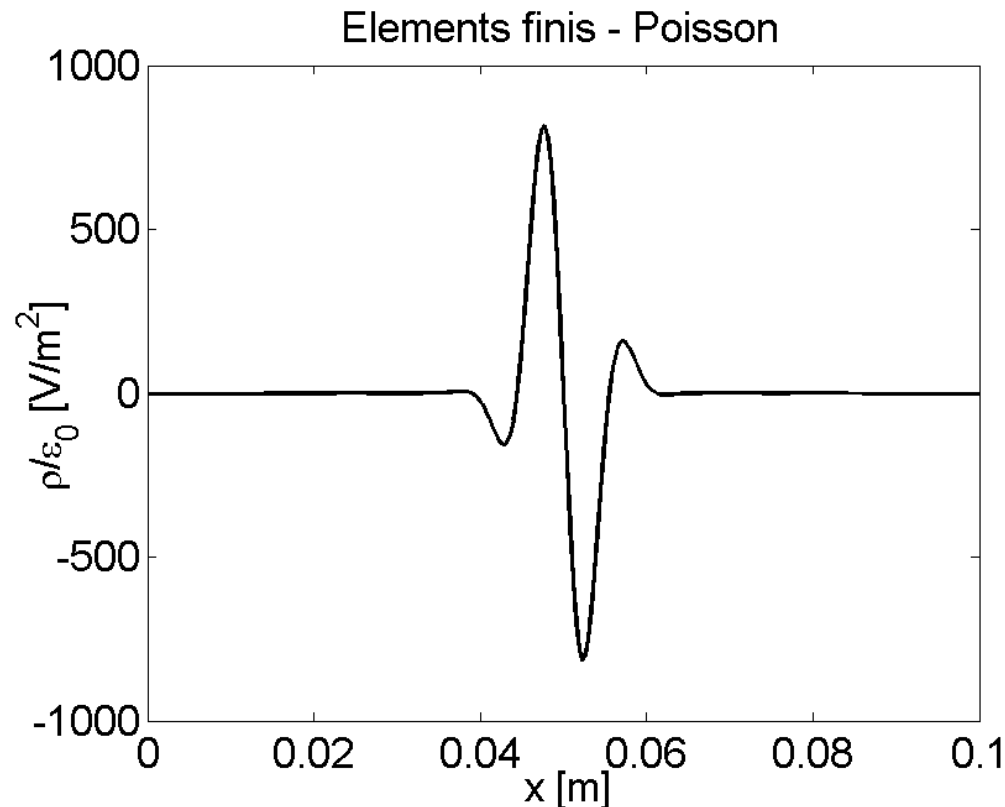


  Dans l'Ex. 6 (cylindre) il n'y a PAS de condition aux limites en $r=0$ (premier point de maillage)
 Analytiquement, c'est une condition de régularité
 (i.e. pas de ~~sing~~ solution singulière)
 Numériquement, c'est la formulation par la méthode Galerkin des éléments finis, basée sur le principe variationnel,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

