

TD IMSP φ 3 : Résolution de l'équation de Laplace $\Delta V=0$ autour d'un condensateur plan

Nous utiliserons une **méthode des différences finies** qui consiste à réaliser un maillage (à pas fixe ou variable) de l'espace à visualiser puis à substituer les dérivées partielles (secondes ici) de l'équation différentielle par les « différences finies » (*qui correspondent à l'utilisation des développements limités de la fonction à l'ordre souhaité (Taylor-Lagrange appliqué aux points les plus proches dans le maillage)*)

Plus précisément, nous utiliserons une méthode de type **Gauss-Seidel** :

- Au cours d'une itération k d'obtention progressive des potentiels de noeuds par balayage de l'espace 2D (sens de lecture usuel : toutes les colonnes de la première ligne puis de la ligne suivante), on utilise les valeurs de potentiels calculées lors de ce k -ième balayage lorsqu'il s'agit de noeuds immédiatement à gauche ou au-dessus mais des valeurs calculées lors du $(k-1)$ -ème balayage lorsqu'il s'agit de noeuds immédiatement à droite ou au-dessous. (*Dans cette méthode, on ne stocke que le dernier tableau (dernière matrice calculée)*)
- Ce type de **méthode itérative** est convergente, les potentiels obtenus dans la matrice de maillage convergent vers la solution. On stoppera le calcul par une instruction doublement conditionnelle : soit un seuil d'écart maximal entre les dernières matrices est atteint, soit un maximum d'itérations est atteint...car la taille de la matrice peut être importante et la convergence lente !

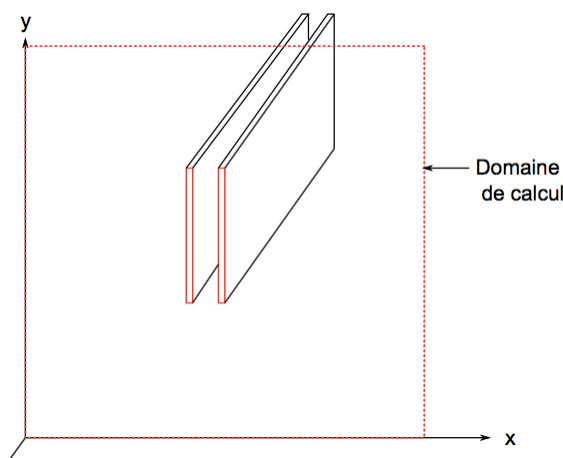
Cette méthode est grandement accélérée dans les variantes avec « sur-relaxation » et/ou des calculs « multigrilles » (maillages de tailles différentes lors des différentes itérations)

Pour en savoir plus :

sur-relaxation : <http://www.f-legrand.fr/scidoc/docmml/numerique/elliptique/gaussseidel/gaussseidel.html>

multigrilles : <http://www.f-legrand.fr/scidoc/docmml/numerique/elliptique/multigrilles/multigrilles.html>

I. Le modèle « mathématique » 2D



I.1. Modélisation discrète de l'espace 2D

Nous représenterons le condensateur par la double trace infiniment mince de ses armatures finies dans un plan xy et infinies dans la direction z (invariance de la situation par translation : « on néglige les effets de bord » dans la direction z seulement)

Les armatures correspondent donc à deux séries verticales de noeuds du maillage. Le pas du maillage sera choisi unitaire et la **taille du condensateur devra rester proportionnelle à l'extension du domaine de calcul ($n \times p$)** :

- espace inter-armatures : $\approx 1/4$ de la largeur
- extension verticale des armatures : $\approx 1/2$ de la hauteur

Vous confirmerez (plus tard !) que pour la matrice ($n \times p$) avec les $n=p=21$, $n=p=41$ ou $n=p=61$, les noeuds constituant

- l'armature gauche sont positionnés en : $((n-1)/4):(3*(n-1)/4),(7*(p-1)/20)$ (indices de position entiers !!)
- l'armature droite sont positionnés en : $((n-1)/4):(3*(n-1)/4),(13*(p-1)/20)$ (indices de position entiers !!)

