

Étude numérique de l'équation de Poisson

D'après CCP 2017 - épreuve de modélisation de systèmes physiques ou chimiques.

En électrostatique, l'équation de *Poisson-Boltzmann* exprime le potentiel électrique V associé à une distribution connue de charges ρ par la relation : $\Delta V + \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0$, où ϵ_0 est une constante (la permittivité diélectrique du milieu). Notre objectif est de donner plusieurs méthodes de résolution numérique de cette équation dans une portion de plan \mathcal{P} de côté L .

Question 1. On pose $X = \frac{x}{L}$ et $Y = \frac{y}{L}$. Montrer qu'on peut écrire l'équation sous la forme

$$\frac{\partial^2 V}{\partial X^2}(X, Y) + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2}(X, Y) + \rho'(X, Y) = 0$$

où $\rho'(X, Y)$ sera exprimé en fonction de ρ , L et ϵ_0 .

Afin de résoudre numériquement l'équation de Poisson, on utilise un maillage de \mathcal{P} de pas $h = \frac{1}{N}$, et on va transformer les dérivées partielles par des différences entre les valeurs de V aux différents points du maillage (on parle aussi des *nœuds* du maillage). La figure 1 représente la maillage de \mathcal{P} pour $N = 5$.

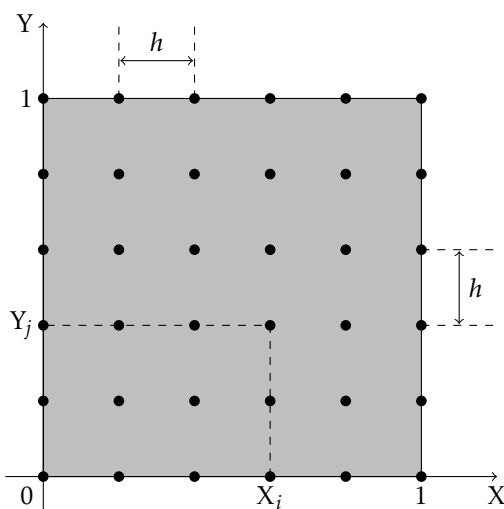


FIGURE 1 – Le maillage de \mathcal{P} pour $N = 5$.

Question 2. En faisant un développement limité à l'ordre 2 autour du point de coordonnées (X_i, Y_j) , montrer qu'on peut exprimer la valeur de $\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2}$ en ce point sous la forme suivante :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} = \frac{V(X_i + h, Y_j) + V(X_i - h, Y_j) + V(X_i, Y_j + h) + V(X_i, Y_j - h) - 4V(X_i, Y_j)}{h^2} + O(h).$$

Question 3. Comme $X_i = ih$ et $Y_j = jh$, on note désormais $V(i, j)$ le potentiel $V(X_i, Y_j)$ en un point (X_i, Y_j) du maillage. Montrer alors qu'on peut écrire l'équation de Poisson sous la forme suivante :

$$V(i+1, j) + V(i-1, j) + V(i, j+1) + V(i, j-1) - 4V(i, j) + \rho''(i, j) = 0 \quad (1)$$

$\rho''(i, j)$ étant une fonction à définir en fonction de ρ , L , ϵ_0 et h .

La fonction $\rho''(i, j)$ étant connue, on montre en mathématiques que la solution de l'équation de Poisson est unique si on fixe les conditions aux limites sur la frontière \mathcal{F} du domaine \mathcal{P} . Ces conditions sont essentiellement de deux types :

- on impose le potentiel en tout point de \mathcal{F} (conditions de Dirichlet);
- on impose une condition sur les dérivées partielles de V en tout point de \mathcal{F} (conditions de Neumann).

Dans ce problème, on ne va considérer que des conditions de Dirichlet.

La frontière \mathcal{F} contient naturellement les points du bord de \mathcal{P} (donc appartenant aux quatre côtés du carré), mais elle peut aussi contenir certains points à l'intérieur de \mathcal{P} où le potentiel est fixé en raison de la présence d'électrodes.

L'ensemble des points de coordonnées (i, j) est donc composé de deux sous-ensembles :

- ceux dont le potentiel est connu, appartenant à la frontière \mathcal{F} ;
- ceux dont le potentiel est inconnu, appartenant à \mathcal{P} mais pas à \mathcal{F} (donc dans $\mathcal{P} \setminus \mathcal{F}$).

