

Discrétisation d'un phénomène de diffusion

J. Erhel

Décembre 2014

1 Idée générale de la discrétisation

pour ce type de problème, on peut alors discrétiser par différences finies, volumes finis, éléments finis, ou autre.

Le modèle de diffusion est un système d'équations aux dérivées partielles. On dit qu'il est continu, car les inconnues sont des fonctions des variables d'espace et de temps, qui varient de façon continue dans l'ensemble des nombres réels.

L'idée des méthodes d'approximation est d'approcher les fonctions en utilisant un nombre fini de fonctions de base. On dit que le problème approché est discret, car les fonctions sont alors définies par des valeurs en un nombre fini de points d'espace ou un nombre fini d'instant. On discrétise l'espace en cellules et on cherche la valeur de la fonction en quelques points de chaque cellule. Pour cela, on approche les dérivées à partir de leur définition.

1.1 Modèle 1D stationnaire linéaire

Pour fixer les idées, on va supposer que la quantité p est donnée aux bords de l'intervalle de calcul $[0, L]$. L'équation à résoudre est la suivante:

$$\begin{cases} v(x) = -K(x)p'(x), & x \in]0, L[, \\ v'(x) = q(x), \\ p(0) = p_g, \\ p(L) = p_d. \end{cases} \quad (1)$$

L'intervalle 1D est découpé en intervalles de même longueur h , comme indiqué sur la figure 1. On a n cellules numérotées $1, 2, \dots, n$; les milieux des cellules sont les points x_i . Le bord gauche est le point g et le bord droit est le point d .

Il existe plusieurs façons de discrétiser l'équation (1). Ici, on utilise la méthode des éléments finis mixtes, qui définit des fonctions discrètes, à la fois pour la quantité p et pour la vitesse v .

Les inconnues à calculer sont les n valeurs p_i à chaque point x_i . Le problème approché est un système d'équations avec les inconnues p_i . Pour définir ce problème, on écrit la loi de Darcy et la loi de conservation, dite locale, dans chaque cellule i .

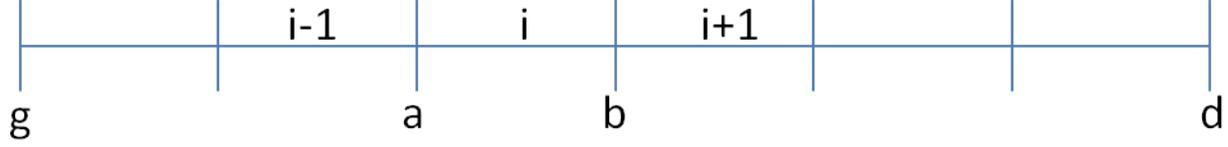


Figure 1: discrétisation de l'intervalle en cellules

Les points extrémités de la cellule i sont le point a à gauche et le point b à droite. Le point a est donc à une distance $l = h/2$ des points x_{i-1} et x_i ; le point b est aussi à une distance $l = h/2$ des points x_i et x_{i+1} .

On note p_a et p_b la quantité p aux points a et b ; on note aussi v_a et v_b la vitesse aux points a et b . Ces quantités sont inconnues mais on les calcule à partir des p_i .

On exprime la loi de Darcy au point a , pour approcher v_a de deux façons, dans la cellule i et dans la cellule $(i - 1)$. Le gradient de p (la dérivée de p) au point a est approché par un taux d'accroissement. On a donc, de façon approchée:

$$\begin{cases} v_a = -K_i(p_i - p_a)/l, \\ v_a = -K_{i-1}(p_a - p_{i-1})/l, \\ p_a = \frac{K_i p_i + K_{i-1} p_{i-1}}{K_i + K_{i-1}}. \end{cases}$$

Soit

$$\begin{cases} \alpha_i = \frac{2K_i K_{i-1}}{K_i + K_{i-1}}, \\ \alpha_1 = 2K_1, \\ \alpha_{n+1} = 2K_n. \end{cases}$$

On a donc

$$\begin{cases} v_a = -\frac{1}{h}\alpha_i(p_i - p_{i-1}), \\ v_b = -\frac{1}{h}\alpha_{i+1}(p_{i+1} - p_i), \end{cases}$$

où $p_0 = p_g$ et $p_{n+1} = p_d$.

