Résolution efficace d'EDP surfaciques et volumiques couplées en 3D. Application à l'effet Marangoni

Mahamar Dicko^{1,2}, Jocelyn Etienne², Pierre Saramito¹

¹ Laboratoire Jean Kuntzmann et ² Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, CNRS-Université de Grenoble-Alpes



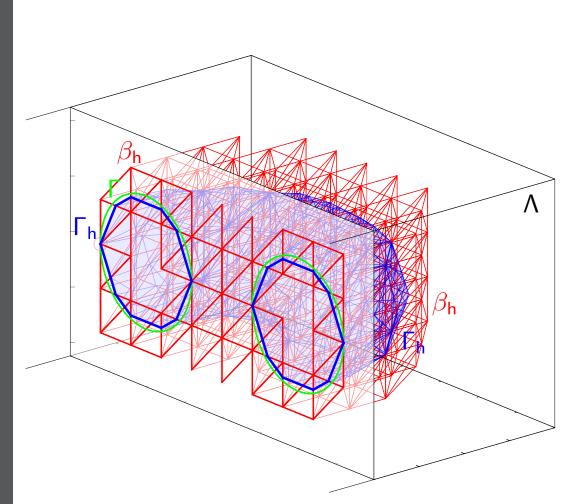


Méthode level-set sur une bande de maillage : problèmatique et discrétisation

Considérons un problème elliptique défini sur un domaine Λ de \mathbb{R}^3 , couplé avec un autre problème elliptique défini sur une surface $\Gamma = \{x \in \Lambda; \ \phi(x) = 0\}, \ \phi \in C^{\infty}(\Lambda)$ sans bord $(\partial \Gamma = \emptyset)$ contenue dans Λ . On suppose que ce problème couplé peut s'écrire sous forme variationnelle : (P) : Trouver $(u_{\Gamma}, u) \in H^1(\Gamma) \times H^1_0(\Lambda)$ tels que :

$$a_{\Gamma}(u_{\Gamma}, v_{\Gamma}) + b(v_{\Gamma}, u) = I_{\Gamma}(v_{\Gamma}) \qquad \forall v_{\Gamma} \in H^{1}(\Gamma)$$
$$b(u_{\Gamma}, v) + a(u, v) = I(v) \qquad \forall v \in H^{1}_{0}(\Lambda)$$

avec a_{Γ} , a deux formes bilinéaires continues et coercives, b une forme bilinéaire continue, I_{Γ} et I sont deux formes linéaires continues.



Soit un maillage régulier T_h de Λ , on définit

$$V_h = \left\{ v_h \in C^0(\Lambda), v_{h|T} \in P_1(T), \forall T \in T_h \right\}$$
$$\Gamma_h = \left\{ x \in \Lambda; \ \phi_h(x) = 0 \right\}$$

où ϕ_h est l'interpolée de Lagrange de ϕ dans V_h , et Γ_h représente une approximation de la surface Γ appelé **maillage intersecté**. On définit la **bande** de maillage β_h puis les espaces B_h et B_h^{Γ} par :

$$\beta_h = \bigcup_{\mathsf{T} \in \mathsf{T}_h} \{\mathsf{T}, \mathsf{T} \cap \mathsf{\Gamma}_h \neq \emptyset\}$$

Surface et bande de maillage associé (2D/3D)

$$B_h = \left\{ \mathbf{v}_h \in C^0(\beta_h), \mathbf{v}_{\mathsf{h}_{|\mathsf{T}}} \in \mathsf{P}_1(\mathsf{T}), \forall \mathsf{T} \in \beta_h \right\}$$

$$B_h^{\mathsf{\Gamma}} = \left\{ \mathbf{v}_h \in C^0(\Gamma_h); \ \exists \psi_{\mathsf{h}} \in \mathsf{B}_h, \mathbf{v}_h = \psi_{h|\Gamma_h} \right\}$$

 (P_h) : Trouver $(u_{\Gamma_h}, u_h) \in B_h^1 \times V_h$ tels que:

$$a_{\Gamma}\left(\mathsf{u}_{\Gamma_{h}},\mathsf{v}_{\Gamma_{h}}\right)+b\left(\mathsf{v}_{\Gamma_{h}},\mathsf{u}_{h}\right)=I_{\Gamma}\left(\mathsf{v}_{\Gamma_{h}}\right) \qquad \forall \mathsf{v}_{\Gamma_{h}}\in\mathsf{B}_{h}^{\Gamma} \\ b\left(\mathsf{u}_{\Gamma_{h}},\mathsf{v}_{h}\right)+a\left(\mathsf{u}_{h},\mathsf{v}_{h}\right)=I\left(\mathsf{v}_{h}\right) \qquad \forall \mathsf{v}_{h}\in\mathsf{V}_{h}$$

En utilisant des outils développés dans [1], on montre que (P_h) est bien posé.