I.2. Du laplacien aux différences finies

En cartésiennes 2D : $\Delta V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}$

Pour des pas a priori différents Δx et Δy , montrer avec des développements de Taylor à l'ordre 2 :

$$\frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial x^2} \approx \frac{V(x+\Delta x,y) - 2.V(x,y) + V(x-\Delta x,y)}{(\Delta x)^2}$$

$$\frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial y^2} \approx \frac{V(x,y+\Delta y) - 2.V(x,y) + V(x,y-\Delta y)}{(\Delta y)^2}$$

Dans le cas d'incrémentes spatiaux égaux et unitaires sur x et y , l'expression du laplacien 2D comme différence finie devient simplement (avec i,j les numéros de ligne et de colonne) :

$$V(i-1,j) + V(i+1,j) + V(i,j-1) + V(i,j+1) - 4V(i,j)$$

L'équation de Laplace (Poisson avec absence de densité volumique de charge) donne donc le potentiel en (i,j) connaissant les 4 voisins :

$$V(i,j) = \frac{V(i-1,j) + V(i+1,j) + V(i,j-1) + V(i,j+1)}{4}$$

Lors du k -ième balayage et remplissage du tableau des potentiels de noeuds, les valeurs à gauche $V(i,j-1)$ et au-dessus $V(i-1,j)$ viennent d'être calculées lors cette itération même. On distinguera donc les valeurs de potentiels issus de la $(k-1)$ -ème et de la k -ième itération par :

$$V^k(i,j) = \frac{V^k(i-1,j) + V^{k-1}(i+1,j) + V^k(i,j-1) + V^{k-1}(i,j+1)}{4}$$

Remarque : Les correspondances avec les notations utilisées dans le document annexe présentant plusieurs méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires de présentation matricielle $A.x=B$ et aboutissant pour Gauss-Seidel aux relations entre coefficients des matrices :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \cdot \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k-1)} \right)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} a_{ii} = -4 \\ b_i = 0 \\ a_{ij} = 1 \text{ pour } j = i-1 \text{ et } j = i+1 \\ a_{ij} = 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

I.3. Conditions aux limites spatiales

Lors de la résolution d'une équation de type Poisson ou Laplace, il est nécessaire de définir des conditions aux limites spatiales du domaine. Ces conditions sont essentiellement de deux types :

- DIRICHLET : C'est la valeur de la fonction elle-même (le potentiel ici) qui est connue en tout point des frontières du domaine de calcul.
- NEUMANN : Ce sont les valeurs des dérivées partielles (variations) de la fonction (ce qui correspondrait aux composantes cartésiennes du champ électrostatique ici) qui sont connues en tout point des frontières du domaine de calcul.

(Remarque : l'équation de la diffusion thermique en régime stationnaire et sans terme de production donne aussi une équation de Laplace à résoudre où le potentiel est remplacé par la température : la connaissance de la température sur toutes les frontières est une CLS de type DIRICHLET et celle de la densité de flux thermique sur toute la frontière est une CLS de NEUMANN)

On se limitera à des CLS de DIRICHLET :

- Le potentiel des points d'armature sont fixés définitivement à -50V à gauche et +50V à droite
- Le potentiel des noeuds du périmètre « carré » du domaine sont fixés définitivement à 0V.

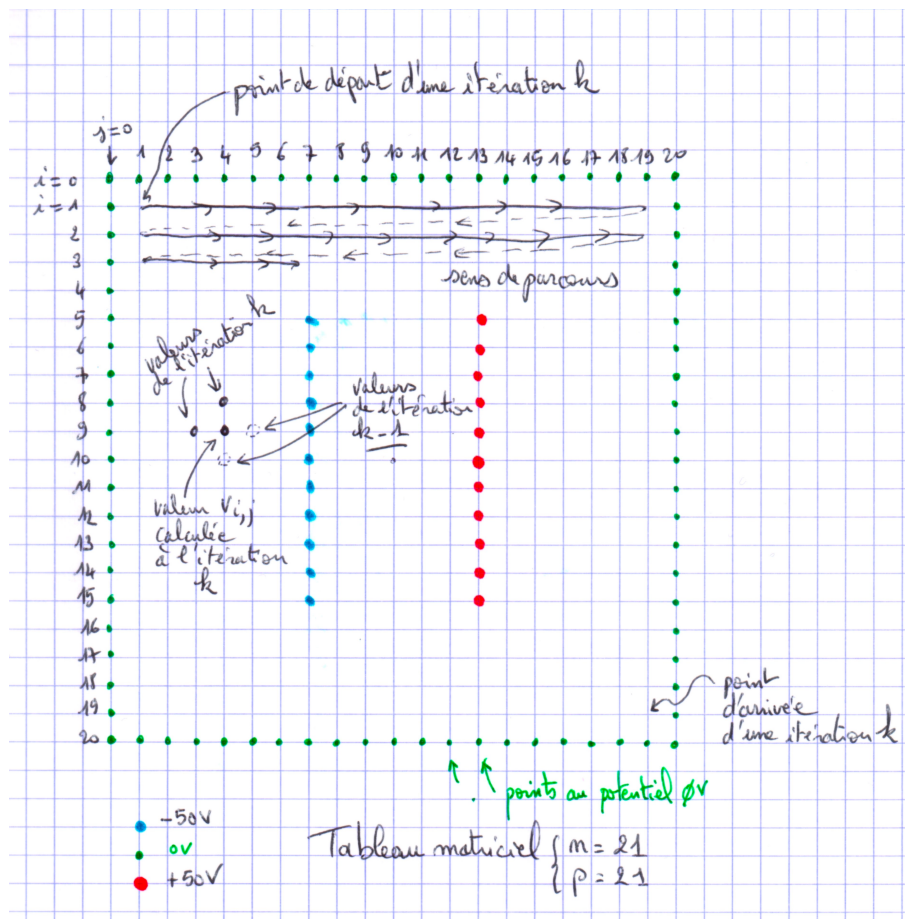
Remarquez donc que l'on se trouve dans une boîte de conducteur de section carrée et reliée à la masse ! (on n'oubliera pas d'observer les équipotentielles au voisinage de cette boîte)

