

Département Informatique et Mathématiques Appliquées



Année Universitaire 2010-2011

rapport de stage

Stage du 18 avril au 16 septembre 2011

Méthodes mathématiques pour la résolution d'edp sur des surfaces

Présenté par

M. Mahamar DICKO

M2P IMSN

Parcours Mathématiques et Informatique



LABORATOIRE
JEAN KUNTZMANN
MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES - INFORMATIQUE

Responsables de stage

M. Jocelyn ETIENNE (LIPhy)

M. Pierre SARAMITO (LJK)

Enseignants responsables

M. Eric BLAYO

M. Christophe PRUD'HOMME

Remerciements

Je tiens à remercier dans un premier temps, toute l'équipe pédagogique de l'UFR IMAG et les intervenants professionnels responsables de la formation M2P IMSN (Ingénierie de la Modélisation et de la Simulation Numérique), pour avoir assuré la partie théorique de celle-ci, particulièrement M. Eric BLAYO et M. Christophe PRUD'HOMME.

Je remercie également M. Jocelyn ETIENNE et M. Pierre SARAMITO pour l'aide et les conseils concernant les missions évoquées dans ce rapport, qu'ils m'ont apporté lors des différents suivis tout au long de ce stage.

Je tiens à les remercier tout particulièrement pour la confiance qu'ils m'ont témoigné en m'acceptant comme stagiaire et aussi pour leur soutien.

Je tiens aussi à remercier et à témoigner toute ma reconnaissance à toute personne qui de près ou de loin m'apporté son aide, son soutien pour le bon déroulement de ce stage : parents, amis, collègues de travail ...

Table des matières

1	Introduction et Présentation du stage	5
1.1	Introduction	6
1.2	Présentation du stage	7
1.2.1	Présentation du laboratoire LIPhy	7
1.2.2	Objectifs du stage	7
2	Méthode level-set avec résolution sur une bande de maillage	9
2.1	Méthode de discrétisation	10
2.2	Implémentation de la méthode level-set	13
2.3	Opérateurs de prolongement et de restriction	15
2.3.1	Opérateur de restriction	15
2.3.2	Opérateur de prolongement	16
3	Validation de la méthode level-set	17
3.1	Formulation sur un maillage surfacique régulier	19
3.1.1	Discrétisation éléments finis	19
3.1.2	Résultats numériques	19
3.2	Formulation sur un maillage surfacique induit par level-set	20
3.3	Formulation basée sur la méthode level-set sur une bande	21
3.3.1	Discrétisation éléments finis	21
3.3.2	Résultats numériques	22
3.4	Comparaison des trois méthodes	23
4	Modélisation de la convection-diffusion de surfactants	26
4.1	Discrétisations en temps et formulations variationnelles	28
4.2	Discrétisation éléments finis du problème	29
4.3	Résolution du système	31
4.4	Tests numériques	32
4.4.1	Diffusion de concentrations de surfactants en 2D	32
4.4.2	Diffusion de concentrations de surfactants en 3D	34
5	équation de Stokes sur une surface	36
5.1	Formulation du problème sous forme d'énergie	37
5.2	Formulation variationnelle	37
5.3	Discrétisation éléments finis du problème	38
5.4	Conclusion	40
5.5	Perspectives	40

5.6	Planning	41
6	Annexes	42
6.1	Principe de la détermination de la concentration $C_{\Gamma_h}^n$ sur B_h^{n+1}	43
6.2	Détermination de la vitesse : équation de Stokes	44
6.3	Calcul de la forme bilinéaire r	45

Liste des symboles

- Λ : pavé de \mathbb{R}^p , $p = 2, 3$
- T_h : maillage régulier de Λ
- V_h : espace des fonctions continues et affines par morceaux sur T_h
- ϕ : fonction de niveau définie sur Λ
- ϕ_h : interpolé de Lagrange de ϕ dans V_h
- Γ : surface définie par le zéro de la fonction ϕ
- Γ_h : approximation polygonale de Γ
- β_h : bande de maillage
- B_h : espace des fonctions continues et affines par morceaux sur β_h
- B_h^Γ : espace des restrictions à Γ_h des fonctions de B_h
- W_h : espace des fonctions continues et affines par morceaux sur Γ_h
- C_Γ : concentration sur la surface Γ
- C : concentration dans le reste du volume $\Lambda \setminus \Gamma$
- D_Γ : diffusivité en surface
- D_Λ : diffusivité en volume
- $[\cdot]_\Gamma$: saut d'une quantité à travers Γ
- D est le tenseur des contraintes visqueuses en volume
- D_s est le tenseur des contraintes visqueuses sur Γ qui correspond à la projection de D sur Γ

Chapitre 1

Introduction et Présentation du stage

Contents

1.1	Introduction	6
1.2	Présentation du stage	7
1.2.1	Présentation du laboratoire LIPhy	7
1.2.2	Objectifs du stage	7

1.1 Introduction

Dans nombreux phénomènes physiques, des écoulements se produisent sur des surfaces. Ces surfaces peuvent être l'interface entre deux phases (liquide et gaz par exemple), être des films (film liquide des bulles de savon) ou des membranes fluides (comme la membrane des cellules et en particulier, des globules rouges).

La présence d'additifs, dits surfactants, modifie les propriétés de tension de l'inter-

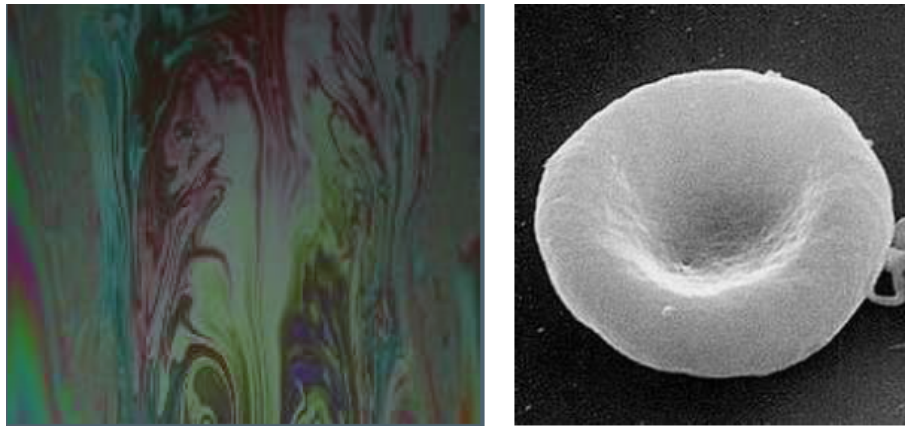


FIGURE 1.1 – Écoulement de surface : à gauche, turbulence sur un film de savon ; à droite, membrane fluide d'un globule rouge.

face entre eau et air. C'est par exemple le cas des liquides vaisselle qui facilitent la formation de bulles en abaissant la tension interfaciale. Lorsque la concentration de ces additifs n'est pas uniforme, ils se diffusent sur la surface et nous étudions alors les équations de convection-diffusion surfacique. Ce gradient de tension interfaciale provoque un mouvement spontané des fluides adjacents : c'est l'effet Marangoni, qui permet par exemple à l'extrémité duquel on a déposé une goutte de surfactants, d'avancer tout seul.

Notre objectif ici est d'aborder les modèles de fluides écrits sur des surfaces et d'étudier la possibilité de les résoudre numériquement de façon efficace.

Les applications à terme concernent, d'une part, l'étude de l'influence des surfactants sur la rupture des jets en gouttelettes ; et d'autre part, la modélisation des membranes des cellules biologiques.

Dans cette optique, on utilisera la méthode de lignes de niveau (surfaces de niveau en $3D$) connue sous le nom "*level-set method*", particulièrement l'approche récente [4], qui consiste à calculer ce sous-ensemble du maillage en volume du milieu environnant ayant une intersection avec la ligne de niveau zéro, afin d'effectuer les calculs sur ce maillage induit.

Des études numériques ont montrées que cette méthode a un ordre optimal de convergence pour les normes L^2 et H^1 (voir [1]).

Cette méthode est particulièrement attractive quand on est en présence de problèmes couplés entre équations surfaciques et équations en volume. C'est le cas des systèmes où les réactions biochimiques (molécules d'adhésion par exemple) et des équilibres des forces mécaniques ont lieu à la fois dans la cellule et dans le milieu extérieur,

mais aussi sur la membrane de la cellule. Ce qui nous amène à faire un couplage entre les équations écrites "en volume" et équations en "surface", un type de problème que nous allons aborder dans le cadre de ce stage.

Dans une première partie nous présentons l'aspect mathématique cette nouvelle variante de la méthode "*level-set*", ensuite dans une deuxième partie nous étudions trois méthodes de résolution des équations définies sur des surfaces dont la méthode "level-set" et les comparons sur un exemple en 3D, dans une troisième partie nous présentons les aspects physiques, mathématiques et informatiques des équations de convection-diffusion couplées ainsi que les résultats numériques obtenus, et enfin dans une quatrième partie nous présentons quelques résultats d'applications.

1.2 Présentation du stage

1.2.1 Présentation du laboratoire LIPhy

Créé en 1966 sous le nom **LSP** (Laboratoire de Spectrométrie Physique) issu de l'ancien "Laboratoire de Physique Générale" de la faculté des Sciences de Grenoble, **LIPhy** (Laboratoire Interdisciplinaire de Physique) est une unité de recherche placée sous la tutelle de l'université Joseph Fourier et le Centre National de Recherche Scientifique (**CNRS**).

Les membres (chercheurs) de LIPhy travaillent dans plusieurs disciplines parmi lesquelles : la physique de la matière condensée, la physique des milieux dilués et de leurs interactions avec le rayonnement de l'autre, ainsi que des chercheurs d'autres disciplines (biologie, chimie, mathématiques appliquées et mécanique).

1.2.2 Objectifs du stage

L'objectif principal de ce stage est d'élaborer des outils numériques efficaces pour des équations écrites sur des surfaces en interaction avec des équations en volumes en utilisant la méthode level-set. Ce travail est divisé en trois grandes parties :

- **Étude et validation de la méthode level-set**

Cette phase consiste essentiellement d'étudier la méthode level-set avec résolution sur bande de maillage et vérifier numériquement les théorèmes mathématiques correspondants.

En particulier, nous caractérisons plus finement que [1] l'espace d'élément fini utilisé par la résolution. Cela nous permet d'implémenter une méthode de résolution directe, de coût typique $O(N \log N)$ à comparer aux méthodes itératives de coût typique $O(N^\alpha)$, $1 < \alpha < 2$ pour une surface 2D.

- **Construction des opérateurs de prolongement et de restriction des champs éléments finis de surface vers ceux en volume et inversement**

Cette étape est cruciale tout au long du stage puisqu'à chaque fois on est amené à échanger des informations entre la bande et le maillage intersecté.

- **Modélisation de la convection-diffusion de surfactants**

Dans le cadre du stage, nous allons considérer un ouvert $\Lambda \subset \mathbb{R}^p$, $p = 2$ ou 3 et une surface Γ connexe, compacte et de classe C^2 sans bord ($\partial\Gamma = \emptyset$) contenue dans Λ représentant par exemple l'interface entre deux fluides. On suppose que la surface Γ se déplace à une vitesse u et change de forme au cours du temps ($\Gamma = \Gamma(t)$) et on la définit implicitement par le zéro d'une fonction level set ϕ . Nous nous intéressons à la concentration des surfactants sur la surface Γ et le volume environnant Λ dans le cas où celle-ci n'est pas uniforme, nous étudions alors les équations de convection-diffusion surfaciques associées à ce phénomène, couplé avec un problème d'écoulement de Stokes sur le volume considéré qui gouverne la vitesse.

- **Application de cette modélisation en mécanique des fluides**

Initialement, nous avions prévu d'appliquer notre modèle de convection-diffusion validé couplé avec les équations de Stokes au problème d'écoulement de Marangoni. Comme nous rencontrons des problèmes en faisant bouger l'interface avec la méthode des caractéristiques, nous avons décidé de résoudre l'équation de Stokes sur une surface en attendant de résoudre ces problèmes.

Chapitre 2

Méthode level-set avec résolution sur une bande de maillage

Contents

2.1	Méthode de discrétisation	10
2.2	Implémentation de la méthode level-set	13
2.3	Opérateurs de prolongement et de restriction	15
2.3.1	Opérateur de restriction	15
2.3.2	Opérateur de prolongement	16

Le but de chapitre est décrire une nouvelle méthode de discrétisation (dans le cadre de la méthode level-set) des équations elliptiques définies sur les surfaces. L'idée générale est d'utiliser de nouveaux espaces d'éléments qui sont induits par intersection de l'isosurface d'une fonction et d'un maillage volumique, voir [4].

Cette méthode est adaptée pour les problèmes où sont combinées des EDP écrites sur une surface et sur un volume environnant. On développe une méthode d'éléments finis sur la surface et on réalise des expériences numériques dans le chapitre suivant qui permettent de valider la méthode.