Simulation de la convection-diffusion de surfactants : Modèle

Evolution de la concentration de surfactants

$$\frac{\partial C_{\Gamma}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\Gamma} C_{\Gamma} - D_{\Gamma} \Delta_{\Gamma} C_{\Gamma} = f + k(C - C_{\Gamma})$$
 sur Γ
$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C - D\Delta C = g$$
 dans $\Lambda \setminus \Gamma$

 $\Gamma = \Gamma(t) = \{(x, t) \in \Lambda \times [0, T] / \phi(x, t) = 0\}$, **u** est la vitesse à laquelle Γ se déplace dans Λ .

Conditions aux limites

$$\begin{cases} [C]_{\Gamma} = 0 \\ -D [\nabla C]_{\Gamma} \cdot n = k(C_{\Gamma} - C) \operatorname{sur} \Gamma, \\ C = 1 \operatorname{sur} (\partial \Lambda)_{D} \\ \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \operatorname{sur} (\partial \Lambda)_{N} \end{cases}$$

avec $[\cdot]_{\Gamma}$ est le saut d'une quantité à travers Γ .

▶ A chaque instant t fixé on résoud le problème : Trouver $(C_{\Gamma}, C) \in H^1(\Gamma) \times H^1_0(\Lambda)$ tels que :

$$a_{\Gamma}(C_{\Gamma}, v_{\Gamma}) + b(v_{\Gamma}, C) = I_{\Gamma}(v_{\Gamma})$$
 $\forall v_{\Gamma} \in H^{1}(\Gamma)$
 $b(C_{\Gamma}, v) + a(C, v) = I(v)$ $\forall v \in H^{1}(\Lambda)$

avec

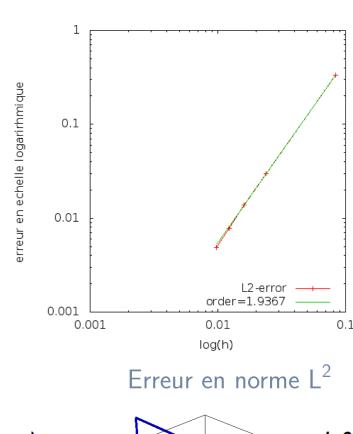
$$a_{\Gamma}(u_{\Gamma}, v_{\Gamma}) = (1 + k\Delta t) \int_{\Gamma} u_{\Gamma} v_{\Gamma} ds + D_{\Gamma} \Delta t \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} u_{\Gamma} \cdot \nabla_{\Gamma} v_{\Gamma} ds$$

$$b(u_{\Gamma}, v) = -k\Delta t \int_{\Gamma} u_{\Gamma} v ds, \quad I_{\Gamma}(v_{\Gamma}) = \int_{\Gamma} Fv_{\Gamma} ds, \quad I(v) = \int_{\Lambda} Gv dx$$

$$a(u, v) = \int_{\Lambda} uv dx + D\Delta t \int_{\Lambda} \nabla u \cdot \nabla v dx + k\Delta t \int_{\Gamma} uv ds$$

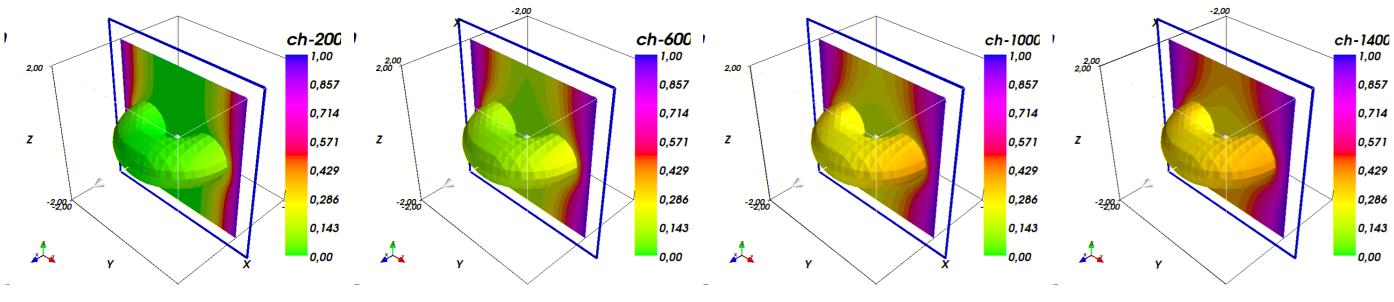
► Résolution par la **méthode level-set sur bande** de maillage.