II. Bords et circulation dans la matrice

Nous remarquons d'abord que nous ne circulerons dans ce tableau matriciel qu'à l'intérieur puisque les première et dernière lignes ($i=0$ et $i=n-1$) et les première et dernière colonnes ($j=0$ et $j=p-1$) ont des potentiels nuls qui doivent le rester.

Le sens du parcours du tableau est rappelé sur la figure ci-dessous.

Pour éviter de devoir « sauter » les points des armatures, on fera dans les boucles le calcul sur tous les noeuds intérieurs suivi d'une réaffectation systématique des potentiels initiaux aux points des armatures. Bords et circulation dans la matrice



III. Programme PYTHON

III.1. Bibliothèques

Nous importerons **matplotlib.pyplot** renommée **pl** pour les représentations graphiques (plus spécifiquement pour **pl.contour** et **pl.imshow** que l'on ira découvrir dans l'inspecteur d'objets python)

Nous importerons **scipy** renommé **sc** (contenant les fonctions de numpy comme **zeros**, **arange**, **meshgrid**) et plus spécifiquement le module d'algèbre linéaire **scipy.linalg** renommé **la**. (pour les calculs de norme de matrice)

Enfin nous importerons **time** pour comparer les temps de calcul.

III.2.Programme

III.2.1.Initialisation des coefficients (potentiels de noeuds) de la matrice

Tableau de n lignes et p colonnes (on testera 21x21,41x41 et 61x61)

Même si l'affectations de zéros suffirait, je vous invite à ajouter des lignes supplémentaires pour pouvoir proposer des potentiels différents de zéro sur les frontières du domaine carré pour tester d'autres cas.

Affectation des potentiels des noeuds d'armature (on n'oubliera pas leur réaffectation systématique à l'intérieur de la boucle de calcul qui suit)

Recopie du tableau V avec appellation Vc (V copié)

Initialisation d'une variable err à 1 et de l'itérateur k à 0.

III.2.2.Boucle « tant que »

Tant que l'écart relatif « err » est supérieur à 1E-6 et que le compteur d'itérations k ne dépasse pas 500 :

Balayage de « l'intérieur » du tableau avec :

- affectation de la nouvelle valeur de Vc[i,j] en utilisant les Vc calculés à l'itération k pour ceux à gauche et au-dessus et les V calculés à l'itération k-1
- réaffectations des potentiels fixes aux noeuds d'armature

Sortie de la boucle de remplissage des termes d'une ligne.

Calcul d'écart « err » : norme de la matrice écart (Vc-V) rapporté à la norme de Vc
Copie de Vc dans V

Sortie du remplissage de la dernière ligne

incrémentation unité du compteur k

(deux relevés de temps avant et après cette boucle permettent de sortir la durée de calcul)

III.2.3.Aide sur les fonctions graphique de maillage et tracés de contour

```
x,y=sc.arange(n),sc.arange(p)
X,Y=sc.meshgrid(x,y)
fig1 =pl.contour(X,Y,Vc,20)
pl.grid();
pl.imshow(Vc,alpha=0.7)
pl.colorbar(fig1,use_gridspec=True)
```