En général, la méthode level-set est convenable pour la discrétisation des équations aux dérivées partielles définies sur une isosurface qui change de topologie au cours du temps ($\Gamma = \Gamma(t)$), mais nous traiterons en particulier dans ce chapitre le cas où l'isosurface reste fixe au cours du temps.

2.1 Méthode de discrétisation

Considérons un ouvert $\Lambda \subset \mathbb{R}^p$, $p = 2$ ou 3 et une surface Γ définie implicitement par une fonction level-set ϕ :

$$\Gamma = \{x \in \Lambda; \phi(x) = 0\}$$

sans bord ($\partial\Gamma = \emptyset$) contenue dans Λ (voir figure (2.1)) dans le cas d'un cercle contenu dans un carré). On veut résoudre sur cette surface une équation elliptique

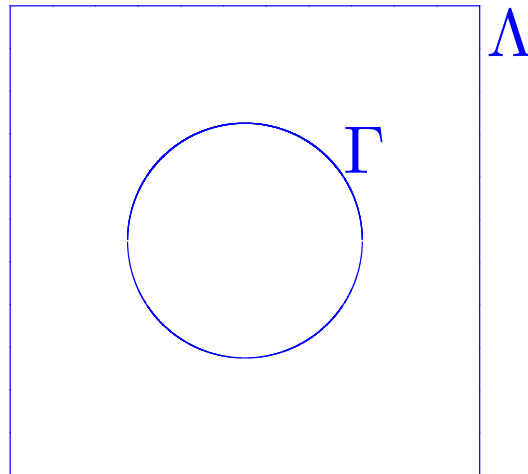


FIGURE 2.1 – Géométrie

de la forme :

$$Lu = f \quad \text{sur} \quad \Gamma, \quad f \in L^2(\Gamma) \quad (2.1)$$

où L est un opérateur aux dérivées partielles.

La forme faible de l'équation (2.1) est :

Trouver $u \in H^1(\Gamma)$ tel que :

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Gamma) \quad (2.2)$$

On suppose que la solution u existe et est unique au sens du théorème de Lax-Milgram. Soit T_h le maillage défini sur Λ sur lequel on définit l'espace des éléments finis

$$V_h = \left\{ v_h \in C^0(\Lambda), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in T_h \right\}.$$

On suppose que ce maillage est régulier, consistant et stable, on introduit la surface Γ_h l'approximation polygonale de Γ , définie par :

$$\Gamma_h = \{x \in \Lambda; \phi_h(x) = 0\}$$

où ϕ_h est une approximation continue linéaire par morceaux de ϕ sur T_h .

Il est important de noter que si $\|\phi - \phi_h\| \leq ch^2$ alors l'approximation Γ_h est fermée

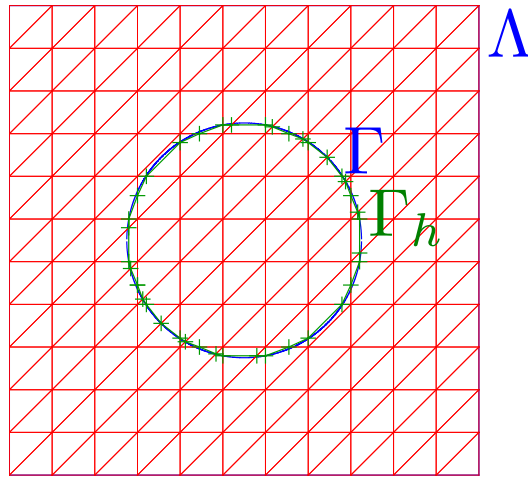


FIGURE 2.2 – Surface polygonale Γ_h

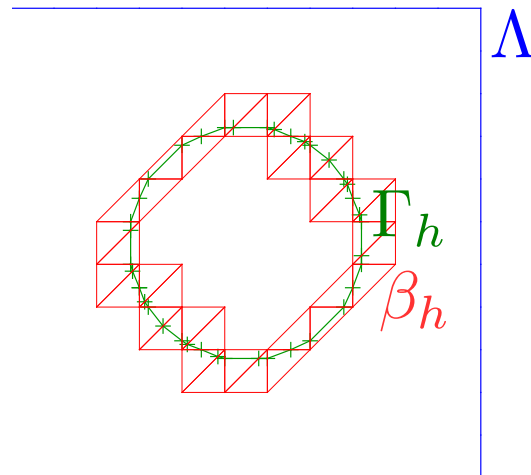
sur Γ au sens suivant :

$$\begin{cases} \text{dist}(\Gamma_h, \Gamma) \leq c_0 h^2 \\ \sup_{x \in \Gamma_h} \|n(x) - n_h(x)\| \leq c_0 h \end{cases} \quad (2.3)$$

où n est l'extension de la normale à la surface Γ sur un voisinage de Γ et n_h la normale sur Γ_h (voir [4]).

Cette approximation Γ_h constitue un maillage de Γ appelé "**maillage intersecté**" dont les nœuds correspondent aux sommets des éléments formés par intersection comme on peut le voir sur la figure (2.2) dans le cas d'un cercle, à partir de laquelle, on construit une bande notée β_h constituée de tous les éléments du maillage T_h qui intersectent Γ_h (voir figure (2.3)) :

$$\beta_h = \bigcup_{K \in T_h} \{K, K \cap \Gamma_h \neq \emptyset\}$$

FIGURE 2.3 – La bande β_h ainsi que le maillage intersecté de Γ_h

Nous introduisons donc l'espace des éléments finis B_h défini par :

$$B_h = \left\{ v_h \in C^0(\beta_h), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \beta_h \right\}.$$

Cet espace induit l'espace suivant sur Γ_h :

$$B_h^\Gamma = \left\{ v_h \in H^1(\Gamma_h) / \exists \psi_h \in B_h : v_h = \psi_h|_{\Gamma_h} \right\}$$

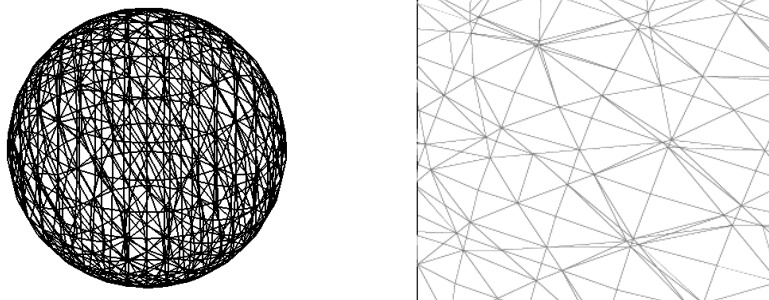
Cet espace est utilisé pour la discrétisation Galerkin de la formulation (2.2) :

Trouver $u_h \in B_h^\Gamma$ tel que :

$$a(u_h, v_h) = l(v_h) \quad \forall v_h \in B_h^\Gamma \quad (2.4)$$

Remarque

On voit que Γ_h contient un nombre important des triangles détériorés à angles très petits (voir figure (2.4)). De ce fait, si l'on discrétise (2.2) dans un espace $W_h = \left\{ v_h \in C^0(\Gamma_h), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1(K), K \in \Gamma_h \right\}$, on ne peut pas prouver de convergence selon h .

FIGURE 2.4 – Maillage induit Γ_h dans le cas d'une sphère et un extrait

En revanche, comme l'on démontre dans l'article [4] les erreurs de discrétisation dans B_h^Γ sont bornées, si les éléments de T_h sont régulières en forme même si les éléments de Γ_h ne sont pas réguliers.

2.2 Implémentation de la méthode level-set

Contrairement à l'espace W_h défini au dessus, on peut montrer que le problème (2.4) dans B_h^Γ a une bonne propriété mais il y a un problème fondamental :

on n'a pas de base de B_h^Γ .

On résout ce problème en utilisant une base de l'espace défini sur la bande B_h : soit $(x_i)_{1 \leq i \leq m}$ l'ensemble des sommets de tous les éléments K dans β_h et α_i la base nodale linéaire relative à x_i , on a :

$$\alpha_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Il est clair que B_h^Γ est engendré par l'ensemble des restrictions des α_i sur Γ_h qui ne sont pas linéairement indépendantes puisque qu'on a : $\phi_h|_{\Gamma_h} = \sum_{i=1}^m \phi_i \alpha_i|_{\Gamma_h} = 0$.

- **Lemme**

$\dim(B_h^\Gamma) = \dim(B_h) - N_c$ où N_c est le nombre de composantes connexes.

- **Preuve**

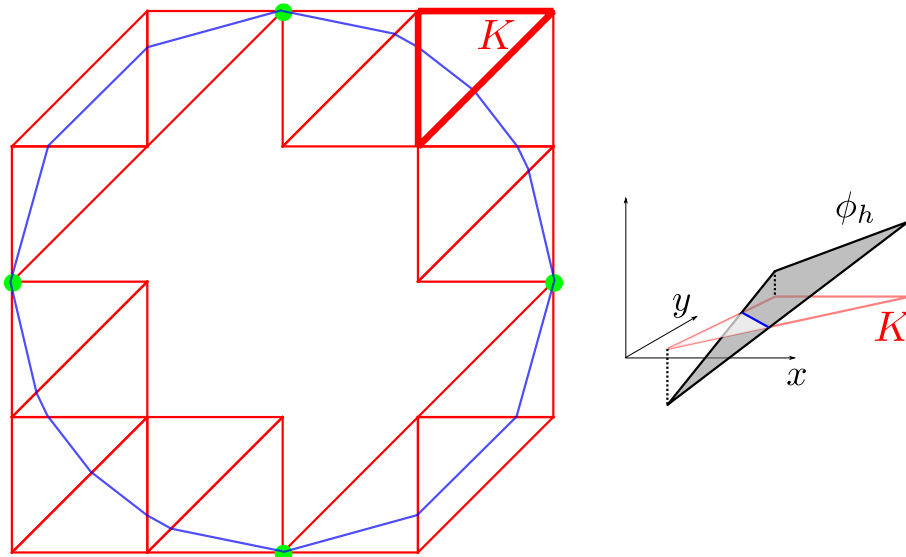


FIGURE 2.5 – Exemple de bande avec 4 composantes connexes

Soit R_h l'application définie par : $R_h : u \in B_h \longrightarrow u|_{\Gamma_h} \in B_h^\Gamma$.
Par définition de B_h^Γ , R_h est une application linéaire surjective, donc $\text{Im} R_h = B_h^\Gamma$.

Par conséquent, on a : $\dim(B_h) = \dim(B_h^\Gamma) + \dim(\ker R_h)$, d'après le **théorème du rang**. Donc pour démontrer le lemme, il suffit de montrer que $\dim(\ker R_h) = N_c$.

Soit $\psi_h \in \ker R_h$, par définition de $\ker R_h$, on a : $\psi_{h|_{\Gamma_h}} = 0$. Cela signifie que pour tout triangle $K \in \beta_h$, $\psi_{h|_K} = \phi_{h|_K} = 0$ sur le segment $\Gamma_h \cap K$, donc les deux fonctions sont nécessairement proportionnelles : $\exists c_K \in \mathbb{R}, \psi_{h|_K} = c_K \phi_{h|_K}$, (voir figure (2.5)).

Notons par : $\beta_h^j, j = 1, \dots, N_c$ les composantes connexes de β_h . Par continuité de ψ_h sur β_h , il est clair que pour toute composante connexe β_h^j de β_h , $c_K = c_j$ pour tout $K \in \beta_h^j$, ces constantes c_j peuvent être distinctes d'une composante connexe à l'autre.

On a donc, $\psi_h = \sum_{j=1}^{N_c} c_j \phi_h^j$, où ϕ_h^j est la restriction de ϕ_h sur β_h^j . Donc la famille

$(\phi_h^j)_{1 \leq j \leq N_c}$ forme un système générateur de $\ker R_h$, et libre car les composantes connexes sont deux à deux disjointes, par suite $\dim(\ker R_h) = N_c$.

D'où , $\dim(B_h^\Gamma) = \dim(B_h) - N_c$.

• Résolution du système (2.4)

On a $\dim(B_h^\Gamma) < \dim(B_h)$, cela signifie que la matrice associée au système linéaire

$$\sum_{j=1}^m a(\alpha_{i|\Gamma_h}, \alpha_{j|\Gamma_h}) u_j = l(\alpha_{i|\Gamma_h})$$

qui découle de (2.4) est singulière en utilisant la famille $\{\alpha_{i|\Gamma_h}\}_{1 \leq i \leq m}$.

Il y a donc deux manières d'implémenter ce système :

- soit on utilise une méthode itérative
- soit on utilise une méthode directe sous contrainte

Nous utilisons la deuxième option, puisque qu'elle est beaucoup plus efficace que la première en terme de temps de calcul.

En ce qui concerne les contraintes, nous imposons que la solution u_h soit orthogonale à ϕ_h sur toutes les composantes connexes de β_h c'est à dire :

$$\int_{\beta_h^j} u_h \phi_h = 0 \quad \text{pour } j = 1, \dots, N_c$$

Ces contraintes vont nous permettre de rajouter exactement N_c nouvelles équations au système (2.4) pour obtenir une matrice carrée inversible, ce qui garantit l'unicité de la solution du problème initial.