Simulation de la convection-diffusion de surfactants : Résultats numériques



Nous avons validé le modèle (cas $\mathbf{u}=0$), sur un cas test analytique en 2D, on note que l'erreur entre la solution approchée et la solution exacte converge avec un ordre optimal en L^2 et H^1 .

Le modèle a été utilisé pour simuler la diffusion sur un tore (cas $\mathbf{u}=0$) de la concentration des surfactants en 3D. On observe ci-dessous l'évolution de la concentration sur le tore et le volume dans lequel il est contenu.



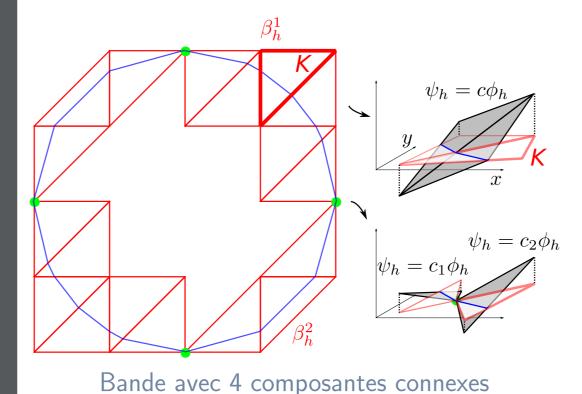
Données niumériques : k = 10, D = 1, $D_{\Gamma} = 2$.

Les conditions initiales sont une concentration nulle en volume et sur le tore, et une condition de Dirichlet non homogène latéralement. Les surfactants diffusent de ces frontières vers l'intérieur du volume. Là où ils rencontrent le tore, l'adsorption se produit, diminuant la concentration en volume. Les surfactants adsorbés se diffusent plus rapidement en surface, la concentration sur le tore s'uniformise donc rapidement.

Méthode level-set sur une bande de maillage : Résolution

Il y a un problème fondamental : on ne dispose pas d'une base explicite de B_h^Γ . Néanmoins, on peut construire une famille génératrice de cet espace formée des restrictions des fonctions de bases $(\varphi_i)_{1 \le i \le m}$ de B_h . Cette famille n'est pas libre, en effet :

$$\phi_{h|\Gamma_h} = \sum_{i=1}^m \phi_i \varphi_{i|\Gamma_h} = 0.$$



▶ **Lemme** : $dim(B_h^{\Gamma}) = dim(B_h) - N_c$ où N_c est le nombre de composantes connexes de la bande de maillage.

► **Preuve** : on considère l'application

$$R_h: \mathbf{u} \in \mathsf{B}_h \longrightarrow \mathsf{u}_{|\Gamma_h} \in \mathsf{B}_h^{\Gamma}.$$

Par construction cette application est linéaire et surjective donc $B_h^{\Gamma} = \operatorname{Im} R_h$.

Le théorème du rang s'applique sur R_h : $\dim(B_h) = \dim(B_h^{\Gamma}) + \dim(\ker R_h)$.

Il suffit de montrer que dim(ker R_h) = N_c .

Nous avons démontré dans [2] que le noyau de R_h est caractérisé par : $\ker R_h = Vect \left\{ \phi_{h|\beta_h^j} \right\}$. En effet, $\forall \psi_h \in \ker R_h, \forall \mathsf{K} \in \beta_h, \exists c_\mathsf{K} \in \mathbb{R}, \psi_{h|\mathsf{K}} = c_\mathsf{K} \phi_{h|\mathsf{K}}$ et par continuité de ψ_h sur β_h , $\forall \mathsf{K} \in \beta_h^j, c_\mathsf{K} = c_j, j = 1, \ldots, N_c$. Par suite $\psi_h = \sum_{i=1}^{N_c} c_j \phi_{h|\beta_h^j}$.

Comme dim (B_h^{Γ}) < dim (B_h) , la matrice associée au problème (P_h) est singulière.