III.2.4.Bilan du calcul

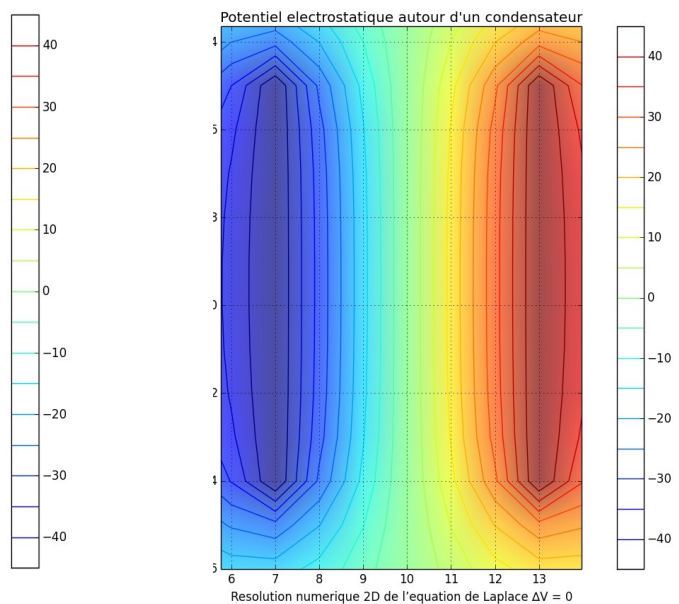
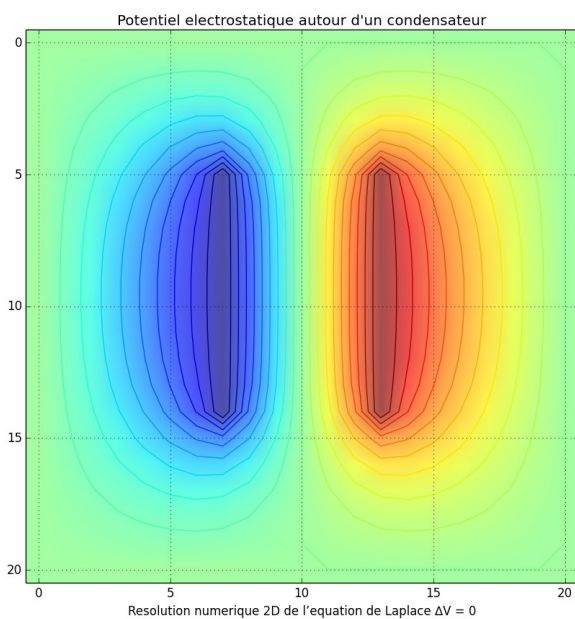
On sortira :

- le nombre total d'itérations donné par k
- l'écart relatif final de la norme
- la durée du calcul en secondes

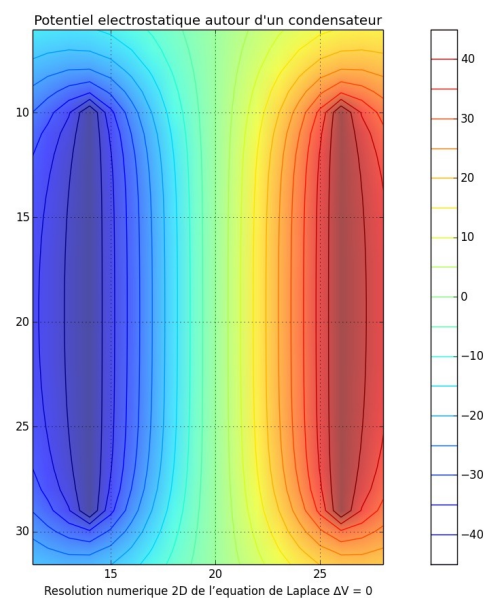
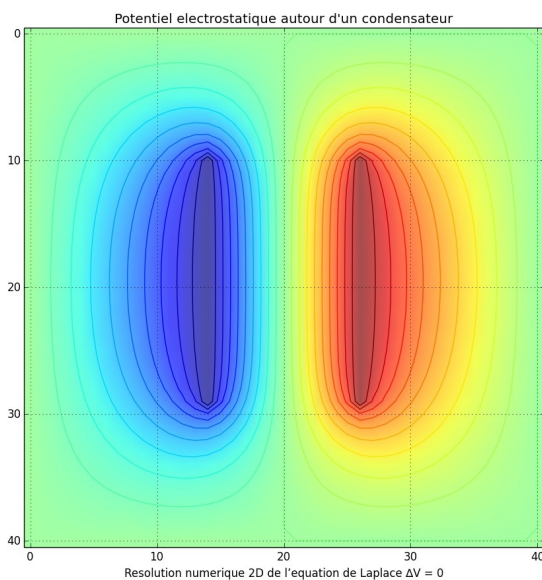
III.3.Sorties graphiques