Méthode de Jacobi

À partir de l'équation (1) on peut exprimer :

$$V(i, j) = \frac{1}{4} (V(i+1, j) + V(i-1, j) + V(i, j+1) + V(i, j-1) + \rho''(i, j)). \quad (2)$$

La résolution s'effectue alors en deux étapes.

- Initialisation
 - on fixe le potentiel des points de \mathcal{F} à la valeur imposée physiquement (bords et électrodes);
 - on donne aux points de potentiel inconnu, donc appartenant à $\mathcal{P} \setminus \mathcal{F}$, une valeur arbitraire $V_0(i, j)$, en général nulle.

- Itérations

On calcule une nouvelle valeur $V_1(i, j)$ des potentiels en appliquant l'équation (2) pour tous les points de $\mathcal{P} \setminus \mathcal{F}$, tandis que $V_1(i, j) = V_0(i, j)$ pour les points de \mathcal{F} .

Le processus est répété jusqu'à obtenir des valeurs du potentiel quasiment stables. En notant k le nombre d'itérations, on a donc pour le point de coordonnées (i, j) n'appartenant pas à la frontière :

$$V_{k+1}(i, j) = \frac{1}{4} (V_k(i+1, j) + V_k(i-1, j) + V_k(i, j+1) + V_k(i, j-1) + \rho''(i, j)). \quad (3)$$

La convergence de la méthode est vérifiée à l'aide du critère de convergence e_k , défini par :

$$e_k = \sqrt{\frac{1}{N^2} \sum_{i,j} (V_{k+1}(i, j) - V_k(i, j))^2} \quad (4)$$

Le calcul sera stoppé au bout de k itérations, quand e_k deviendra inférieur à un seuil de convergence ϵ fixé arbitrairement.

Mise en œuvre informatique

On utilise la bibliothèque Numpy permettant une utilisation simple des tableaux de flottants à deux dimensions. Le chargement des bibliothèques classiques est assuré par les lignes suivantes :

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

On supposera que les tableaux Numpy suivants, utilisés comme arguments dans les fonctions à définir dans les questions qui suivent, ont pour signification :

- $V[i, j]$ pour $(i, j) \in \llbracket 0, N \rrbracket^2$ est le tableau courant du potentiel en un point de \mathcal{P} ;
- $\text{rhos}[i, j]$ pour $(i, j) \in \llbracket 0, N \rrbracket^2$ est le tableau contenant la densité de charge ρ'' en un point de \mathcal{P} ;
- $\text{frontiere}[i, j]$ pour $(i, j) \in \llbracket 0, N \rrbracket^2$ est un tableau de booléens indiquant si le point de coordonnées (i, j) appartient ou non à \mathcal{F} . En particulier, tous les points du bord du domaine seront tels que $\text{frontiere}[i, j] == \text{True}$.

Question 4. Écrire la fonction `nouveau_potentiel(V, rhos, frontiere, i, j)` renvoyant la nouvelle valeur du potentiel au point $(i, j) \in \llbracket 0, N \rrbracket^2$ selon l'équation (3).

Question 5. Montrer que pour modifier toutes les valeurs contenues dans $V[i, j]$ pendant une itération, il est nécessaire de disposer d'une copie de ce tableau.

Question 6. Écrire la fonction `itere_J(V, rhos, frontiere)` modifiant la totalité du tableau V lors d'une seule itération et renvoyant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

Question 7. Écrire la fonction `poisson(f_iter, V, rhos, frontiere, eps)` ayant pour premier argument une fonction du même type que celle définie à la question précédente, pour dernier argument eps le seuil arbitraire de convergence ϵ et dont le rôle est de modifier le tableau des potentiels V jusqu'à convergence.

Méthode de Gauss-Seidel

C'est une modification de la méthode de Jacobi, pour laquelle on montre que la convergence est légèrement plus rapide. Supposons que l'on balaye le tableau des potentiels selon les indices i et j croissants : dans ces conditions, les points situés à gauche et en dessous du point courant ont déjà été calculés. On va utiliser ces nouvelles valeurs, probablement plus proches de la solution, dans la formule permettant le calcul de $V_{k+1}(i, j)$. Ceci donne l'algorithme de Gauss-Seidel :

$$V_{k+1}(i, j) = \frac{1}{4} (V_k(i+1, j) + V_{k+1}(i-1, j) + V_k(i, j+1) + V_{k+1}(i, j-1) + \rho''(i, j)) \quad (5)$$

Question 8. Montrer qu'il n'est plus nécessaire de copier le tableau V pour la mise à jour lors d'une itération en utilisant l'équation (5). Faut-il modifier la fonction `nouveau_potentiel` pour passer de la méthode de Jacobi à celle de Gauss-Seidel ?