On écrit maintenant la loi de conservation locale dans la cellule i :

$$(v_b - v_a)/h = q_i,$$

et on obtient l'équation de la cellule i :

$$\frac{1}{h^2}((\alpha_i + \alpha_{i+1})p_i - \alpha_i p_{i-1} - \alpha_{i+1} p_{i+1}) = q_i.$$

Grâce aux conditions aux bords, p_0 et p_{n+1} sont connus, on a ainsi un système de n équations avec n inconnues:

$$\begin{cases} (\alpha_1 + \alpha_2)p_1 - \alpha_2 p_2 = h^2 q_1 + \alpha_1 p_g, \\ \dots \\ (\alpha_i + \alpha_{i+1})p_i - \alpha_i p_{i-1} - \alpha_{i+1} p_{i+1} = h^2 q_i, \\ \dots \\ (\alpha_n + \alpha_{n+1})p_n - \alpha_n p_{n-1} = h^2 q_n + \alpha_{n+1} p_d. \end{cases}$$

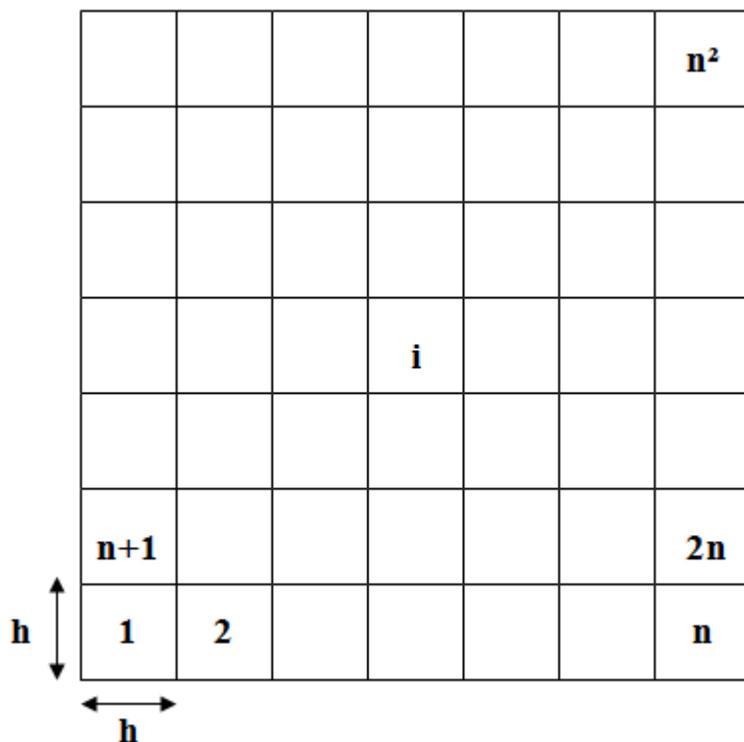


Figure 2: discrétisation du carré en cellules

C'est un système linéaire tridiagonal symétrique, qui peut être écrit sous forme matricielle.

exercice: écrire le système pour $n = 5$.

1.2 Géométrie 2D ou 3D simple

On considère toujours un modèle stationnaire linéaire. On va définir la méthode d'éléments finis mixtes pour une géométrie simple avec un maillage régulier.

En 2D, le domaine est un carré, de côté L ; on maille le carré en cellules, qui sont des petits carrés de côté h , comme indiqué sur la figure 2. Il y a n carrés sur la première ligne, numérotés de 1 à n , puis n sur la deuxième ligne, numérotés de $n+1$ à $2n$, etc, jusqu'à n^2 . On note $N = n^2$.

Chaque cellule i a quatre côtés, notés a, b, c, d , et quatre cellules voisines: $i-1$ à gauche, $i+1$ à droite, $i-n$ en bas, $i+n$ en haut. Voir la figure 3.

Les inconnues sont les quantités p_i au milieu de chaque cellule i , $i = 1, \dots, N$.

On exprime la loi de Darcy sur le côté a , de deux façons, dans les cellules i et $i-1$, comme en 1D; on obtient ainsi p_a et v_a .

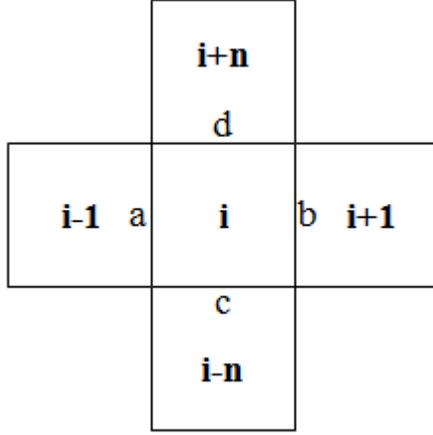


Figure 3: discrétisation du carré en cellules

On fait de même pour les cellules i et $i + 1$, on obtient p_b et v_b .

Pour les cellules i et $i - n$, on obtient p_c et v_c .

Pour les cellules i et $i + n$, on obtient p_d et v_d .

On écrit ensuite la loi de conservation locale dans la cellule i :

$$\frac{v_b - v_a}{h} + \frac{v_d - v_c}{h} = q_i.$$

On obtient un système de N équations à N inconnues; les valeurs de p imposées sur les bords sont mises dans le second membre.