Voici le champ des potentiels en code couleur avec repérage régulier des équipotentielles :

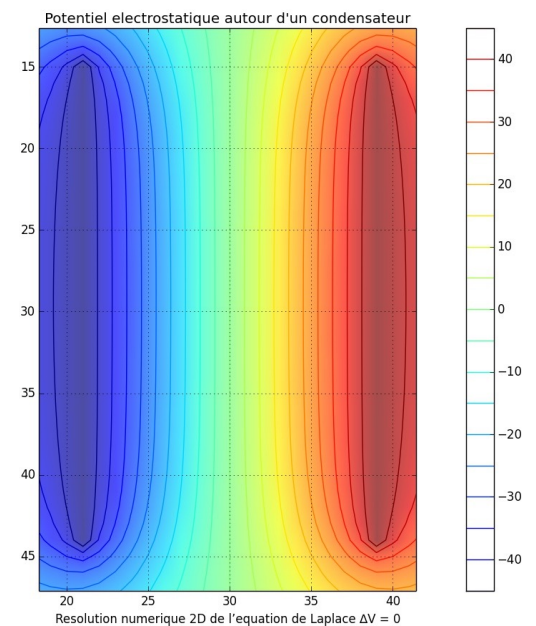
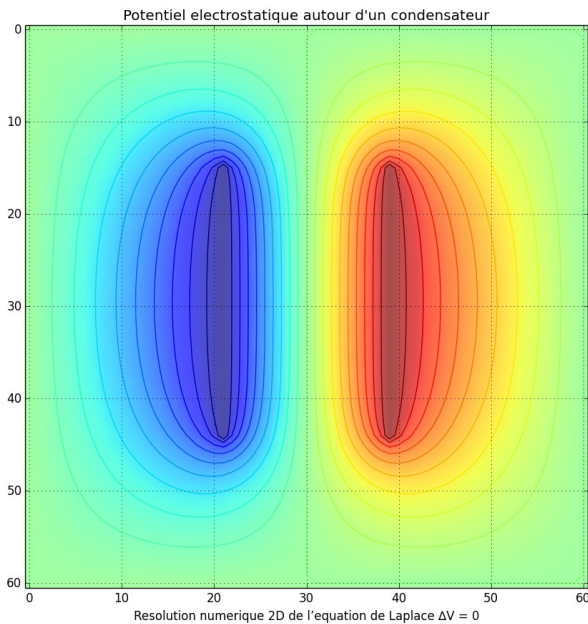
n=p=21



n=p=41



$$n=p=61$$

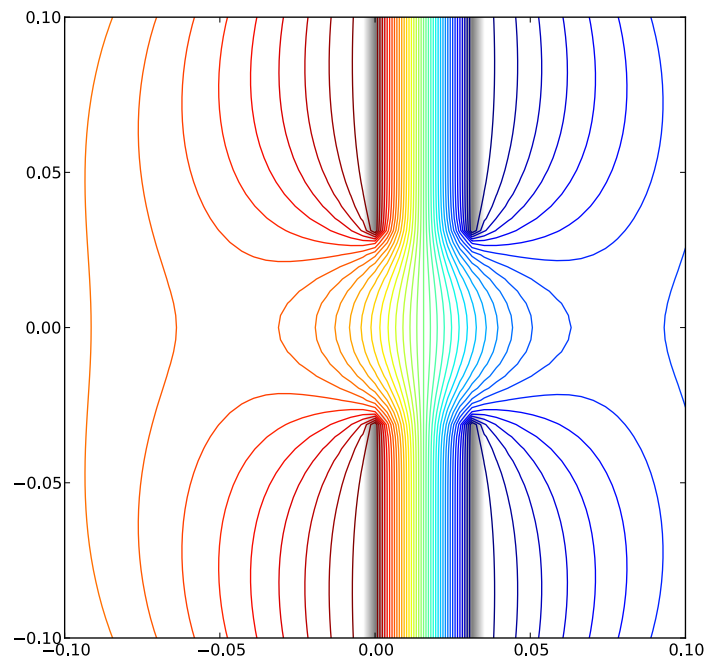
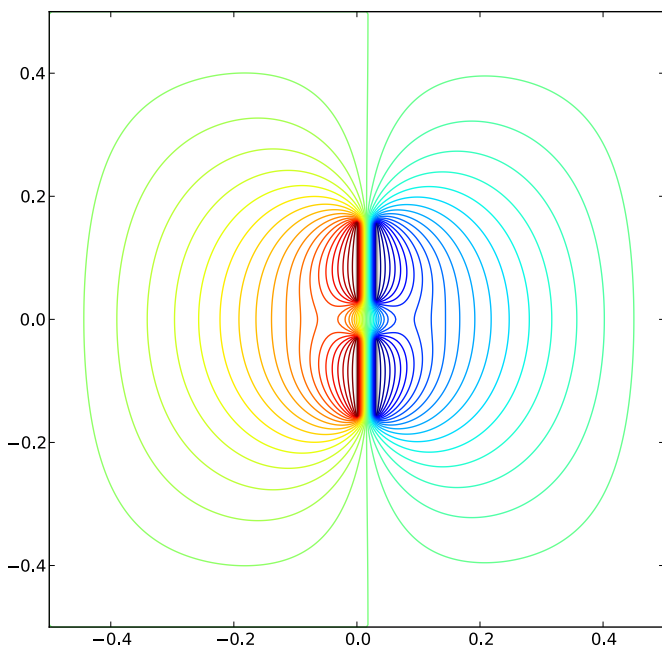