Par conséquent, le nouveau système s'écrit de manière variationnelle comme suit :

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

$$\begin{cases} a(u_h, v) + b_\phi(v, \lambda_\phi) = l_h(v) & \forall v \in B_h \\ b_\phi(u_h, \mu_\phi) = 0 & \forall \mu_\phi \in \mathbb{R}^{N_c} \end{cases} \quad (2.5)$$

où

$$b_\phi(u, \mu_\phi) = \sum_{j=1}^{N_c} \int_{\beta_h^j} \mu_\phi^j u_h$$

Ce système s'écrit matriciellement comme suit : $AU = L$ où :

$$A = \begin{pmatrix} A_\Gamma & \Phi^T \\ \Phi & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_h \\ \lambda_\phi \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} l_h \\ 0 \end{pmatrix}$$

A_Γ et Φ sont respectivement les matrices associées aux formes bilinéaires a et b_ϕ .

2.3 Opérateurs de prolongement et de restriction

Le but de cette section est de décrire des opérateurs mathématiques qui vont nous permettre d'échanger des informations entre une surface et le volume dans lequel elle est contenue particulièrement dans le cas où celle-ci est en mouvement.

2.3.1 Opérateur de restriction

Il s'agit de l'opérateur R_h défini par :

$$R_h : u \in B_h \quad \longrightarrow \quad u|_\Gamma \in B_h^\Gamma$$

Cet opérateur est construit en traitant un à un tous les triangles de la bande : chaque triangle K de la bande intersecte Γ_h en exactement deux points x_Γ^1 et x_Γ^2 (voir la figure (2.6)) situés respectivement sur deux arêtes a_1 et a_2 de K . On note $u|_\Gamma^1$ et $u|_\Gamma^2$ les valeurs de la restriction de u respectivement aux points x_Γ^1 et x_Γ^2 , on les obtient en interpolant les valeurs de u aux sommets des arêtes a_1 et a_2 .

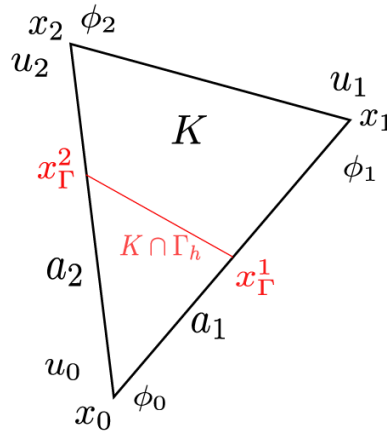


FIGURE 2.6 – Triangle K

Si l'on note u_i et ϕ_i respectivement les valeurs de u et ϕ au sommet x_i pour $i = 0, 1, 2$, on a :

$$x_\Gamma^i = \frac{x_0\phi_i - x_i\phi_0}{\phi_i - \phi_0} \quad \Longrightarrow \quad u|_\Gamma^i = \frac{u_0\phi_i - u_i\phi_0}{\phi_i - \phi_0} \quad \text{pour } i = 1, 2.$$

2.3.2 Opérateur de prolongement

Il s'agit de l'opérateur P_h défini par :

$$P_h : u_{W_h} \in W_h \longrightarrow u_{B_h} = \arg \min_{v_h \in B_h} \left(\int_{\Gamma} (u_{W_h} - v_h)^2 ds \right) \in B_h$$

sous les contraintes

$$\int_{B_h^j} u_h \phi_h = 0 \quad \text{pour } j = 1, \dots, N_c$$

pour assurer l'unicité.

On caractérise cet opérateur par la relation :

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} u_{B_h} v_h ds &= \int_{\Gamma} u_{W_h} v_h ds && \forall v_h \in B_h \\ \int_{B_h^j} u_h \phi_h &= 0 && \text{pour } j = 1, \dots, N_c \end{aligned}$$

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

Chapitre 3

Validation de la méthode level-set

Contents

3.1	Formulation sur un maillage surfacique régulier	19
3.1.1	Discrétisation éléments finis	19
3.1.2	Résultats numériques	19
3.2	Formulation sur un maillage surfacique induit par level- set	20
3.3	Formulation basée sur la méthode level-set sur une bande	21
3.3.1	Discrétisation éléments finis	21
3.3.2	Résultats numériques	22
3.4	Comparaison des trois méthodes	23

Le but de ce chapitre est d'étudier les différentes méthodes de résolution des équations aux dérivées partielles sur des surfaces sans bord et ensuite les comparer. Dans le cadre de cette étude, nous considérons en particulier un tore Γ sur lequel on veut résoudre l'équation :

$$-\Delta_{\Gamma}u = f \quad (3.1)$$

où Δ_{Γ} est l'opérateur de Laplace-Beltrami défini par : $\Delta_{\Gamma}u = \nabla_{\Gamma} \cdot \nabla_{\Gamma}u$ avec $\nabla_{\Gamma}u$ la dérivée tangentielle de u le long de Γ .

Le second membre f doit satisfaire à la condition de compatibilité : $\int_{\Gamma} f ds = 0$ pour que (3.1) puisse admettre des solutions (puisque l'on a $\int_{\Gamma} \Delta_{\Gamma}u ds = 0 \quad \forall u \in H^2(\Gamma)$). Il est clair que dans ces conditions (3.1) admet une infinité de solutions :

$$-\Delta_{\Gamma}u = f \implies -\Delta_{\Gamma}(u + c|_{\Gamma}) = f \quad \forall c \in \mathbb{R}$$

Donc nous allons chercher une solution de moyenne nulle qui sera a priori unique.

La formulation variationnelle associée à ce problème est la suivante :

(VF₁) : Trouver $u \in V$ tel que :

$$a(u, v) = l(v) \quad \forall v \in V$$

où

$$\begin{aligned} a(u, v) &= \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma}u \cdot \nabla_{\Gamma}v ds \\ l(v) &= \int_{\Gamma} f v ds \\ V &= \{v \in H^1(\Gamma), b(v, 1) = 0\} \\ b(v, \mu) &= \int_{\Gamma} \mu v ds \quad \forall \mu \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

La formulation (VF₁) est équivalente à une minimisation de la fonction

$$J(v) = \frac{1}{2}a(v, v) - l(v)$$

sous la contrainte $b(v, 1) = 0$. On introduit alors le Lagrangien défini pour tout couple $(v, \mu) \in H^1(\Gamma) \times \mathbb{R}$ par :

$$L(v, \mu) = J(v) + b(v, \mu)$$

Le point selle $(u, \lambda) \in H^1(\Gamma) \times \mathbb{R}$ de L est caractérisé par le système :

$$\begin{cases} a(u, v) + b(v, \lambda) = l(v) \quad \forall v \in H^1(\Gamma) \\ b(u, \mu) = 0 \quad \forall \mu \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.2)$$

Nous résolvons le problème (3.2) en utilisant successivement la méthode directe standard sur un maillage régulier du tore Γ , la méthode level-set sur un maillage intersecté Γ_h avec espace de discrétisation W_h et sur la bande des tétraèdres qui intersectent Γ_h qui est la méthode qu'on veut valider.

3.1 Formulation sur un maillage surfacique régulier

3.1.1 Discrétisation éléments finis

Considérons un maillage régulier τ_h de Γ , on introduit l'espace X_h défini par :

$$X_h = \{v_h \in H^1(\Gamma); v|_K \in P_1, \forall K \in \tau_h\}$$

Le code Rheolef correspondant est :

```
geo omega (argv[1]);
Float tol = (argc > 2) ? atof(argv[2]) : 1e-7;
size_t d = omega.dimension();
space Xh (omega, "P1");
```

Le problème (3.2) devient :

(VF₂) : Trouver $(u_h, \lambda_h) \in X_h \times \mathbb{R}$ tel que :

$$\begin{cases} a(u_h, v) + b(v, \lambda_h) = l_h(v) \quad \forall v \in X_h \\ b(u_h, \mu) = 0 \quad \forall \mu \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.3)$$

On assemble la matrice du système (3.3) sous la forme : $AU = L$ où :

$$A = \begin{pmatrix} A_u & B^T \\ B & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_h \\ \lambda_h \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} l_h \\ 0 \end{pmatrix}$$

```
form a (Xh, Xh, "grad_grad");
form m (Xh, Xh, "mass");
field one (Xh, 1.0);
field b = m*one;
csr<Float> A = neumann_laplace_assembly (a.uu, b.u);
ssk<Float> fact_A = ldlt(A);
field fh = interpolate(Xh, f(d));
field lh = m*fh;
vec<Float> L(lh.u.size()+1, 0.0);
for (size_t i = 0; i < L.size()-1; i++) L.at(i) = lh.u.at(i);
L.at(L.size()-1) = 0;
vec<Float> U = fact_A.solve(L);
field uh(Xh);
for (size_t i = 0; i < U.size()-1; i++) uh.u.at(i) = U.at(i);
```

Voir dans ([5], page 25) pour plus de précision sur l'assemblage et en particulier sur la fonction qui construit A à partir de A_u et B .

3.1.2 Résultats numériques

Sur la figure (3.1), nous avons un maillage régulier du tore construit par **Gmsh** relativement fin (pas du maillage $h = 0.05$) sur lequel nous visualisons les lignes de niveau de la solution approchée u_h de l'équation (3.1) par la méthode directe (voir sur la figure (3.1.2)).

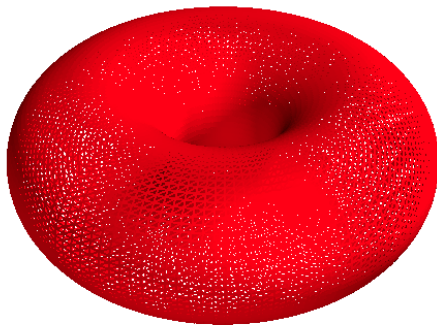


FIGURE 3.1 – Maillage régulier du tore

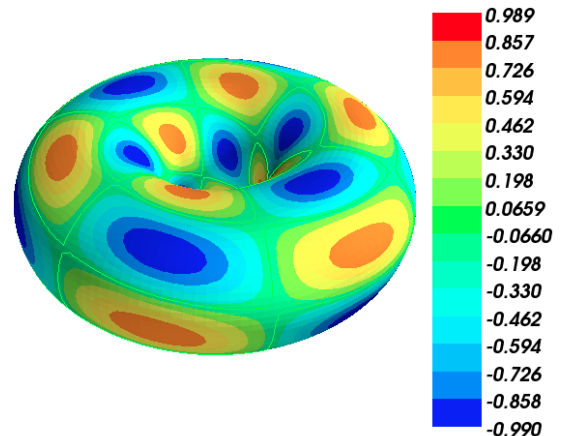


FIGURE 3.2 – Solution approchée u_h

3.2 Formulation sur un maillage surfacique induit par level-set

On adopte la même méthode de résolution que dans le cas précédemment mais on change uniquement le maillage. On construit un maillage par intersection en utilisant la méthode *level-set* (voir chapitre 2).

Le maillage intersecté est construit dans le fichier "*isovalue_torus.cc*".

"*Fichier isovalue_torus.cc*"

```
#include "rheolef.h"
#include "torus.h"
using namespace rheolef;
using namespace std;
int main (int argc, char**argv) {
  geo Lambda (argv[1]);
  space Vh (Lambda, "P1");
  field phi_h = interpolate(Vh, phi);
  geo Gamma = zero_level_set (phi_h);
  cout << setprecision(16) << Gamma;
}
```

Sur la figure (3.3), nous avons un maillage du tore obtenu par intersection, on peut remarquer qu'il est très grossier par rapport au maillage régulier ce qui est l'une des avantages de la méthode level-set sur la méthode directe.

Nous visualisons sur ce maillage les lignes de niveau de la solution approchée u_h de l'équation (3.1) (voir sur la figure (3.2)) qui se comporte assez bien vu la qualité du maillage.