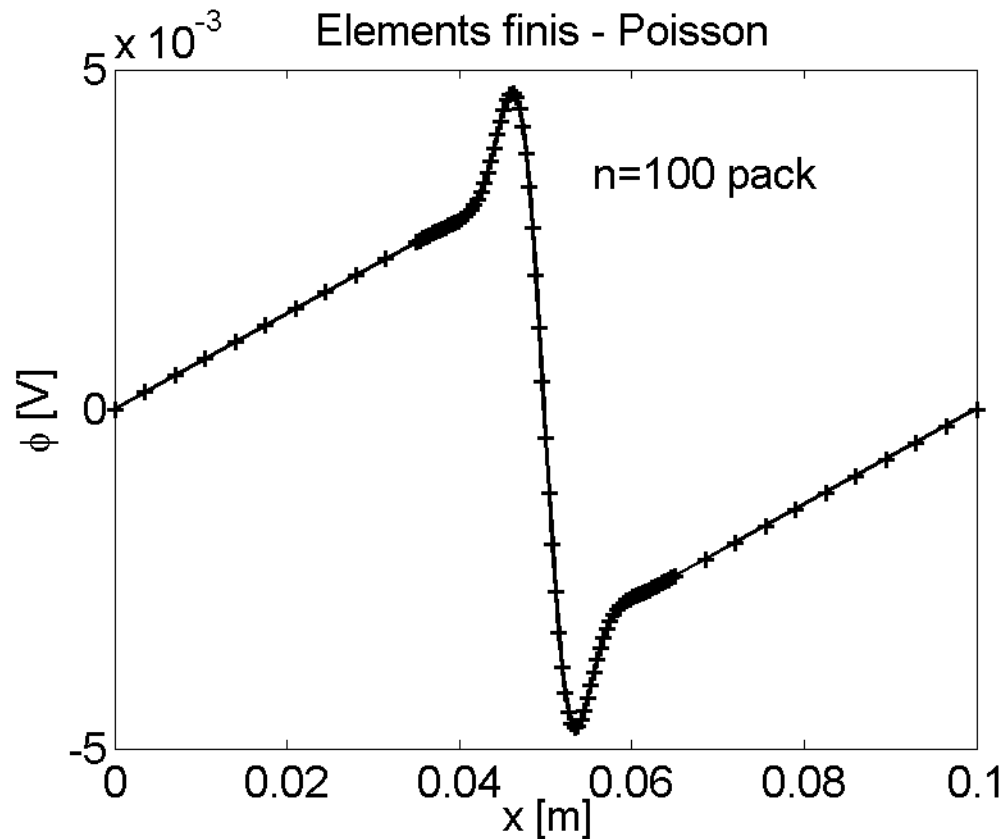
Elements finis 1D

■ Cas de l'équation de Poisson 1-D

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

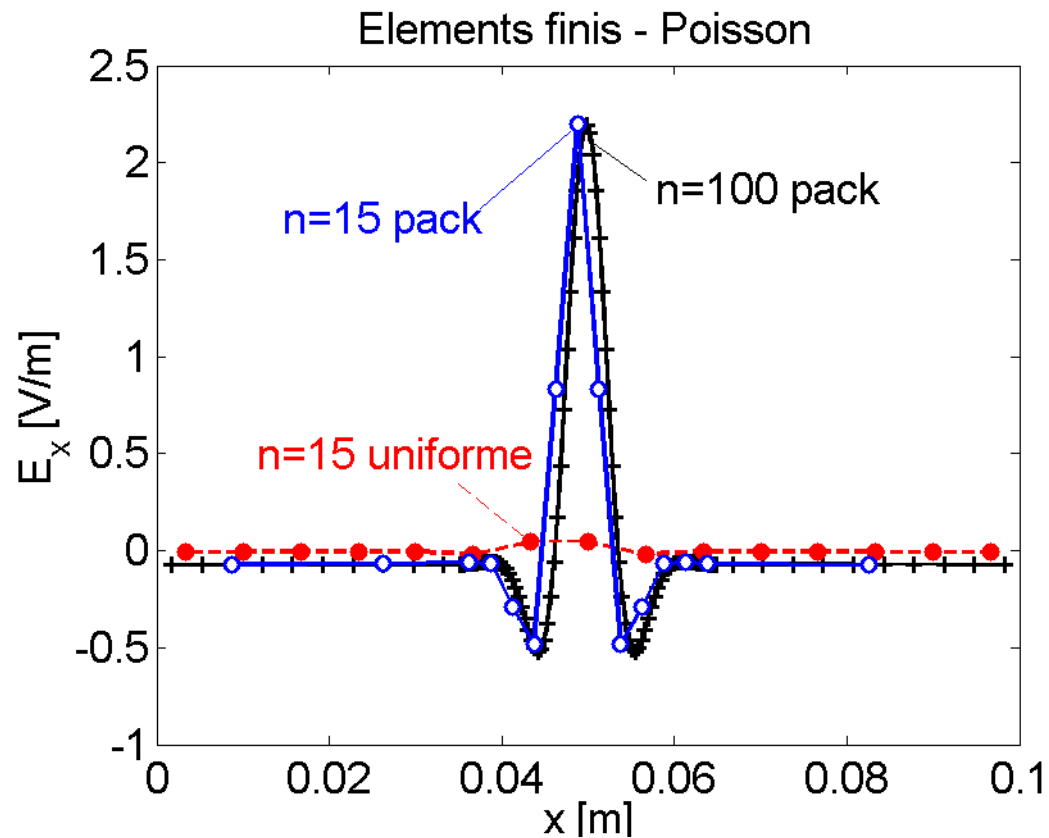


Elements finis linéaires 1D



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

Elements finis linéaires 1D



- ... ce qui améliore la convergence numérique

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?
- $\phi \approx \phi_h = \sum_j \phi_j \Lambda_j(x)$
- $d\phi_h/dx = \sum_j \phi_j d\Lambda_j/dx$
- $d^2\phi_h/dx^2 = \sum_j \phi_j d^2\Lambda_j/dx^2$????