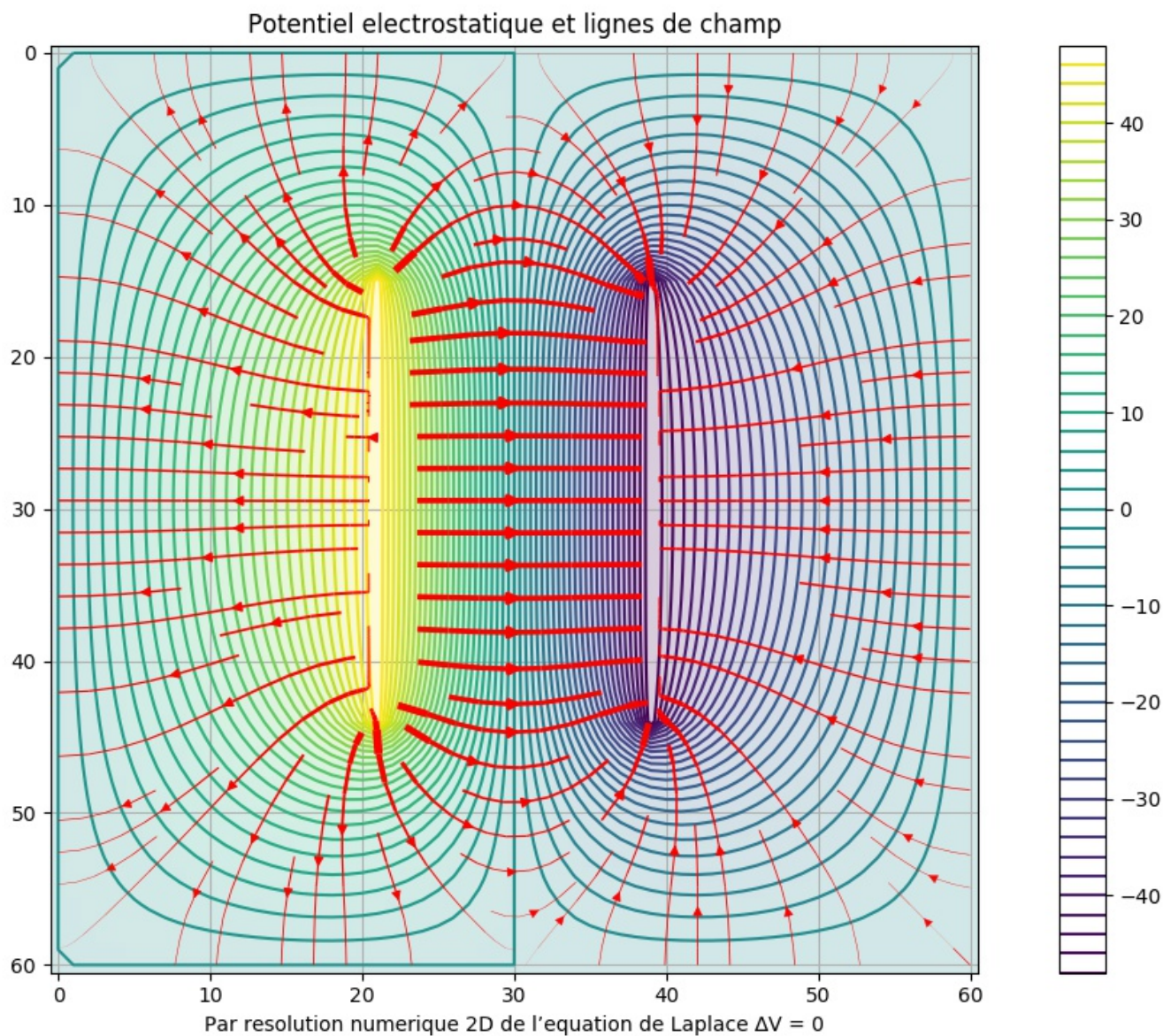
Remarquer la déformation des équipotentiels à l'approche de la boîte carrée.