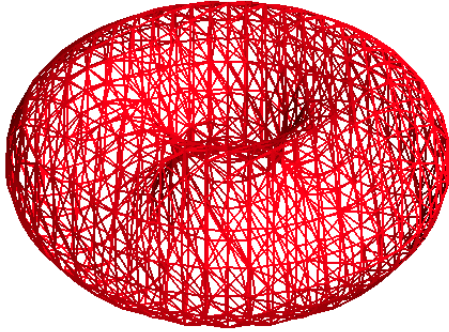
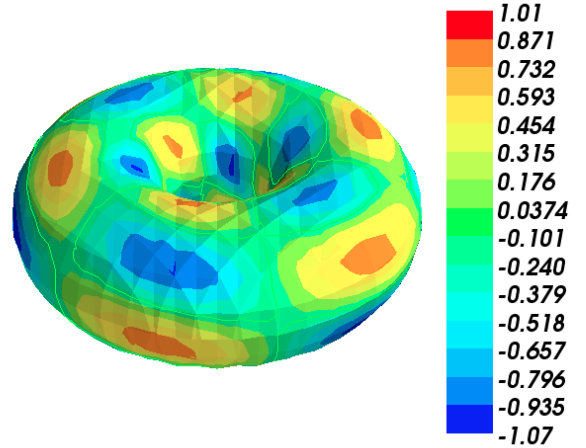


FIGURE 3.3 – Maillage obtenu par intersection

FIGURE 3.4 – Solution approchée u_h

3.3 Formulation basée sur la méthode level-set sur une bande

3.3.1 Discrétisation éléments finis

On considère un volume $\Lambda \subset \mathbb{R}^3$ contenant Γ , puis on définit Γ implicitement par une fonction level set ϕ défini sur Λ (chaptire 2) par :

$$\Gamma = \{x \in \Lambda; \phi(x) = 0\}$$

En utilisant les mêmes notations qu'au chapitre 2, on construit l'approximation polygonale Γ_h de Γ vérifiant :

$$\Gamma_h = \{x \in \Lambda; \phi_h(x) = 0\}$$

Ensuite, on construit la bande β_h constituée de tous les éléments du maillage T_h qui intersectent la surface approchée Γ_h . On utilise donc l'espace des éléments finis B_h^Γ pour résoudre nos équations surfaciques, où

$$B_h^\Gamma = \left\{ v_h \in H^1(\Gamma_h) / \exists \psi_h \in B_h : v_h = \psi_h|_{\Gamma_h} \right\}$$

avec

$$B_h = \left\{ v_h \in C(\beta_h), v_h|_K \in \mathbb{P}_1, \forall K \in \beta_h \right\}.$$

```

geo Lambda (argv[1]);
Float tol = (argc > 2) ? atof(argv[2]) : 1e-7;
size_t d = Lambda.dimension();
space Vh (Lambda, "P1");
field phi_h_lambda = interpolate(Vh, phi);
space Bh (phi_h_lambda, "banded_level_set");
field phi_h = interpolate(Bh, phi);

```

A partir de cette discrétisation, la formulation (3.2) devient :

$(VF_2) : \text{Trouver } (u_h, \lambda_\phi, \lambda_h) \in B_h \times \mathbb{R}^{N_c+1} \text{ tel que :}$

$$\begin{cases} a(u_h, v) + b_\phi(v, \lambda_\phi) + b(v, \lambda_h) = l_h(v) & \forall v \in B_h \\ b_\phi(u_h, \mu_\phi) = 0 & \forall \mu_\phi \in \mathbb{R}^{N_c} \\ b(u_h, \mu) = 0 & \forall \mu \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.4)$$

On assemble la matrice du système (3.4) sous la forme : $AU = L$ où :

$$A = \begin{pmatrix} A_u & \Phi^T & B^T \\ \Phi & 0 & 0 \\ B & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} u_h \\ \lambda_\phi \\ \lambda_h \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} l_h \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

```

form a (Bh, Bh, "grad_grad_s", phi_h);
form m (Bh, Bh, "mass_s", phi_h);
field one(Bh, 1.0);
field b = m*one;
csr<Float> A = band_assembly<Float> (a, b, phi_h);
field fh = interpolate(Bh, f(d));
field lh = m*fh;
vec<Float> L(A.nrow(), 0.0);
for (size_t i = 0; i < lh.u.size(); i++) L.at(i) = lh.u.at(i);
for (size_t i = lh.u.size(); i < L.size(); i++) L.at(i) = 0;
ssk<Float> fact_A = ldlt(A);
vec<Float> U (L.size());
U = fact_A.solve(L);
field uh(Bh);
for (size_t i = 0; i < uh.u.size(); i++) uh.u.at(i) = U.at(i);

```

L'assemblage de la matrice A se fait dans la fonction ***band_assembly;T*** qui prend en arguments d'entrée une forme bilinéaire a et deux champs éléments finis b et ϕ_h tenant compte respectivement de la contrainte sur la solution et la définition de la bande et renvoie une matrice sous le format **csr (compressed sparse row)**.

3.3.2 Résultats numériques

Sur la figure (3.5), nous avons la bande constituée des triangles du maillage du volume $[-2, 2]^2$ (voir figure (3.3.2)) qui intersectent le tore sur lequel nous visualisons les lignes de niveau de la solution approchée u_h de l'équation (3.1) par la méthode level-set (voir sur la figure (3.7)).

La figure (3.3.2) montre la restriction de u_h sur le tore.

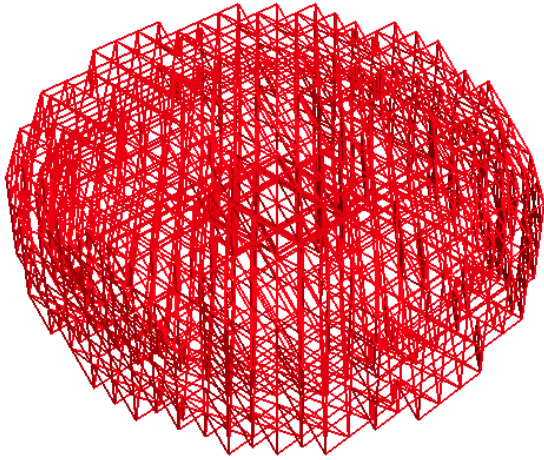


FIGURE 3.5 – Bande

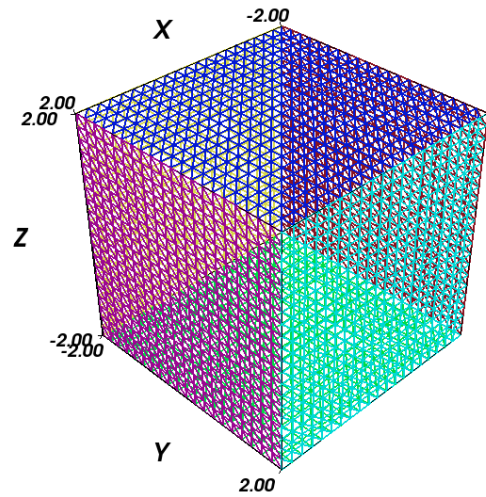
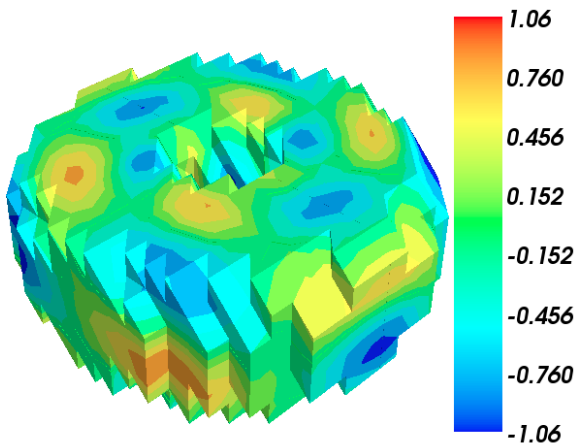
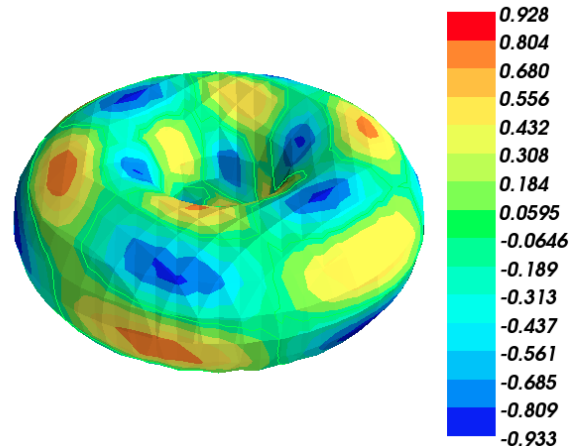


FIGURE 3.6 – Maillage régulier du volume

FIGURE 3.7 – Solution approchée u_h sur bandeFIGURE 3.8 – Reconstruction de u_h sur Γ

3.4 Comparaison des trois méthodes

Dans cette section, on procède à une analyse d'erreur pour pouvoir valider et comparer les trois méthodes. Pour cela, nous avons choisi comme solution exacte

$$u(\rho, \theta, \varphi) = \sin(3\varphi) \cos(3\theta + \varphi)$$

dans le système de coordonnées (ρ, θ, φ) (voir le fichier **torus.h**) vérifiant la contrainte $\int_{\Gamma} u(\rho, \theta, \varphi) ds = 0$. Le second membre $f(\rho, \theta, \varphi) = -\Delta_{\Gamma} u(\rho, \theta, \varphi)$ associé à cette so-

lution exacte est donnée par :

$$f(\rho, \theta, \varphi) = \frac{9 \sin(3\varphi) \cos(3\theta + \varphi)}{r^2} + \frac{10 \sin(3\varphi) \cos(3\theta + \varphi) + 6 \cos(3\varphi) \sin(3\theta + \varphi)}{(R + r \cos(\theta))^2} - \frac{3 \sin(\theta) \sin(3\varphi) \sin(3\theta + \varphi)}{r(R + r \cos(\theta))}$$

On calcule l'erreur $e = u_h - u$ en norme L^2 et H^1 , mais comme on a plusieurs solutions exactes possibles, nous calculons donc :

$$e_h = \min_{c \in \mathbb{R}} \|e - c_{|\Gamma}\|_H = \left\| e - \int_{\Gamma} \frac{e}{|\Gamma|} \right\|_H, \quad H = L^2 \text{ ou } H^1$$

```
field pi_h_u = interpolate(Xh, u(d));
field eh = uh-pi_h_u;
Float lambda_e = dot(b, eh)/dot(b, one);
eh = eh - lambda_e*one;
Float err_l2 = sqrt(m(eh, eh));
Float err_h1 = sqrt(a(eh, eh));
```

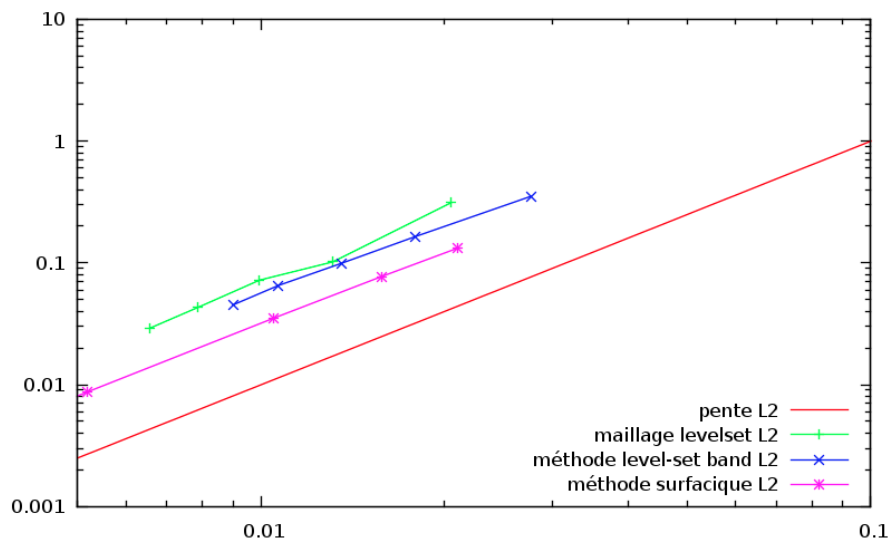


FIGURE 3.9 – Erreur en norme L^2 sur les trois méthodes

La figure (3.9) montre les erreurs en échelle logarithmique entre les solutions numériques obtenues par les trois méthodes et la solution exacte en norme L^2 .

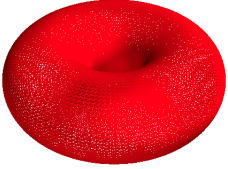
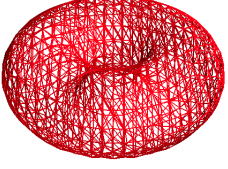
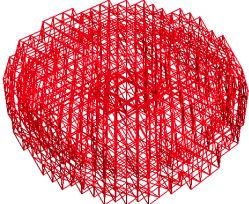
On s'entend bien à ces résultats c'est à dire que les trois méthodes sont optimales en norme L^2 (ordre de convergence = 2) pour des éléments finis \mathbb{P}_1 .

Remarque

Comme nous l'avons mentionné au chapitre 2, la convergence de la résolution dans l'espace W_h n'est pas prouvée mais on voit sur cet exemple que la la solution

approchée dans W_h se comporte assez bien .

Voici un tableau récapitulatif des avantages et inconvénients de chacune des trois méthodes de résolutions :

	Régulier	Intersecté	Bande
			
Adapté à une géométrie complexe	non	oui	oui
Convergence prouvée	oui	non	oui

Ce tableau montre bien que la méthode level-set avec résolution sur une bande de maillage est la méthode la mieux adaptée aux types de problèmes que nous voulons étudier.