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:

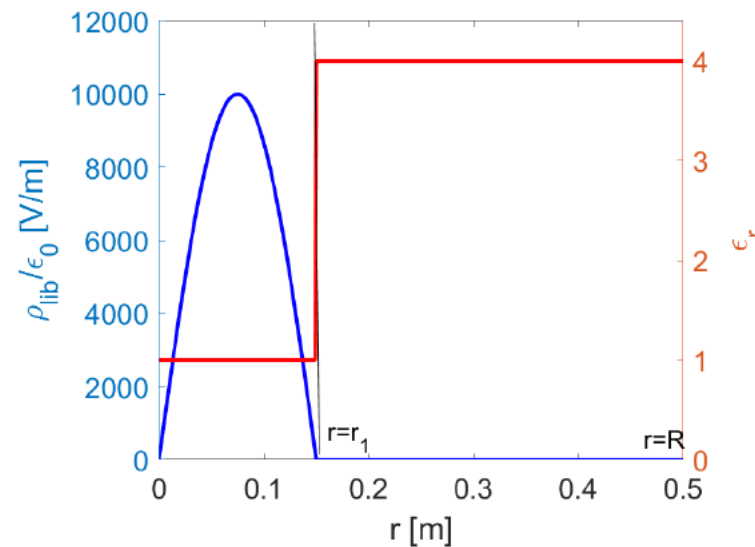
$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{xa}^{xb} (\phi_h(x) - \phi(x))^2 dx = 0$$

- 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 4, vous vérifierez empiriquement l'ordre de convergence de la solution numérique.

FAQ-Elements finis - 3

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

Ex. 4. Electrostatique avec charges libres dans le vide et charges de polarisation dans la matière diélectrique, dans un cylindre



Densité de charges libres $\rho_{\text{lib}}(r)/\epsilon_0$ et constante diélectrique $\epsilon_r(r)$.

Electrostatique dans la matière, inhomogène

Ex.4 3 (c) vérifier $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{lib}$

Coordonnées cylindriques :

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

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

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

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

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

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

• Comparer ensuite : $\frac{1}{r_{midmid,k}} \frac{d\alpha}{dr}(r_{midmid,k}) \stackrel{?}{=} \rho_{lib}(r_{midmid,k})/\epsilon_0$

Electrostatique dans le vide.

Forme variationnelle: un petit quiz...

- Eq. de Laplace:

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

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

- Cas 1D, cartésien: $\frac{d^2 \phi}{dx^2} = 0, \forall x \in]a, b[, \phi(a) = V_a, \phi(b) = V_b$
- Forme variationnelle après intégration par parties:

$$\int_a^b \frac{d\eta}{dx} \frac{d\phi}{dx} dx = 0, \forall \eta \quad \text{Soit } g = \frac{d\eta}{dx}$$

$$\Leftrightarrow \int_a^b g \frac{d\phi}{dx} dx = 0, \forall g \quad \Leftrightarrow \frac{d\phi}{dx} = 0, \forall x \quad ????????$$

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

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)