Question 9. Écrire la fonction `itere_GS(V, rhos, frontiere)` modifiant la totalité du tableau V lors d'une seule itération et retournant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

Méthode de Gauss-Seidel adaptative

Les méthodes de Jacobi et de Gauss-Seidel n'utilisent pas la valeur de $V_k(i, j)$ pour calculer $V_{k+1}(i, j)$. La méthode de sur-relaxation (*Successive Over Relaxation method*) consiste à calculer la nouvelle valeur d'un nœud comme une combinaison linéaire de la valeur courante et de celle donnée par le schéma de Gauss-Seidel. En introduisant le paramètre de relaxation ω , on a alors :

$$V_{k+1}(i, j) = (1 - \omega)V_k(i, j) + \frac{\omega}{4} (V_k(i+1, j) + V_{k+1}(i-1, j) + V_k(i, j+1) + V_{k+1}(i, j-1) + \rho''(i, j)) \quad (6)$$

L'étude mathématique de cette relation permet de montrer les résultats suivants :

- la méthode converge uniquement si $0 < \omega < 2$ et elle converge plus rapidement que la méthode de Gauss-Seidel si $1 < \omega < 2$;
- il existe une valeur optimale de ω qui permet la convergence avec un nombre d'itérations en $O(N)$ pour une valeur de ϵ fixée.

Pour la résolution de l'équation de Poisson envisagée dans ce problème (conditions de Dirichlet sur un maillage carré), on montre que la valeur optimale ω_{opt} est :

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \pi/N} \quad (7)$$

Question 10. Écrire la fonction `nouveau_potentiel_SOR(V, rhos, frontiere, i, j, omega)` renvoyant la nouvelle valeur du potentiel au point (i, j) selon l'équation (6).

Question 11. Écrire la fonction `itere_SOR(V, rhos, frontiere)` optimale modifiant la totalité du tableau V lors d'une seule itération et retournant l'erreur calculée conformément à l'équation (4).

Question 12. La résolution du problème peut alors se faire par un appel de la forme

$$\text{poisson}(\text{itere_SOR}, V, \text{rhos}, \text{frontiere}, \text{eps})$$

les tableaux carrés V , rhos , frontiere étant de dimensions convenables pour représenter un maillage comportant $(N+1)^2$ nœuds.

Quelle est la complexité temporelle de cet appel lorsque $\omega = \omega_{opt}$?

Étude d'un cas pratique

On considère dans le vide un fil cylindrique infini d'axe z et de rayon R , portant une charge volumique constante ρ .

Question 13.

a) En se plaçant en coordonnées cylindriques d'axe z , montrer par des considérations de symétrie et d'invariance que le champ $\vec{E} = E(r)\vec{u}_r$. En déduire la forme des surfaces équipotentielles.

b) En appliquant le théorème de Gauss, calculer le champ \vec{E} dans tout l'espace. Tracer rapidement l'allure de $E(r)$ en fonction de r .

c) On donne : $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$, $\rho = 1,00 \times 10^{-5} \text{ C} \cdot \text{m}^{-3}$, $R = 5,00 \text{ cm}$. Calculer la valeur maximale de la norme du champ électrique.

Pour pouvoir utiliser la méthode de Gauss-Seidel adaptative, on place le fil infini au centre d'une enceinte de longueur infinie et de section carrée ($L \times L$), portée au potentiel nul (figure 2). Dans la suite, on prendra $L = 4R = 20,0 \text{ cm}$.