Chapitre 4

Modélisation de la convection-diffusion de surfactants

Contents

4.1	Discrétisations en temps et formulations variationnelles	28
4.2	Discrétisation éléments finis du problème	29
4.3	Résolution du système	31
4.4	Tests numériques	32
4.4.1	Diffusion de concentrations de surfactants en 2D	32
4.4.2	Diffusion de concentrations de surfactants en 3D	34

Le but de ce chapitre est d'étudier la convection-diffusion de surfactants dans un domaine divisé en deux sous-domaines et une surface : présenter les aspects physiques, mathématiques et informatiques des équations de convection-diffusion couplées.

On considère un volume $\Lambda \subset \mathbb{R}^p$, $p = 2$ ou 3 et une surface fermée Γ sans bord ($\partial\Gamma = \emptyset$) contenue dans Λ (fig 4.1).

La surface est définie implicitement par une fonction level set ϕ comme suit :

$$\Gamma(t) = \{(x, t) \in \Lambda \times [0, T] / \phi(x, t) = 0\}$$

ϕ est positif à l'intérieur de la surface, négatif à l'extérieur et nul sur $\Gamma(t)$. La fonction ϕ est solution de l'équation :

$$\begin{cases} \frac{\partial\phi}{\partial t} + u \cdot \nabla\phi = 0 & \text{dans } \Lambda \\ \phi(x, t = 0) = \phi_0(x) & \text{dans } \Lambda \end{cases} \quad (4.1)$$

ϕ est une fonction distance, c'est à dire $\|\nabla\phi\| = 1$, donc $n = \nabla\phi$ est la normale unitaire sortante à la surface orientée Γ .

L'équation (4.1) exprime qu'en chaque point la variation du niveau est portée par la normale à l'interface, c'est-à-dire par le gradient $\nabla\phi$.

Cette étude est divisée en deux étapes :

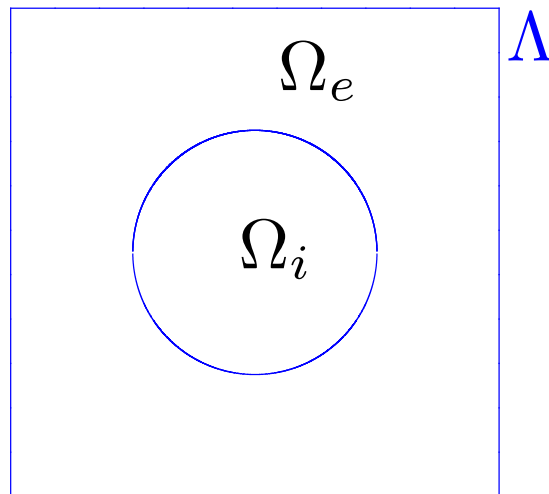


FIGURE 4.1 – Géométrie

- une première étape qui consiste à déterminer la concentration des surfactants sur la surface et le volume environnant
- une deuxième étape qui consiste à déterminer la vitesse du fluide (voir Annexe).

Pour déterminer la concentration des surfactants, nous disposons de deux équations linéaires de convection-diffusion couplées dont l'une est définie uniquement sur la surface Γ qui gouverne l'évolution de la concentration sur la surface et l'autre est définie sur le domaine $\Omega_e \cup \Omega_i$ (voir Figure 4.1) qui gouverne l'évolution de la concentration dans le reste du volume.

Ces équations sont données par (4.2) et (4.3)

$$\frac{\partial C_\Gamma}{\partial t} + u \cdot \nabla_\Gamma C_\Gamma - D_\Gamma \Delta_\Gamma C_\Gamma = f + k(C - C_\Gamma) \quad \text{sur } \Gamma \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \cdot \nabla C - D_\Lambda \Delta C = g \quad \text{dans } \Lambda \quad (4.3)$$

où

- C_Γ est la concentration sur la surface Γ
- C est la concentration dans le reste du volume
- D_Γ est la diffusivité en surface
- D_Λ est la diffusivité en volume
- k est le taux d'échange de concentration à travers la surface

Pour l'équation (4.3) les conditions aux limites sont définies comme suit :

$$\begin{cases} [C]_\Gamma = 0 \\ -D_\Lambda [\nabla C]_\Gamma \cdot n = 2k(C_\Gamma - C) \text{ sur } \Gamma, \\ C = 1 \text{ sur } \partial\Lambda \end{cases}$$

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

Donc physiquement, on impose une concentration constante ($C = 1$) à l'infini par rapport à la membrane et un flux d'échange de concentrations entre la surface et le volume environnant via le taux d'échange k . On suppose que la concentration reste continue à travers l'interface Γ au cours du temps.

4.1 Discrétisations en temps et formulations variationnelles

Nous avons choisis de discrétiser en temps implicitement nos équations.

Soit N un entier strictement positif, on définit le pas de temps $\Delta t = \frac{T}{N}$ ensuite pour $0 \leq n \leq N$ on pose $t_n = n\Delta t$ et C^n sera l'approximation de $C(x, t_n)$.

Pour l'équation (4.2)

On a : $\frac{\partial C_\Gamma}{\partial t} + u \cdot \nabla_\Gamma C_\Gamma - \Delta_\Gamma C_\Gamma = f + k(C - C_\Gamma)$ qui peut s'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial C_\Gamma \circ X}{\partial t} - \Delta_\Gamma C_\Gamma = f + k(C - C_\Gamma)$$

où $X(x, t)$ est la position de la membrane à l'instant t définie par la méthode des caractéristiques :

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial t} = u(X(x, t), t) \quad t \in]t_n, t_{n+1}[, \\ X(x, t_{n+1}) = x \end{cases}$$

On discrétise en temps cette dernière équation comme suit :

$$\begin{aligned} \frac{C_\Gamma^{n+1} - C_\Gamma^n \circ X^n}{\Delta t} - \Delta_\Gamma C_\Gamma^{n+1} &= f^{n+1} + k(C^{n+1} - C_\Gamma^{n+1}) \\ \Leftrightarrow \lambda C_\Gamma^{n+1} - \Delta t \Delta_\Gamma C_\Gamma^{n+1} - k \Delta t C^{n+1} &= F^{n+1} \end{aligned}$$

où

- $\lambda = 1 + k\Delta t$
- $F^{n+1} = C_\Gamma^n \circ X^n + \Delta t f^{n+1}$
- $X^n(x) = X(x, t_n) \approx x - \Delta t u^n(x)$

Donc la formulation variationnelle associé à ce problème est :

(VF1) Trouver $C_\Gamma^{n+1} \in H^1(\Gamma)$ tel que :

$$\lambda \int_\Gamma C_\Gamma^{n+1} v ds + \Delta t D_\Gamma \int_\Gamma \nabla_\Gamma C_\Gamma^{n+1} \cdot \nabla_\Gamma v ds - k \Delta t \int_\Gamma C^{n+1} v ds = \int_\Gamma F^{n+1} v ds \quad \forall v \in H^1(\Gamma)$$

Pour l'équation (4.3)

On procède de la même manière que précédemment pour discrétiser en temps l'équation (3.2) respectivement sur Ω_e et Ω_i . Les formulations variationnelles correspondantes sont :

$$\int_{\Omega_i} C^{n+1} v dx + \Delta t D_\Lambda \int_{\Omega_i} \nabla C^{n+1} \cdot \nabla v dx - k \Delta t \int_\Gamma \frac{\partial C_i}{\partial n_i} v ds = \int_{\Omega_i} G^{n+1} v dx \quad \forall v \quad (4.4)$$

et

$$\int_{\Omega_e} C^{n+1} v dx + \Delta t D_\Lambda \int_{\Omega_e} \nabla C^{n+1} \cdot \nabla v dx - k \Delta t \int_\Gamma \frac{\partial C_e}{\partial n_e} v ds = \int_{\Omega_e} G^{n+1} v dx \quad \forall v \quad (4.5)$$

avec $G^{n+1} = C^n \circ X^n + \Delta t g^{n+1}$

En faisant la somme des égalités (4.4) et (4.5) on aboutit à la formulation variationnelle suivante :

(VF2) Trouver $C^{n+1} \in H_0^1(\Lambda)$ tel que :

$$\begin{aligned} \int_\Lambda C^{n+1} v dx + \Delta t D_\Lambda \int_\Lambda \nabla C^{n+1} \cdot \nabla v dx + 2k \Delta t \int_\Gamma C^{n+1} v ds - 2k \Delta t \int_\Gamma C_\Gamma^{n+1} v ds \\ = \int_\Lambda G^{n+1} v dx \quad \forall v \in H_0^1(\Lambda) \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.2 Discrétisation éléments finis du problème

On utilise des espaces des éléments finis pour la discrétisation, dépendants du temps, induits par un maillage de la surface Γ , obtenus par intersection de l'isosurface

et du maillage du volume Λ (voir [1]).

Soit T_h le maillage défini sur Λ sur lequel on définit l'espace des éléments finis

$$V_h = \left\{ v_h \in H^1(\Lambda), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1, \forall K \in T_h \right\}.$$

On introduit la surface Γ_h^n l'approximation de Γ^n à l'instant t_n , $0 \leq n \leq N$. On vérifie que Γ_h^n est définie par :

$$\Gamma_h^n = \{x \in \Lambda; \phi_h^n = 0\}$$

où ϕ_h est une approximation continue linéaire par morceaux de ϕ sur T_h .

Ensuite, on construit une bande noté β_h^n constitué de tous les éléments du maillage T_h qui intersectent la surface approchée Γ_h^n à l'instant t_n , conformément au chapitre 2 :

$$\beta_h^n = \bigcup_{K \in T_h} \{K, K \cap \Gamma_h^n \neq \emptyset\}.$$

On utilise donc l'espace des éléments B_h^n pour résoudre nos équations surfaciques, où

$$B_h^n = \left\{ v_h \in C(\beta_h^n), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1, \forall K \in \beta_h^n \right\}.$$

Donc les formulations variationnelles (VF1) et (VF2) deviennent :

Trouver $C_{\Gamma_h}^{n+1} \in B_h^{n+1}$ et $C^{n+1} \in V_h$ tels que :

$$\begin{aligned} \lambda \int_{\Gamma} C_{\Gamma_h}^{n+1} v_h ds + \Delta t D_{\Gamma} \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} C_{\Gamma_h}^{n+1} \cdot \nabla_{\Gamma} v_h ds - k \Delta t \int_{\Gamma} C_h^{n+1} v_h ds \\ = \int_{\Gamma} F_h^{n+1} v_h ds \quad \forall v_h \in B_h^{n+1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Lambda} C_h^{n+1} v_h dx + \frac{1}{2} \Delta t D_{\Lambda} \int_{\Lambda} \nabla C_h^{n+1} \cdot \nabla v_h dx + k \Delta t \int_{\Gamma} C_h^{n+1} v_h ds - k \Delta t \int_{\Gamma} C_{\Gamma_h}^{n+1} v_h ds \\ = \frac{1}{2} \int_{\Lambda} G_h^{n+1} v_h dx \quad \forall v_h \in V_h \end{aligned} \quad (4.8)$$

Remarque

- L'équation (4.8) est obtenue en multipliant l'équation (4.6) par le facteur $\frac{1}{2}$ pour obtenir une matrice de résolution symétrique.
- Pour résoudre l'équation (4.7), nous avons toujours besoin d'évaluer la concentration $C_{\Gamma_h}^n$ sur B_h^{n+1} qui apparaît dans l'expression de F_h^{n+1} . Cette contrainte nécessite un traitement spécial dont le principe est donné en Annexe.

4.3 Résolution du système

Désignons par m la dimension de V_h , ($m = \dim(V_h)$) et b celle de B_h , ($b = \dim(B_h^n)$). Soient $(\varphi_1, \dots, \varphi_m)$ une base de V_h et $(\psi_1^n, \dots, \psi_b^n)$ une base de B_h^n , on a :

$$C_{\Gamma_h}^m = \sum_{i=1}^b c_i^n \psi_i^n, \text{ et } C_h^n = \sum_{i=1}^m \mu_i^n \varphi_i$$

Donc les problèmes (4.7) et (4.8) deviennent par linéarité :
Trouver $c_1^{n+1}, \dots, c_b^{n+1}, \mu_1, \dots, \mu_m^{n+1}$ tels que :

$$\sum_{i=1}^b c_i^{n+1} a_{\Gamma}(\psi_i^{n+1}, \psi_j^{n+1}) + \sum_{i=1}^m \mu_i^{n+1} d(\varphi_i, \psi_j^{n+1}) = l_{\Gamma_h}(\psi_j^{n+1}) \quad \forall j = 1, \dots, b \quad (4.9)$$

$$\sum_{i=1}^b c_i^{n+1} d(\psi_i^{n+1}, \varphi_j) + \sum_{i=1}^m \mu_i^{n+1} a(\varphi_i, \varphi_j) = l_h(\varphi_j) \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (4.10)$$

où

$$\begin{aligned} a_{\Gamma}(u, v) &= \lambda \int_{\Gamma} uv ds + \Delta t D_{\Gamma} \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} u \cdot \nabla_{\Gamma} v ds \\ d(u, v) &= -k \Delta t \int_{\Gamma} uv ds \\ a(u, v) &= \frac{1}{2} \int_{\Lambda} uv dx + \frac{1}{2} \Delta t D \int_{\Lambda} \nabla u \cdot \nabla v dx + k \Delta t \int_{\Gamma} uv ds \\ l_{\Gamma}(v) &= \int_{\Gamma} F_h^{n+1} v ds \\ l(v) &= \frac{1}{2} \int_{\Lambda} G_h^{m+1} v \end{aligned}$$

Si l'on désigne par $A_{\Gamma}(b, b)$, $A(m, m)$, $D(m, b)$ les matrices associées respectivement aux formes bilinéaires $a_{\Gamma}(\cdot, \cdot)$, $a(\cdot, \cdot)$, $d(\cdot, \cdot)$, le système (4.9) et (4.10) s'écrit matriciellement comme suit :

$$\begin{pmatrix} A_{\Gamma} & D^T & \Phi^T \\ D & A & 0 \\ \Phi & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\Gamma_h} \\ C_h \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{\Gamma_h} \\ l_h \\ 0 \end{pmatrix}$$

où Φ est la matrice de contraintes liées à la méthode level-set (voir chapitre 2).