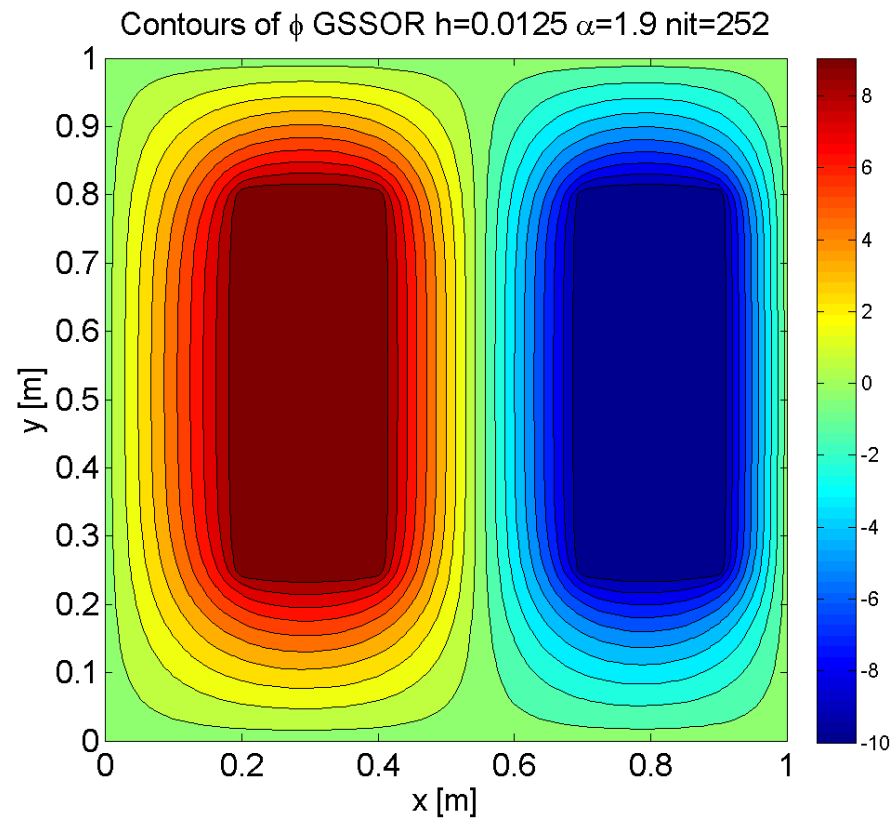
- Initialiser toutes les valeurs aux points de maillage, ϕ_{ijk}
- Calculer le résidu r
- Boucle while $r > p$
 - Boucle sur les points de maillage (i,j,k)

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

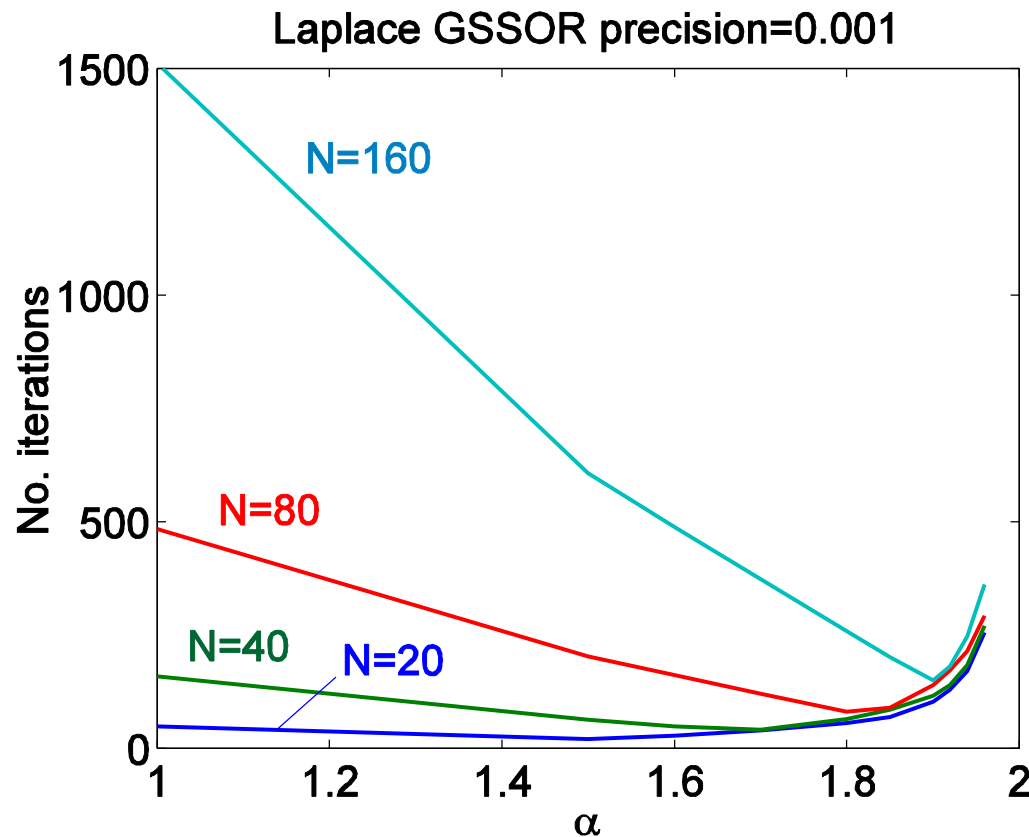
$$\phi_{i,j,k}^{(l+1)} = \phi_{i,j,k}^{(l)} + \alpha \left(\phi_{i,j,k}^{(*)} - \phi_{i,j,k}^{(l)} \right)$$