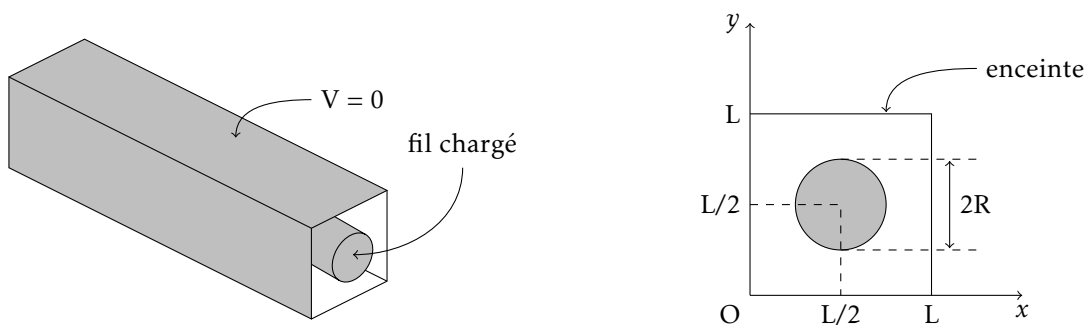


FIGURE 2 – Fil infini dans une enceinte de section carrée, portée au potentiel nul.

Le script permettant la résolution de ce problème commence ainsi :

```
eps0 = 8.85e-12      # epsilon_0
L = 20.0e-2         # 20 cm
N = 100 ; h = L / N # définition du maillage
rho = 1.00e-5       # densité volumique de charge rho

rhos = np.zeros((N+1, N+1)) # tableau des valeurs de rho''
V = np.zeros((N+1, N+1))    # valeur du potentiel
frontiere = np.zeros((N+1, N+1), bool) # tableau définissant la frontière
```

Question 14. Écrire une fonction dans_cylindre(x, y, x_c, y_c, R) qui renvoie une valeur booléenne indiquant si le point de coordonnées (x, y) est à l'intérieur ou sur le bord du cercle de centre (x_c, y_c) et de rayon R .

Question 15. Rédiger un script qui remplit les tableaux `rhos` et `frontiere`.

Question 16. Appliquer alors la méthode de Gauss-Seidel adaptative en utilisant un seuil de convergence $\epsilon = 10^{-5}$ pour remplir le tableau `V`.

Représentations graphiques

Pour visualiser les équipotentielles du tableau `V`, exécuter le code suivant.

```
plt.imshow(V, cmap='prism')
plt.show()
```

Question 17. Tracer sur un nouveau graphe le potentiel V du champ le long de l'axe de symétrie défini par $y = L/2$.

Question 18. Connaissant le potentiel $V[i, j]$, comment pourrait-on calculer numériquement les composantes E_x et E_y du champ électrique au niveau des nœuds du maillage?

Tracer sur un nouveau graphe la composante E_x du champ le long de l'axe de symétrie défini par $y = L/2$.

Question 19. Une autre résolution numérique est effectuée, avec une répartition de charges dans le cylindre différente de la précédente, utilisant la même valeur de la densité volumique $\rho = 10^{-5} \text{ C} \cdot \text{m}^{-3}$. Elle mène à la courbe de la figure 3.

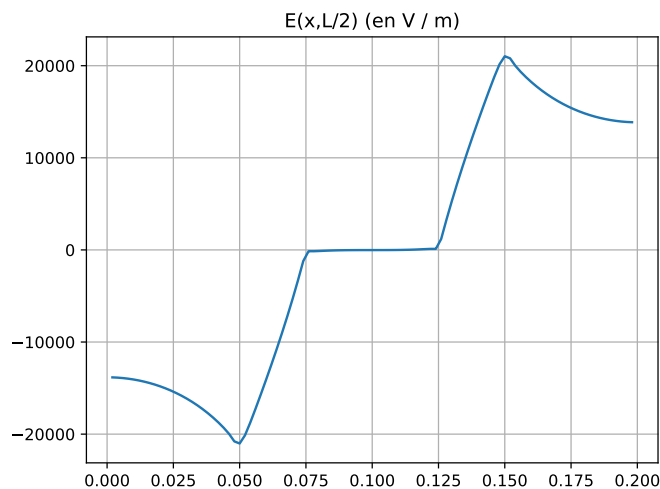


FIGURE 3 – Représentation graphique de $E_x(x, L/2)$ pour une nouvelle répartition de charge.

Déduire de cette courbe la nouvelle répartition de charge dans le cylindre, puis tracer la représentation colorée des équipotentielles, ainsi que les graphes des fonctions $x \mapsto V(x, L/2)$ et $x \mapsto E_x(x, L/2)$.