Les contours ne rejoignent pas a priori des points du maillage : pourquoi cela avait-il peu de chance d'arriver ?

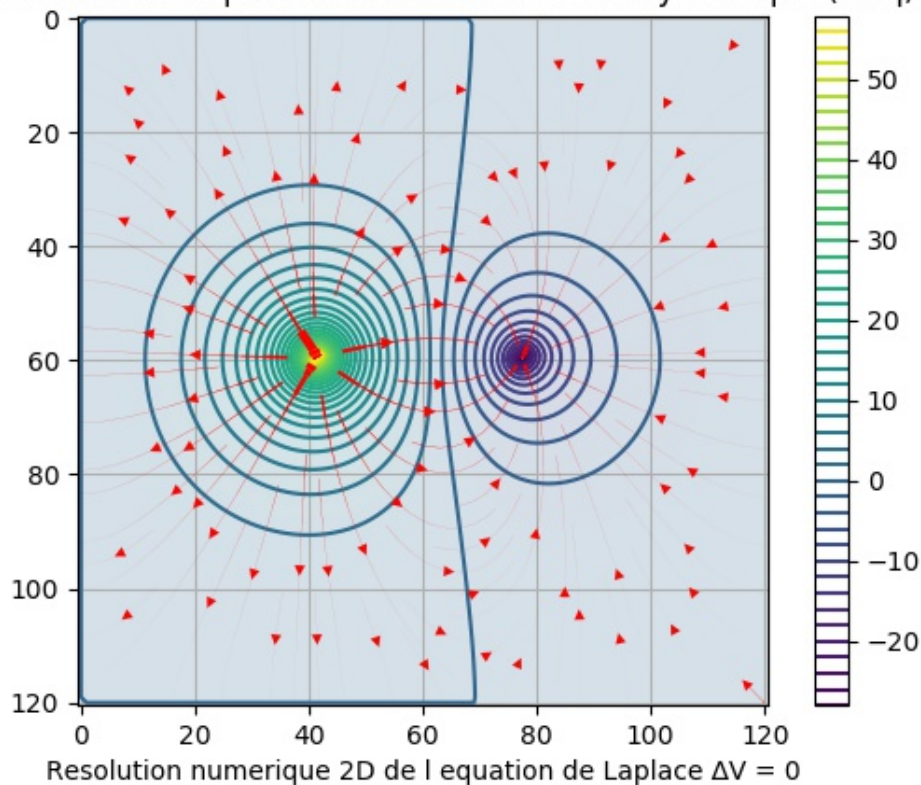
Comment feriez-vous pour obtenir les composantes du champ électrostatique en chaque point à partir des valeurs de la matrice finale ?

Ci-dessous le cas d'un **trou percé au milieu des plaques** pour accélérer des particules chargées comme des électrons. Où doit-on « lâcher » la particule relativement à l'armature négative pour qu'elle sorte avec une vitesse maximale ?





Potentiel electrostatique autour d'un doublet dissymétrique (+2q,-q)



Résolutions numériques par méthodes itératives

2.1. Principe des méthodes

a) Présentation

L'idée maîtresse des méthodes itératives pour la résolution des systèmes linéaires réside dans la construction d'une suite convergente de vecteurs $(x^{(k)})_{k \in \mathbb{N}}$ telle que :

$$x = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} \text{ où } x \text{ est la solution du système } Ax = b$$

La suite s'intéresse aux méthodes itératives de la forme :

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f \text{ pour } x^{(0)} \text{ donné}$$

$B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ est la matrice d'itération et f est un vecteur dépendant de b .

b) Consistance et convergence des méthodes

Une méthode itérative de la forme $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ est dite consistante avec le problème $Ax = b$ si la solution x du système à résoudre vérifie $x = Bx + f$.