Le système linéaire a une structure pentadiagonale symétrique

$$\begin{cases} a_{1,1}p_1 + a_{1,2}p_2 + a_{1,n+1}p_{n+1} = b_1 \\ \dots \\ a_{i,i-n}p_{i-n} + a_{i,i-1}p_{i-1} + a_{i,i}p_i + a_{i,i+1}p_{i+1} + a_{i,i+n}p_{i+n} = b_i \\ \dots \\ a_{N,N-n}p_{N-n} + a_{N,N-1}p_{N-1} + a_{N,N}p_N = b_N \end{cases}$$

On peut écrire ce système sous forme matricielle. On définit la matrice carrée $A = (a_{i,j})$, $1 \leq i \leq N$, $1 \leq j \leq N$ de taille $N \times N$, les vecteurs p et b de taille N . Le système est équivalent à

$$Ap = b$$

La matrice A a ici une structure régulière creuse.

1.3 Géométrie 2D ou 3D quelconque

Dans le cas d'une géométrie 2D plus compliquée, on ne peut pas définir un maillage en cellules carrées de même taille. On peut générer un maillage en quadrilatères ou en triangles, de taille variable. Le maillage est dit conforme lorsque les sommets des triangles sont communs. Un sommet d'un triangle ne peut pas être sur un côté ou à l'intérieur d'un autre triangle. En 3D, on peut mailler avec des tétraèdres ou des hexaèdres.

On peut généraliser la méthode précédente, par le schéma des éléments finis mixtes. Considérons par exemple des triangles en 2D.

Les inconnues sont cette fois les quantités au centre de chaque triangle i et les quantités sur les côtés des triangles. On note N le nombre de côtés dans le maillage.

Chaque triangle i a trois côtés a, b, c , avec les inconnues $p_i, p_a, p_b, p_c, v_a, v_b, v_c$.

On écrit de même la loi de Darcy sur chaque côté, vue des deux triangles partageant ce côté. Puis on écrit la loi de conservation locale dans chaque triangle, en tenant compte des flux entrants et sortants. C'est plus compliqué à écrire, mais le principe reste le même. On élimine comme précédemment les inconnues vitesse et cette fois les inconnues aux centres des triangles; Les inconnues qui restent sont les quantités sur les côtés.

On obtient ainsi un système linéaire $Ap = b$ avec $A = (a_{i,j}), 1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq N$ et $a_{i,j} \neq 0$ seulement pour des triangles voisins. La matrice est creuse non structurée.

La matrice est symétrique et est définie positive.

1.4 Convergence du schéma

Pour construire le système linéaire en dimension finie, on a utilisé une approximation de la loi de Darcy et de la loi de conservation. On introduit un paramètre h , qui caractérise le maillage. Dans le cas d'un maillage régulier, c'est la longueur du côté des cellules.

On calcule donc une quantité approchée p_h ; on veut que ce soit une bonne approximation de la solution p du problème continu (le système des équations aux dérivées partielles). Plus précisément, on voudrait que l'approximation soit d'autant plus précise que h est petit. Autrement dit, on voudrait avoir p_h tend vers p quand h tend vers 0.

On fait une analyse mathématique; il faut d'abord définir de quelle façon une fonction tend vers une autre. Pour cela, on définit des espaces de fonctions et des normes dans ces espaces. Ensuite, on démontre une estimation d'erreur a priori; il faut faire des hypothèses sur la régularité des fonctions, sur la géométrie du domaine de calcul et sur le maillage. Cette estimation d'erreur s'écrit par exemple

$$\|p_h - p\| \leq ch$$

Donc si on divise h par 2, on divise aussi l'erreur par 2.

On a utilisé ici des éléments finis d'ordre un, notés RT0. On peut monter en ordre, et obtenir une approximation plus précise, d'ordre k , avec l'estimation d'erreur:

$$\|p_h - p\| \leq ch^k$$

Le schéma des éléments finis mixtes est un schéma possible parmi d'autres. On peut aussi utiliser un schéma de différences finies, un schéma de volumes finis, un schéma d'éléments finis.

Tous ces schémas sont dits de type Eulérien, parce qu'on approche ce qui se passe localement dans une cellule. Il existe aussi des schémas dits de type Lagrangien, où on approche la trajectoire de particules qui diffusent dans le domaine.

2 Résolution d'un système linéaire

Pour résoudre un système linéaire, on peut utiliser une méthode directe ou itérative. Lorsque la matrice est symétrique définie positive, la méthode directe utilise la factorisation de Cholesky.

2.1 Système tridiagonal

Dans le cas d'un système tridiagonal, la méthode directe est très efficace. Voir par exemple

https://interstices.info/jcms/i_55887/un-algorithme-pour-mettre-en-rang-une-equipe-de-football

2.2 Système creux

Lorsque la matrice est creuse, on utilise un stockage adapté et un algorithme de résolution adapté.

3 Système dynamique de diffusion

évolution temporelle

variable temps t en plus, $t \geq 0$; fonctions de x et t : charge $p(t, x)$ etc