- 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.***

■ Exemple: 2D, électrodes rectangulaires

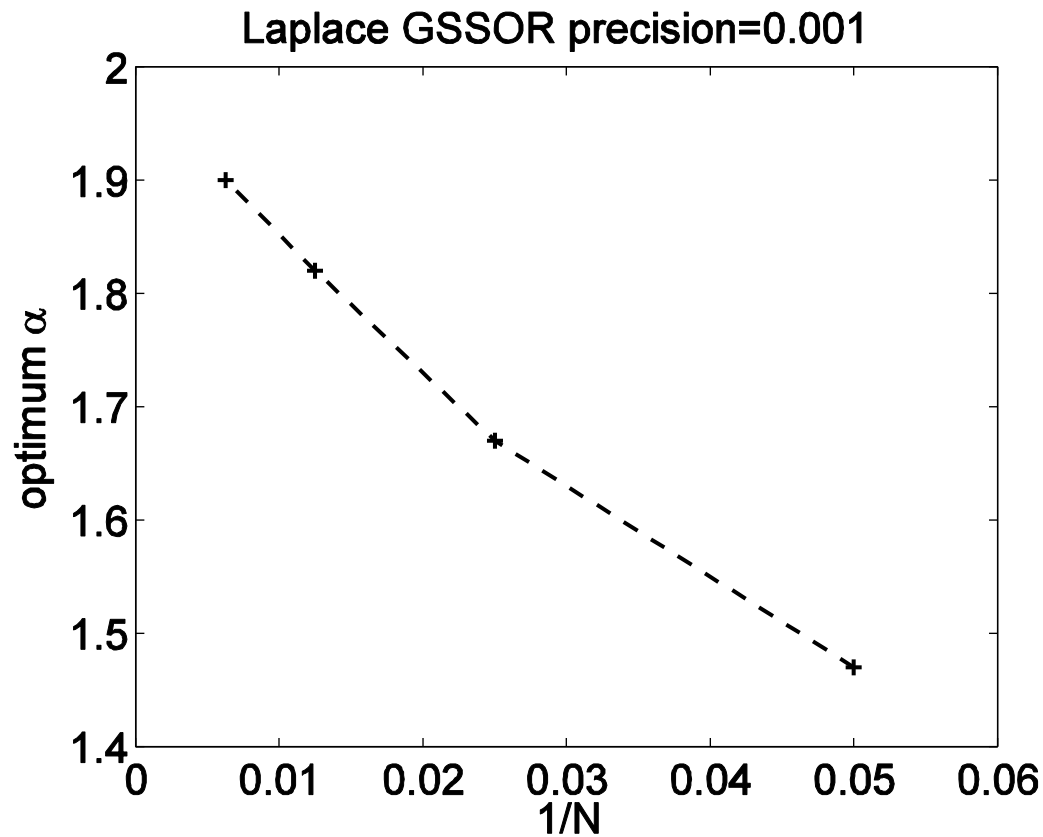


Optimisation de SOR - 1