$e^{(k)}$ est défini comme l'erreur commise à la $k^{\text{ème}}$ itération $e^{(k)} = x^{(k)} - x$, alors la convergence de la méthode $x = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}$, revient à vérifier que $\lim_{k \rightarrow \infty} e^{(k)} = 0 \Leftrightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\| = 0$.

Dans le problème considéré, la matrice $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ étudiée est symétrique et à diagonale dominante stricte soit :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, |a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|$$

Dans ce cas, il peut être démontré que les méthodes proposées dans la suite sont convergentes.

2.2. Méthode de Jacobi

La méthode de Jacobi consiste à décomposer la matrice A de la façon suivante $A = D - E - F$ où :

D est la matrice diagonale composée des coefficients diagonaux de A

E est la matrice triangulaire inférieure de coefficients $e_{ij} = -a_{ij}$ si $i > j$ et $e_{ij} = 0$ si $i \leq j$

F est la matrice triangulaire supérieure de coefficients $f_{ij} = -a_{ij}$ si $i < j$ et $f_{ij} = 0$ si $i \geq j$

Alors $Ax = b$ s'écrit $Dx = (E + F)x + b$, comme l'inversion de D est évidente (en supposant tous les termes diagonaux non nuls), il vient $x = D^{-1}(E + F)x + D^{-1}b$ c'est-à-dire $x = Bx + f$ avec $B = D^{-1}(E + F)$ et $f = D^{-1}b$, ce choix constitue une méthode d'itération consistante :

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f \text{ avec } B_J = D^{-1}(E + F) = I - D^{-1}A \text{ et } f = D^{-1}b.$$

$$\text{Soit } x^{(k+1)} = (I - D^{-1}A)x^{(k)} + D^{-1}b$$

La méthode s'écrit :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \quad x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right)$$

Une autre écriture possible fait apparaître $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$: le résidu de la $k^{\text{ème}}$ itération :

$$x^{(k+1)} = (I - D^{-1}A)x^{(k)} + D^{-1}b \quad \text{ou} \quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + D^{-1}r^{(k)}$$

La méthode converge si et seulement si le résidu tend vers zéro.

Démonstration de la convergence

Soit $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$, la solution du système linéaire, alors $Ax = b$ donne :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket \quad b_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j, \text{ donc } x_i^{(k+1)} - x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) - x_i \text{ se réécrit :}$$

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \quad x_i^{(k+1)} - x_i = -\frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} (x_j^{(k)} - x_j) \right)$$

$$\text{en passant la valeur absolue } |x_i^{(k+1)} - x_i| = \frac{1}{|a_{ii}|} \left| \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} (x_j^{(k)} - x_j) \right|$$

$$\text{puis l'inégalité triangulaire } |x_i^{(k+1)} - x_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| |x_j^{(k)} - x_j| \right)$$

$$\text{alors } \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \quad |x_i^{(k+1)} - x_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \right) \max_j |x_j^{(k)} - x_j|$$

$$\text{donc } \max_i |x_i^{(k+1)} - x_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \right) \max_j |x_j^{(k)} - x_j|, \text{ en reconnaissant la norme infini, il vient :}$$

$$\|x^{(k+1)} - x\|_{\infty} \leq \alpha \|x^{(k)} - x\|_{\infty} \quad \text{avec } \alpha = \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \right) < 1 \text{ par définition de la matrice } A.$$

Une récurrence immédiate donne $0 \leq \|x^{(k)} - x\|_{\infty} \leq \alpha^k \|x^{(0)} - x\|_{\infty} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$ (car $\alpha \in [0, 1[$)

finalement : $\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x\| = 0$

2.3. Méthode de Gauss Seidel

Dans cette méthode la matrice A est décomposée de façon identique à la précédente $A = D - E - F$ et $P = D - E$. P est la matrice triangulaire inférieure de coefficients $p_{ij} = -a_{ij}$ si $i \geq j$ et $p_{ij} = 0$ si $i < j$.

Alors $Ax = b$ s'écrit $Px = Fx + b$.

Ce choix correspond à une méthode d'itération consistante :

$$Px^{(k+1)} = Fx^{(k)} + b \text{ ou } x^{(k+1)} = B_{GS}x^{(k)} + f \text{ avec } B_{GS} = P^{-1}F \text{ et } f = P^{-1}b.$$

À partir des composantes :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, \sum_{j=1}^i a_{ij}x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \Leftrightarrow a_{ii}x_i^{(k+1)} + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}$$

c'est-à-dire (en supposant tous les termes diagonaux non nuls) :

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right)$$

Une autre écriture donne $x^{(k+1)} = x^{(k)} + P^{-1}r^{(k)}$ où $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$.