4.4 Tests numériques

L'objectif de cette section est d'étudier numériquement le modèle (4.2) et (4.3) afin de le valider.

4.4.1 Diffusion de concentrations de surfactants en 2D

Dans ce cas, on reprend les équations (4.2) et (4.3) avec une vitesse nulle au cours du temps ($u = 0$) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_\Gamma}{\partial t} - D_\Gamma \Delta_\Gamma C_\Gamma &= f + k(C - C_\Gamma) && \text{sur } \Gamma \\ \frac{\partial C}{\partial t} - D \Delta C &= g && \text{dans } \Lambda \\ [C]_\Gamma &= 0 \\ -D [\nabla C]_\Gamma \cdot n &= 2k(C_\Gamma - C) && \text{sur } \Gamma \\ C &= 1 && \text{sur } \partial\Lambda \end{aligned}$$

où Γ est le cercle unité défini par la fonction level-set $\phi(x) = \|x\| - 1$ et Λ est la carrée $[-2, 2]^2$. Nous avons choisi comme solutions analytiques :

$$\begin{aligned} - C_\Gamma(x, t) &= (\theta - \pi)^3 \times (\theta + \pi)^3 \times \sin(t) \text{ avec } \theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \\ - C(x, t) &= 1 + (x^2 - 4)(y^2 - 4) \sin(t) \end{aligned}$$

Donc C_Γ et C sont continues et vérifient :

$$\begin{cases} C_\Gamma(x, 0) = 0 \text{ sur } \Gamma \\ C(x, 0) = 1 \text{ dans } \Lambda \\ C = 1 \text{ sur } \partial\Lambda \end{cases}$$

On a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_\Gamma}{\partial t} &= (\theta^2 - \pi^2)^3 \times \cos(t) \\ \Delta_\Gamma C_\Gamma(x, y) &= \frac{\partial^2 C_\Gamma}{\partial \theta^2} = 6(\theta^2 - \pi^2) ((\theta + \pi)^2 + 3(\theta^2 - \pi^2) + (\theta - \pi)^2) \end{aligned}$$

On en déduit

$$f(x, y) = k(C_\Gamma(x, y) - C(x, y)) + (\theta^2 - \pi^2)^3 \times \cos(t) - D_\Gamma \Delta_\Gamma C_\Gamma(x, y).$$

De la même façon, on trouve :

$$g(x, y) = (x^2 - 4)(y^2 - 4) \cos(t) - 2D(x^2 + y^2 - 8) \sin(t).$$

Nous rapportons les résultats obtenus sur les figures suivantes :

Les figures (4.2) et (4.4.1) montrent respectivement les solution approchées C_{Γ_h} et C_h de notre problème de diffusion (sans vitesse). Elles ont été réalisées par les données suivantes :

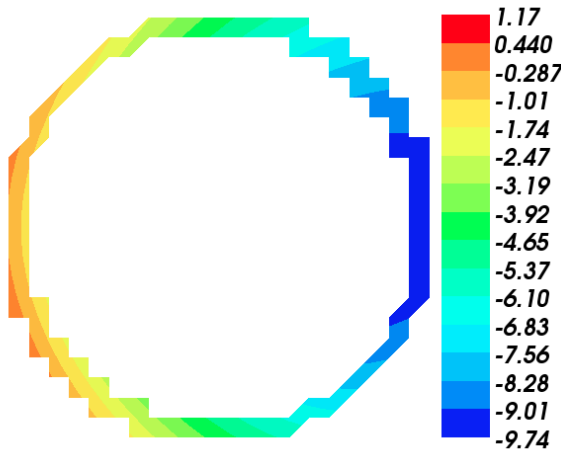


FIGURE 4.2 – Solution approchée C_{Γ_h}

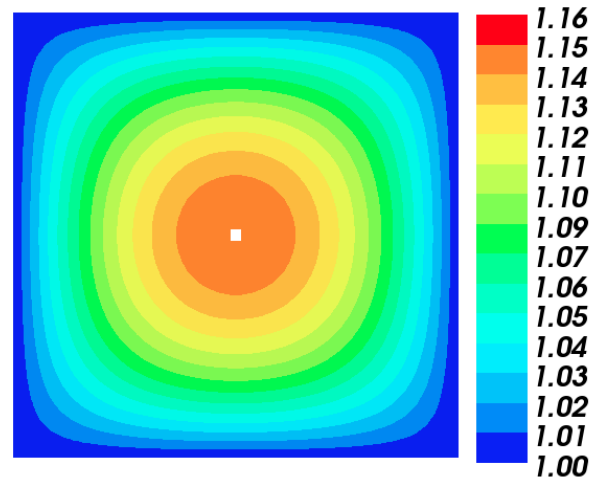


FIGURE 4.3 – Solution approchée C_h

```
T = 0.01;
k = 1e-5;
D = D_gamma = 1;
```

Ces résultats n'ont pas vraiment de signification physique, l'intérêt de cette étude est de pouvoir valider le modèle numérique. Nous avons aussi réalisé une analyse d'erreur avec le vecteur solution exacte

$u = \begin{pmatrix} C_\Gamma \\ C \end{pmatrix}$. On calcule l'erreur $e_h = u_h - u =$ en norme L^2 donnée par :

$$\|e_h\| = \sqrt{\|C_{\Gamma_h} - C_\Gamma\|^2 + \|C_h - C\|^2}$$

Le figure (4.4) montre l'erreur en échelle logarithmique entre la solution numérique

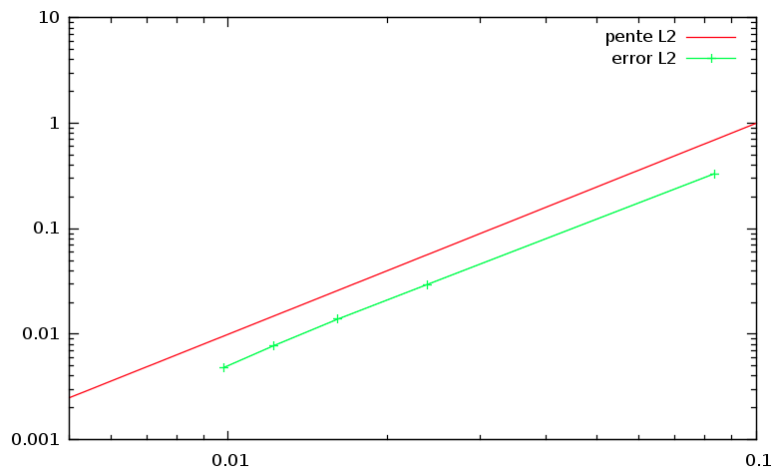


FIGURE 4.4 – Erreur en norme L_2

u_h et la solution exacte u en norme L^2 .

on obtient un ordre de convergence égal à 2 pour des éléments finis \mathbb{P}_1 , cela signifie que le modèle numérique est optimal en norme L^2 .

4.4.2 Diffusion de concentrations de surfactants en 3D

On reprend les mêmes équations que dans le cas 2D avec les seconds membres $f = g = 0$ et aussi une vitesse nulle au cours du temps ($u = 0$) :

$$\begin{cases} \frac{\partial C_\Gamma}{\partial t} - D_\Gamma \Delta_\Gamma C_\Gamma = k(C - C_\Gamma) & \text{sur } \Gamma \\ \frac{\partial C}{\partial t} - D \Delta C = 0 & \text{dans } \Lambda \end{cases}$$

où Γ est le tore défini par la fonction level-set

$$\phi(x) = \left(\sqrt{x^2 + y^2} - R \right)^2 + z^2 - r^2, R = 1, r = 0.6 \text{ et } \Lambda \text{ est le cube } [-2, 2]^3$$

sous les conditions aux limites :

$$\begin{cases} [C]_\Gamma = 0 \\ -D [\nabla C]_\Gamma \cdot n = 2k(C_\Gamma - C) \text{ sur } \Gamma, \\ C = 1 \text{ sur } (\partial\Lambda)_D \\ \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \text{ sur } (\partial\Lambda)_N \end{cases}$$

avec $(\partial\Lambda)_D = \Lambda_{\text{left}} \cup \Lambda_{\text{right}}$, $\Lambda_{\text{left}} =]-2, 2[\times \{-2\} \times]-2, 2[$, $\Lambda_{\text{right}} =]-2, 2[\times \{2\} \times]-2, 2[$ et $(\partial\Lambda)_N = \partial\Lambda \setminus (\partial\Lambda)_D$.

On retrouve la même formulation variationnelle écrite un peu plus haut.

Nous rapportons sur les figures suivantes l'évolution de la diffusion de la concentration sur la boîte et le tore au cours du temps :

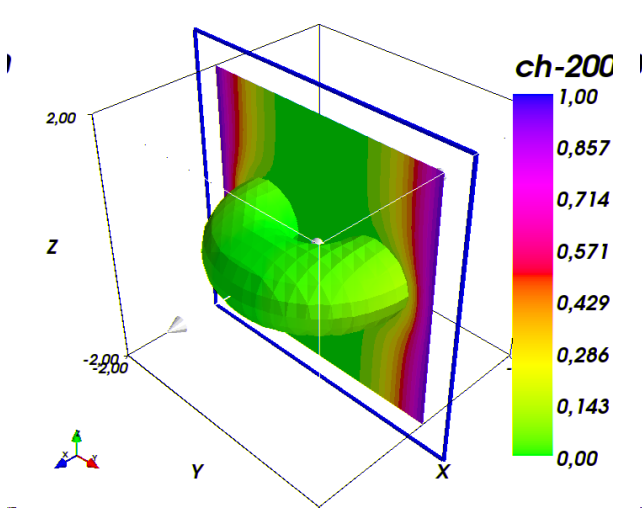


FIGURE 4.5 – $n = 200$

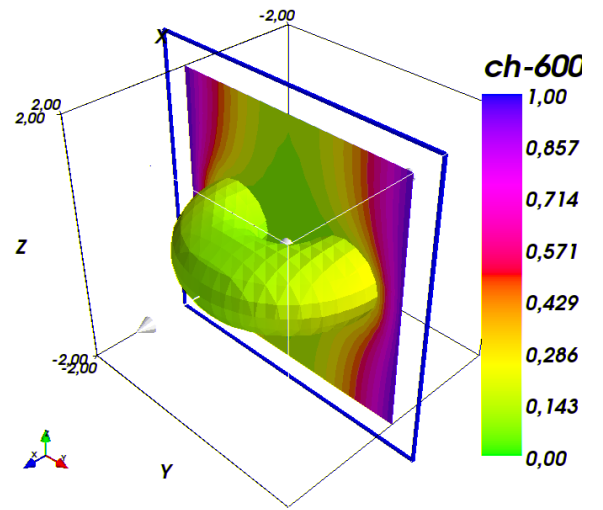
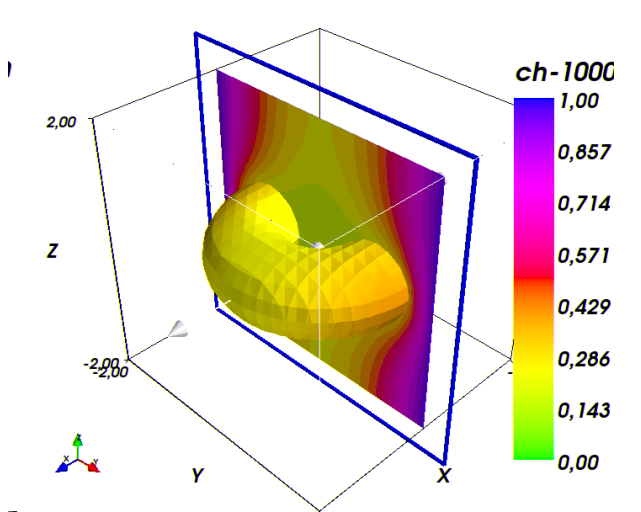
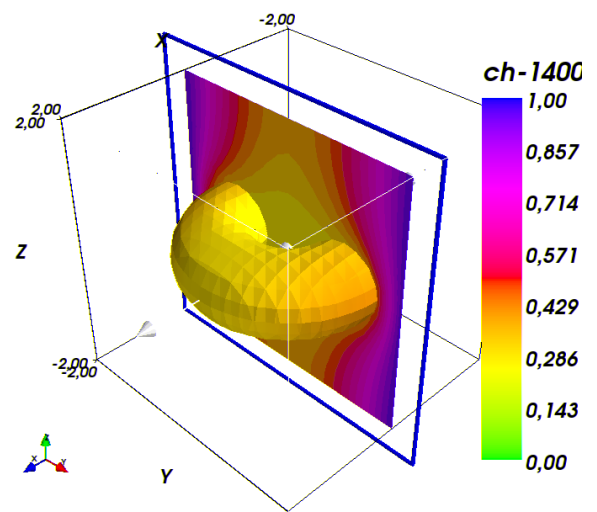


FIGURE 4.6 – $n = 600$

FIGURE 4.7 – $n = 1000$ FIGURE 4.8 – $n = 1400$

Interprétation des résultats

Ce test a été réalisé avec les valeurs suivantes :

```
T = 1;
k = 10;
D = 1;
D_gamma = 2;
```

On voit sur ces figures d'une part que les surfactants arrivent assez rapidement au milieu du tore, en passant par la surface ce qui est tout à fait normal car nous avons un coefficient d'échange assez grand ($k = 10$).