2D

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

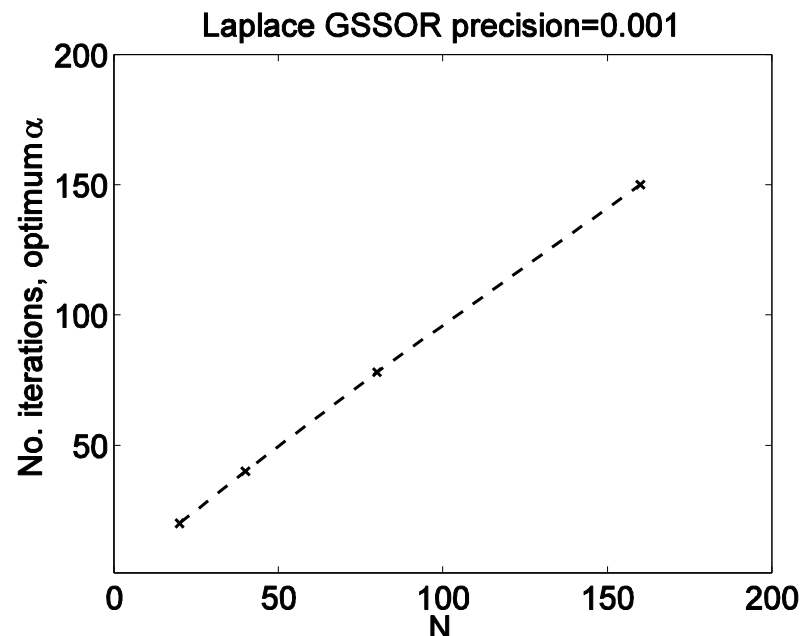
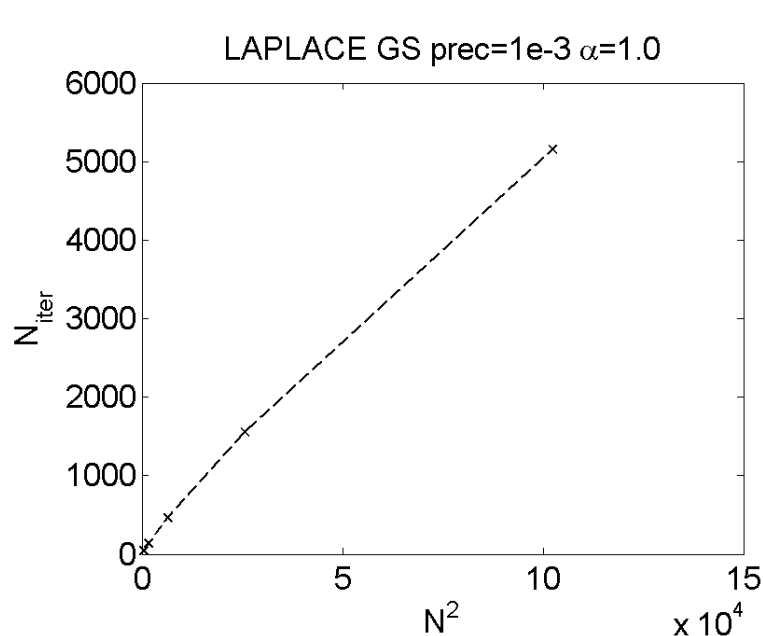
Optimisation de SOR - 2