► Méhode directe sous la contrainte : $\int_{\beta_h^j} \mathsf{u}_{\Gamma_h} \phi_h \, \mathsf{dx} = 0$ pour $j = 1, \ldots, N_c$

Trouver $(u_{\Gamma_h}, u_h, \lambda_\phi) \in B_h \times V_h \times \mathbb{R}^{N_c}$ tels que :

$$\begin{array}{lll} a_{\Gamma}\left(\mathsf{u}_{\Gamma_{h}},\mathsf{v}_{\Gamma_{h}}\right) + b\left(\mathsf{v}_{\Gamma_{h}},\mathsf{u}_{h}\right) + b_{\phi}(\mathsf{v}_{\Gamma_{h}},\lambda_{\phi}) = I_{\Gamma}\left(\mathsf{v}_{\Gamma_{h}}\right) & \forall \mathsf{v}_{\Gamma_{h}} \in \mathsf{B}_{h} \\ b\left(\mathsf{u}_{\Gamma_{h}},\mathsf{v}_{h}\right) + a\left(\mathsf{u}_{h},\mathsf{v}_{h}\right) & = I\left(\mathsf{v}_{h}\right) & \forall \mathsf{v}_{h} \in \mathsf{V}_{h} \\ b_{\phi}(\mathsf{u}_{\Gamma_{h}},\mu_{\phi}) & = 0 & \forall \mu_{\phi} \in \mathbb{R}^{N_{c}} \end{array}$$

$$b_{\phi}(\mathbf{u}_{\Gamma_{h}}, \lambda_{\phi}) = \sum_{j=1}^{N_{c}} \int_{\beta_{h}^{j}} \lambda_{\phi}^{j} \mathbf{u}_{\Gamma_{h}} \qquad \begin{pmatrix} A_{\Gamma} & D^{T} & \Phi^{T} \\ D & A & 0 \\ \Phi & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{\Gamma_{h}} \\ \mathbf{u}_{h} \\ \lambda_{\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{\Gamma_{h}} \\ I_{h} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Méthode level-set sur une bande de maillage : opérateurs de transfert

Il s'agit des opérateurs mathématiques qui nous permettent d'échanger des informations entre une surface et le volume dans lequel elle est contenue.

Opérateur de restriction

Il est défini par : R_h : $u_h \in B_h \longrightarrow u_{h|\Gamma_h} \in B_h^{\Gamma}$. Cet opérateur est construit en traitant un à un tous les éléments T de β_h : dans chanque élément $T \in \beta_h$, on obtient $u_{h|\Gamma_h}$ sur $K \in \Gamma_h$ en interpolant les valeurs de u_h aux sommets de K.

Opérateur de prolongement

Il est défini par une projection L^2 dans B_h

$$P_h: \mathbf{u}_{\Gamma_h} \in \mathbf{W}_h \longrightarrow \mathbf{u}_h = \arg\min_{\mathbf{v}_h \in \mathbf{B}_h} \left(\int_{\Gamma_h} (\mathbf{u}_{\Gamma_h} - \mathbf{v}_h)^2 \, \mathrm{d}\mathbf{s} \right) \in \mathbf{B}_h$$

où $W_h = \{v_h \in C^0(\Gamma_h), v_{h|K} \in P_1(K), \forall K \in \Gamma_h\}$, sous les contraintes

$$\int_{\beta_h^j} \mathsf{u}_h \phi_h = 0 \qquad \text{pour} \qquad j = 1, \dots, N_c$$

pour assurer l'unicité. On caractérise cet opérateur par la relation :

$$\begin{split} \int_{\Gamma_h} u_h v_h \, \mathrm{d} s &= \int_{\Gamma_h} u_{\Gamma_h} v_h \, \mathrm{d} s \\ \int_{\beta_L^j} u_h \phi_h \mathrm{d} x &= 0 \end{split} \qquad \qquad \text{pour } j = 1, \dots, N_c \end{split}$$

Ces deux dernières équations conduisent à un système linéaire à résoudre.

Conclusion et perspectives

Ce travail nous a permis d'élaborer une méthode numérique efficace et optimale pour résoudre des équations aux dérivées partielles faisant intervenir des équations écrites en surface en interaction avec des équations en volumes. En particulier, cette méthode numérique nous permet de faire une résolution en bloc du problème couplé.

Dans nos travaux en cours,

- > nous appliquons notre modèle de convection-diffusion couplé avec l'équation de Stokes (qui gouverne la vitesse) au problème d'écoulement de Marangoni. Cela constituera un très bon test de notre modèle avant son éventuelle utilisation dans le cadre d'un autre travail.
- nous abordons des EDPs plus complexes posées sur des surfaces : Stokes surfaciques, problèmes d'élasticité linéaires et non linéaires sur une surface, modèles fluides visco-élastiques etc ...

Références

[1] M. Olshanskii, A. Reusken, and J. Grande, A finite element method for elliptic equations on surfaces, SIAM Journal on Numerical Analysis, 47(5):3339-3358, 2009.
[2] M. Dicko, Méthodes numériques pour la résolution d'EDP sur des surfaces, Master's thesis, Université Joseph Fourier, Grenoble, 2011.

http://www-ljk.imag.fr Mahamar.Dicko@imag.fr