D'autre part, on observe un gradient de concentration sur le tore assez homogène. Sur la boîte, on observe plutôt une légère augmentation de concentration de surfactants autour du tore et une faible évolution de la concentration au voisinage du bord. Cela est dû au fait qu'on a sur le tore un coefficient de diffusion deux fois plus élevé que celui de la boîte.

Chapitre 5

équation de Stokes sur une surface

Contents

5.1	Formulation du problème sous forme d'énergie	37
5.2	Formulation variationnelle	37
5.3	Discretisation éléments finis du problème	38
5.4	Conclusion	40
5.5	Perspectives	40
5.6	Planning	41

Le but de ce chapitre est d'étudier l'équation de Stokes sur une surface Γ sans bord, contenue dans un volume $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, $d = 2$ ou 3 .

5.1 Formulation du problème sous forme d'énergie

Le problème de Stokes (P) sur Γ correspond à la minimisation de la dissipation visqueuse sur la surface. Il s'écrit :

$$u = \arg \min_{v \in V} J(v)$$

$$V = \{v \in H^1(\Lambda)^d, \operatorname{div}_s(v) = 0\}$$

avec

$$J(v) = \int_{\Gamma} \mu |D_s(v)|^2 ds - \int_{\Gamma} f \cdot v ds$$

où

- n est la normale extérieure à la surface
- D est le tenseur des contraintes visqueuses en volume dans définit par :

$$D(v) = \frac{1}{2} (\nabla v + (\nabla v)^T)$$

- D_s est le tenseur des contraintes visqueuses sur Γ qui correspond à la projection de D sur Γ : $D_s(v) = (I - n \otimes n) D(v)$
- f représente une force surfacique extérieure

On introduit alors le Lagrangien défini pour tout couple $(v, q) \in H^1(\Gamma)^d \times L^2(\Gamma)$ par :

$$L(v, q) = J(v) + b(v, q)$$

avec

$$b(v, q) = - \int_{\Gamma} q \operatorname{div}_s(v)$$

La résolution du problème (P) est équivalent à trouver le point selle $(u, p) \in H^1(\Gamma)^d \times L^2(\Gamma)$ de L , caractérisé par le système :

$$\begin{cases} a(u, v) + b(v, p) = l(v) & \forall v \in H^1(\Gamma)^d \\ b(u, q) = 0 & \forall q \in L^2(\Gamma) \end{cases} \quad (5.1)$$

avec

$$a(u, v) = \int_{\Gamma} 2\mu D_s(u) : D_s(v) ds \text{ et } l(v) = \int_{\Gamma} f \cdot v ds$$

5.2 Formulation variationnelle

Le problème (P) tel qu'il est défini initialement n'est pas a priori inversible. En effet :

- d'une part, les vecteurs u constants par rapport à x sont dans le noyau de D_s c'est à dire $D_s(u) = 0$. On élimine ces vecteurs en imposant que :

$$\int_{\Gamma} u \cdot e_i ds = 0 \quad \text{pour } i = 0, \dots, d-1$$

où les e_i sont les vecteurs de la base canonique.

Ces contraintes peuvent s'écrire de façon vectorielle comme suit :

$$\int_{\Gamma} u ds = 0$$

- d'autre part, on a aussi $D_s(u) = 0$ si u représente la rotation d'un solide quelconque. On élimine ces vecteurs en imposant que :

$$\int_{\Gamma} \text{rot}(u) ds = 0$$

En rajoutant ces contraintes au système (5.1), on obtient la formulation variationnelle suivante :

Trouver $(u, p, \omega, \psi) \in H^1(\Gamma)^d \times L^2(\Gamma) \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} a(u, v) + b(v, p) + t(v, \omega) + r(v, \psi) = l(v) & \forall v \in H^1(\Gamma)^d \\ b(u, q) = 0 & \forall q \in L^2(\Gamma) \\ t(u, \lambda_\omega) = 0 & \forall \lambda_\omega \in \mathbb{R}^d \\ r(u, \lambda_\psi) = 0 & \forall \lambda_\psi \in \mathbb{R}^d \end{array} \right. \quad (5.2)$$

avec

$$t(v, \omega) = \int_{\Gamma} v \cdot \omega ds$$

$$r(v, \psi) = \int_{\Gamma} \text{rot}(v) \cdot \psi ds$$

5.3 Discrétisation éléments finis du problème

Pour la discrétisation éléments finis du problème (5.2), nous utilisons l'espace $\Sigma_h = (H^1(\Gamma) \cap B_h)^d$ pour la vitesse et l'espace Θ_h pour la pression avec $\Theta_h = L^2(\Gamma) \cap B_h$. Donc la formulation variationnelle (5.2) devient :

Trouver $(u_h, p_h, \omega_h, \psi_h) \in \Sigma_h \times \Theta_h \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} a(u_h, v_h) + b(v_h, p_h) + t(v_h, \omega_h) + r(v_h, \psi_h) = l(v_h) & \forall v_h \in \Sigma_h \\ b(u_h, q_h) = 0 & \forall q_h \in \Theta_h \\ t(u_h, \lambda_\omega) = 0 & \forall \lambda_\omega \in \mathbb{R}^d \\ r(u_h, \lambda_\psi) = 0 & \forall \lambda_\psi \in \mathbb{R}^d \end{array} \right. \quad (5.3)$$

Le système (5.3) s'écrit de façon matricielle comme suit :

$$\begin{pmatrix} A & B^T & C_t^T & C_r^T \\ B & 0 & 0 & 0 \\ C_t & 0 & 0 & 0 \\ C_r & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ p_h \\ \omega_h \\ \psi_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

où $(C_t, C_r) \in \mathcal{M}_{d \times dN}(\mathbb{R})^2$, avec $N = \dim B_h$,

$$C_t^T = \begin{pmatrix} Me_0 \\ \vdots \\ Me_{d-1} \end{pmatrix} \quad C_r^T = \begin{pmatrix} Re_0 \\ \vdots \\ Re_{d-1} \end{pmatrix}$$

avec $(M, R) \in \mathcal{M}_{N \times N}^2$ telles que

$$\langle Mu_h, v_h \rangle = \sum_{0 \leq i, j < N} U_i V_j \int_{\Gamma} \varphi_i \cdot \varphi_j dx$$

$$\langle Ru_h, v_h \rangle = \sum_{0 \leq i, j < N} U_i V_j \int_{\Gamma} \text{rot}(\varphi_i) \cdot \varphi_j dx$$

Où les φ_i sont les fonctions de base de Σ_h .

5.4 Conclusion

Ce travail nous a permis d'élaborer des outils numériques efficaces et optimaux pour résoudre des équations aux dérivées partielles faisant intervenir des équations écrites en surface en interaction avec des équations en volumes.

Ces outils permettent d'aborder des géométries complexes

- sans difficulté de génération de maillage
- sans augmenter le coût de calcul.

Ils permettent aussi de bien gérer un changement de topologie d'une géométrie au cours du temps.

Ce travail a été aussi l'occasion pour moi d'améliorer d'une part, ma compréhension par rapport à l'utilité des calculs scientifiques au profit des autres domaines (physique, biologie ...), notamment l'interprétation physique des formules mathématiques intervenant dans ces calculs et d'autre part, mon niveau de programmation notamment en C++ grâce à l'utilisation de la librairie *Rheolef*.

Rheolef est un environnement de programmation développé en C++, qui peut être utilisé pour tester des calculs éléments finis, et fournit beaucoup de structures de données et d'algorithmes (voir [2]).

5.5 Perspectives

Tout d'abord, nous allons appliquer notre modèle de convection-diffusion couplé avec l'équation de Stokes explicitée en Annexe au problème d'écoulement de Marangoni en résolvant les problèmes rencontrés lors de cette étape du stage. Cela constituera un très bon test de notre modèle avant son éventuelle utilisation dans le cadre d'un autre travail.

Ce travail se poursuivra en thèse qui s'intitule *Modélisation numérique de l'adhésion cellulaire*.

L'objet de cette thèse est d'utiliser la modélisation numérique pour mieux appréhender le phénomène d'adhésion cellulaire, un mécanisme fondamental en biologie cellulaire, sa compréhension permettrait d'améliorer certaines thérapies, notamment contre le cancer, en comprenant mieux l'invasivité des cellules cancéreuses.

5.6 Planning

Dans l'état actuel de mon travail j'ai établi le diagramme suivant des tâches accomplies et à faire jusqu'au 16 septembre.

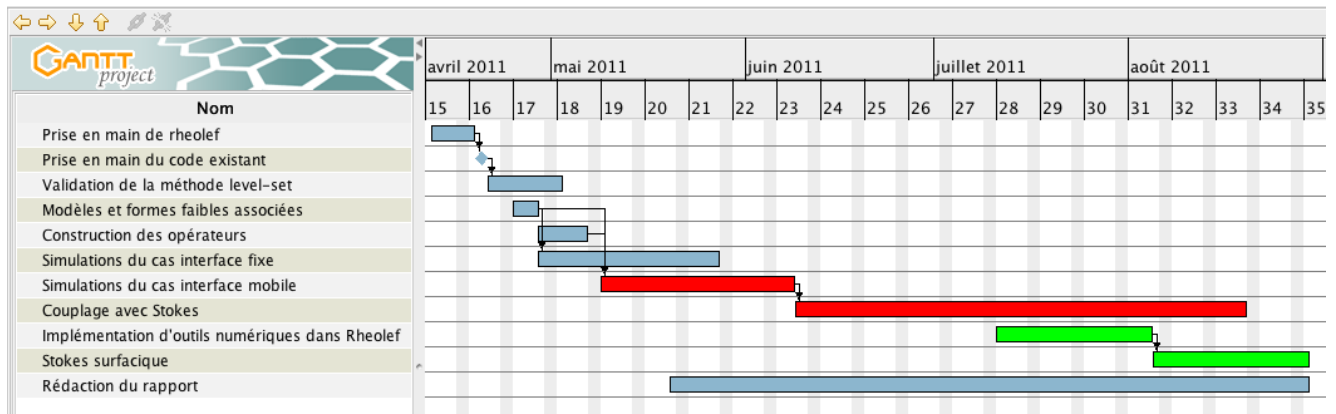


FIGURE 5.1 – Diagramme de Gantt

Les tâches colorées en :

- rouge désignent celles qui n'ont pas été réalisées selon la prévision initiale
- vert désignent celles qui ont été rajoutées selon la prévision initiale

Chapitre 6

Annexes

Contents

6.1	Principe de la détermination de la concentration $C_{\Gamma_h}^n$	
	sur B_h^{n+1}	43
6.2	Détermination de la vitesse : équation de Stokes	44
6.3	Calcul de la forme bilinéaire r	45

6.1 Principe de la détermination de la concentration $C_{\Gamma_h}^n$ sur B_h^{n+1}

Pour passer de l'instant t_n à t_{n+1} , nous avons besoin de la concentration $C_{\Gamma_h}^n \in B_h^n$ qu'on veut évaluer à l'instant t_{n+1} sur B_h^{n+1} à l'aide des caractéristiques (voir sur la figure (6.1)). Le principe se divise en deux phases :

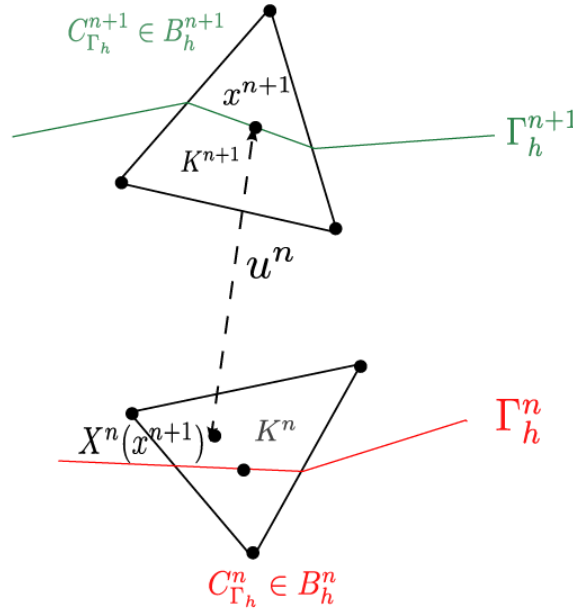


FIGURE 6.1 – Passage de B_h^n à B_h^{n+1}

- **Première phase**

Soit $W_h^{n+1} = \{v_h \in C^0(\Gamma_h^{n+1}), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in \Gamma_h^{n+1}\}$.