2D

- La valeur optimale de α dépend de N

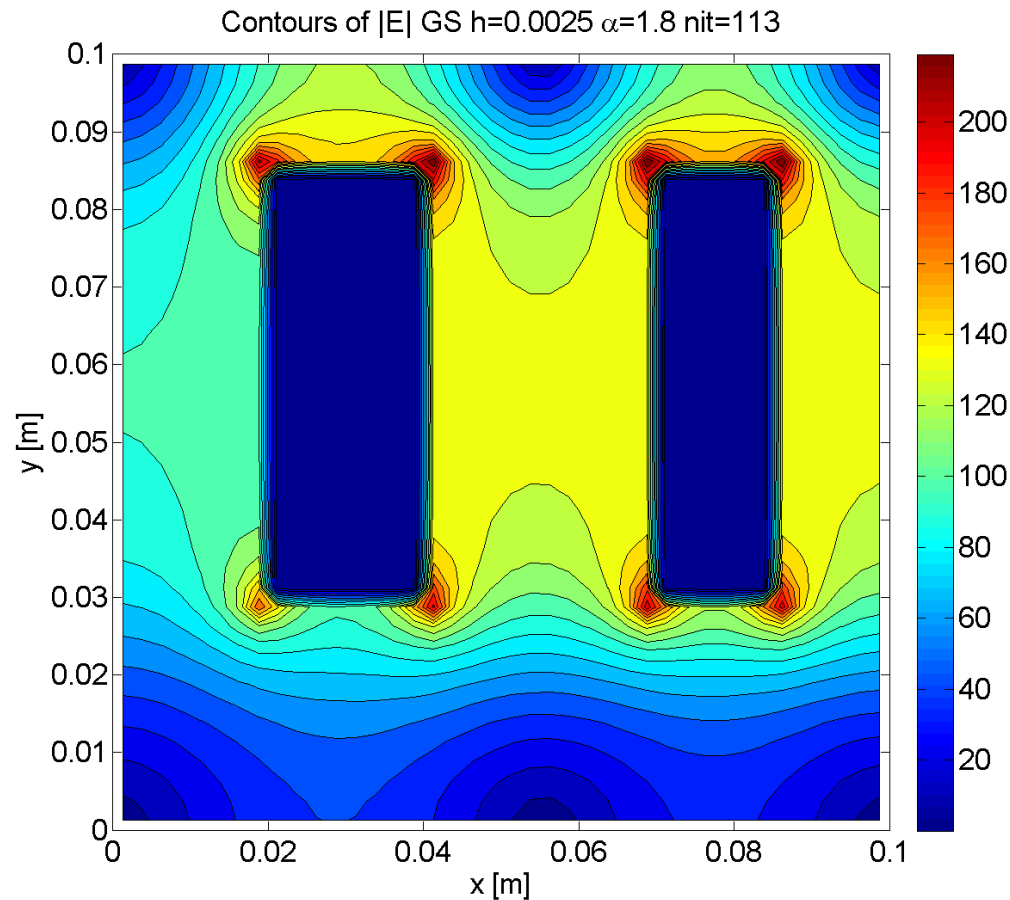
Optimisation de SOR - 3

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

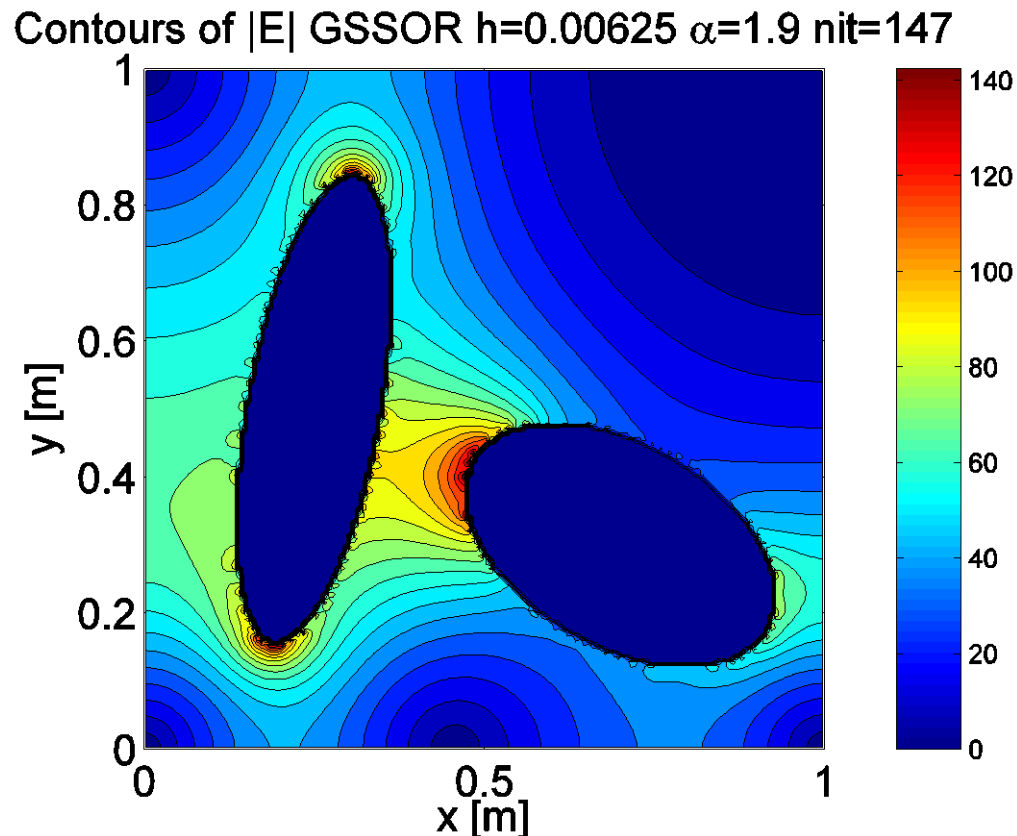


L'intensité du champ E est très grande aux angles de la surface...
... en fait, le champ E est **singulier** aux angles de la surface

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



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 $Q_a + Q_b = \text{const}$
 - ...