Cette phase consiste principalement à déterminer la concentration $C_{\Gamma_h}^n(X^n(x))$ dans W_h^{n+1} , donc sur Γ_h^{n+1} qu'on note $C_{W_h}^n$. On la construit par interpolation en utilisant la méthode des caractéristiques :

$$C_{W_h}^n(x) = C_{\Gamma_h}^n(X^n(x)) \text{ pour } x \in \Gamma_h^{n+1}$$

- **Deuxième phase**

Cette phase consiste à déterminer la concentration $C_{\Gamma_h}^n \in B_h^{n+1}$ en prolongeant $C_{W_h}^n$ sur la bande. Pour cela, on utilise l'opérateur P_h défini dans le chapitre 2 comme suit :

$$C_{\Gamma_h}^n = P_h(C_{W_h}^n)$$

6.2 Détermination de la vitesse : équation de Stokes

La vitesse de la membrane est déterminée par l'équation de Stokes dans Λ , avec comme conditions aux limites la force de Marangoni :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \nabla p - \operatorname{div}(2\mu D(u)) = 0 & \text{dans } \Lambda \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } \Lambda \\ [u]_{\Gamma} = 0 & \\ [-pI + 2\mu D(u)]_{\Gamma} \cdot n = F_{\gamma} & \text{sur } \Gamma \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Lambda \end{array} \right. \quad (6.1)$$

où

- u est la vitesse du fluide
- p est la pression
- F_{γ} est la force de Morangoni, $F_{\gamma} = K\gamma n + \nabla_{\Gamma}\gamma$
- K est la courbure de la surface
- $\gamma = \gamma(C_{\Gamma})$ est la tension de surface
- D est le tenseur défini par : $2D(u) = (\nabla u + (\nabla u)^T)$

En faisant le produit scalaire L^2 de l'équation (6.1) avec un couple de fonctions tests (v, q) associé au couple (u, p) , on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\int_{\Lambda} p \operatorname{div} v dx + \int_{\Lambda} 2\mu D(u) : D(v) dx - \int_{\Gamma} ([-pI + 2\mu D(u)]_{\Gamma} \cdot n) \cdot v ds = 0 & \forall v \in H^1(\Lambda)^2 \\ \int_{\Lambda} q \operatorname{div} u dx = 0 & \forall q \in L^2(\Lambda) \end{array} \right.$$

La formulation variationnelle associée à cette équation est la suivante :

(VF3) Trouver $(u, p) \in H_0^1(\Lambda)^2 \times L^2(\Lambda)$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\int_{\Lambda} p \operatorname{div} v dx + \int_{\Lambda} 2\mu D(u) : D(v) dx = \int_{\Gamma} F_{\gamma} \cdot v ds & \forall v \in H_0^1(\Lambda)^2 \\ \int_{\Lambda} q \operatorname{div} u dx = 0 & \forall q \in L^2(\Lambda) \end{array} \right. \quad (6.2)$$

Par ailleurs, comme dans la formulation forte (6.1), le champ p ne peut être défini qu'à une constante additive près, une façon d'éliminer cette indétermination consiste à remplacer $L^2(\Lambda)$ par son sous-espace constitué des fonctions à moyenne nulle :

$$L_0^2(\Lambda) = \left\{ v \in L^2(\Lambda); \int_{\Lambda} v d\Lambda = 0 \right\}$$

Donc conformément à ([5], page 56), on tient compte de cette contrainte aussi de façon variationnelle comme suit :

Trouver $(u, p) \in H_0^1(\Lambda)^2 \times L_0^2(\Lambda)$ tel que :

$$\left\{ \begin{array}{ll} h(u, v) + s(v, p) = l(v) & \forall v \in H_0^1(\Lambda)^2 \\ s(u, q) = 0 & \forall q \in L_0^2(\Lambda) \end{array} \right. \quad (6.3)$$

où

$$\begin{aligned} h(u, v) &= \int_{\Lambda} 2\mu D(u) : D(v) dx \\ s(u, v) &= - \int_{\Lambda} v \operatorname{div} u dx \\ l(v) &= - \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma} C_{\Gamma} \cdot v ds \end{aligned}$$

On utilise donc l'espace $\Lambda_h = H_0^1(\Lambda) \cap \left\{ v_h \in C^0(\Lambda), v_{h|_K} \in \mathbb{P}_2(K), \forall K \in T_h \right\}$ et $Q_h = L_0^2(\Lambda) \cap \left\{ q_h \in C^0(\Lambda), q_{h|_K} \in \mathbb{P}_1(K), \forall K \in T_h \right\}$ pour la discrétisation éléments finis du problème (6.3) qui devient :
Trouver $(u_h, p_h) \in \Lambda_h^2 \times Q_h$ tel que :

$$\begin{cases} h(u_h, v_h) + s(v_h, p_h) = l(v_h) & \forall v_h \in \Lambda_h^2 \\ s(u_h, q_h) = 0 & \forall q_h \in Q_h \end{cases} \quad (6.4)$$

Le système (6.4) s'écrit matriciellement comme suit :

$$\begin{pmatrix} H & S^T \\ S & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_h \\ 0 \end{pmatrix}$$

Remarque

Comme Γ varie au cours du temps ($\Gamma = \Gamma(t)$) alors il faut résoudre le système (6.4) à chaque pas de temps puisque que le second membre du système dépend de Γ .

6.3 Calcul de la forme bilinéaire r

Soit $B_h^0 = \{f_h \in P_0(K), K \in \beta_h\}$, on note $N = \dim B_h$ et $N_0 = \dim B_h^0$. Soient $V \in \mathbb{R}^{dN}$ et $F \in \mathbb{R}^{dN_0}$ les vecteurs représentant les valeurs nodales de v_h et f_h dans B_h^3 et $(B_h^0)^3$ respectivement.

Actuellement, `rheolef` ne permet pas de calculer la forme bilinéaire

$$r(v, f) = \int_{\Gamma} (\operatorname{rot} v) \cdot f ds.$$

En revanche, on peut calculer sur β_h

$$r^{\beta}(v, f) = \int_{\beta_h} (\operatorname{rot} v) \cdot f dx,$$

et

$$m(f, g) = \int_{\beta_h} f \cdot g dx,$$

et par ailleurs

$$m_{\Gamma}(f, g) = \int_{\Gamma} f \cdot g ds.$$

On peut donc envisager de résoudre tout d'abord le problème de trouver $\omega = \text{rot}u_h$ tel que

$$m(\omega, g) = r^\beta(u, g) \quad \forall g \in (B_h^0)^3 \quad (6.5)$$

puis intégrer ω sur la surface Γ en utilisant m_Γ :

$$m_\Gamma(\omega, g) \quad (6.6)$$

Cependant cela ne donne pas directement la forme bilinéaire r , qui est nécessaire pour l'assemblage du problème aux éléments finis (car u_h est inconnu au moment de l'assemblage). Il faut donc inverser (6.5) pour pouvoir regrouper (6.5) et (6.6).

Soit R^β le représentant de Riesz de r^β sur $B_h \times (B_h^0)^3$, c'est une matrice telle que :

$$\langle f_h, R^\beta v_h \rangle = r^\beta(v_h, f_h) \quad \forall (v_h, f_h) \in B_h^3 \times (B_h^0)^3$$

On a $R^\beta v_h \in [(B_h^0)^3]'$, R^β est une matrice de taille $N_0 \times N$.

Soit M_0 le représentant de Riesz de m sur $(B_h^0)^3 \times (B_h^0)^3$, c'est une matrice de taille $N_0 \times N_0$ dont les coefficients non-nuls sont tous diagonaux. On peut donc calculer directement son inverse M_0^{-1} .

On peut alors réécrire (6.5) et (6.6) :

$$\begin{aligned} \langle M_0 \omega, g \rangle &= \langle g, R^\beta u \rangle & \forall g \in (B_h^0)^3 \\ \Leftrightarrow M_0 \omega &= R^\beta u \\ \Leftrightarrow \omega &= M_0^{-1} R^\beta u \end{aligned} \quad (6.7)$$

et

$$r(u, g) = m_\Gamma(M_0^{-1} R^\beta u, g) \quad (6.8)$$

Cette dernière équation donne une définition calculable de r sur $B_h^3 \times B_h^3$. Pour expliciter la matrice correspondant, il faut écrire le représentant de Riesz de m_Γ . Ici, m_Γ est appliquée aux espaces B_h^3 pour son second argument et $(B_h^0)^3$ pour son premier : le représentant M_Γ^{10} sera donc de taille $N_0 \times N$.

$$r(u, g) = \langle M_\Gamma^{10} g, (M_0^{-1} R^\beta u) \rangle \quad (6.9)$$

$$= \langle (M_0^{-1} R^\beta)^T M_\Gamma^{10} g, u \rangle \quad (6.10)$$

Cette dernière formulation fournit une écriture du représentant de Riesz R de r sur $B_h^3 \times (B_h^0)^3$. On aura alors

$$C_r = ((Re_0)^T \dots (Re_{d-1})^T)$$

Bibliographie

- [1] LARA ABOUORM. Méthodes mathématiques pour les écoulements sur des surfaces. Rapport de stage M2R mathématiques appliqués, UJF Grenoble, 2010.
- [2] P. SARAMITO and J. ETIENNE. Efficient C++ finite element computing with Rheolef. Version 5.93 update 22 March 2011
- [3] ALAN DEMLOW AND G. DZIUK. An adaptive finite element method for the laplace-beltrami operator on implicitly defined surfaces. AMS subject classification. 58J32, 65N15, 65N30
- [4] MAXIM A. OLSHANSKII, ARNOLD REUSKEN, AND JÖRG GRANDE. An eulerian finite element method for elliptic equations on moving surfaces. AMS subject classifications. 58J32, 65N15, 65N30, 76D45, 76T99
- [5] E. BECACHE, P. CIARLET, C. HAZARD et E. LUNEVILLE. La méthode des éléments finis, de la théorie à la pratique. © Les Presses de l'ENSTA, 2010. ISBN 978-2-7225-0917-7
- [6] J. ETIENNE, J. LOHEAC, AND P. SARAMITO. An Lagrange multiplier approach for the numerical simulation of an inextensible membrane or thread immersed in a fluid. AMS subject classification. 65M60, 74K05, 74K15, 74F10, 76D05, 76D07
- [7] B. CUENOT, J. MAGNAUDET, AND B. SPENNATO. The effects of slightly soluble surfactants on the flow around a spherical bubble. J. Fluid Mech. (1997), vol. 339, pp. 25–53 Copyright © 1997 Cambridge University Press
- [8] M. MURANDOGLU and G. TRYGGVASON. Front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactant. Journal of Computational Physics, 227 :2238-2262, 2008.

Table des figures

1.1	Écoulement de surface : à gauche, turbulence sur un film de savon ; à droite, membrane fluide d'un globule rouge.	6
2.1	Géométrie	10
2.2	Surface polygonale Γ_h	11
2.3	La bande β_h ainsi que le maillage intersecté de Γ_h	12
2.4	Maillage induit Γ_h dans le cas d'une sphère et un extrait	12
2.5	Exemple de bande avec 4 composantes connexes	13
2.6	Triangle K	15
3.1	Maillage régulier du tore	20
3.2	Solution approchée u_h	20
3.3	Maillage obtenu par intersection	21
3.4	Solution approchée u_h	21
3.5	Bande	23
3.6	Maillage régulier du volume	23
3.7	Solution approchée u_h sur bande	23
3.8	Restruction de u_h sur Γ	23
3.9	Erreur en norme L^2 sur les trois méthodes	24
4.1	Géométrie	27
4.2	Solution approchée C_{Γ_h}	33
4.3	Solution approchée C_h	33
4.4	Erreur en norme L_2	33
4.5	n = 200	34
4.6	n = 600	34
4.7	n = 1000	35
4.8	n = 1400	35
5.1	Diagramme de Gantt	41
6.1	Passage de B_h^n à B_h^{n+1}	43