

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE D'**E.D.P.** POUR LA SIMULATION

Jeremie Dequidt
Université de Lille 1

PRÉSENTATION

- ❖ MCF Université de Lille 1
- ❖ Membre de l'équipe *Shacra* (LIFL & INRIA)
- ❖ Modélisation *Bioméca* / Géom, Simulation guidée par l'image, *Réalité Augmentée* pour la chirurgie
- ❖ dequidt.plil.net

OBJECTIFS DU COURS

- ❖ Introduction générale à la résolution numérique de problèmes *physiques*
- ❖ Présentation de *modèles 1D* utilisés en simulation médicale
- ❖ Introduction aux cours suivants sur les éléments finis pour les modèles *bio-mécaniques* et *patient-specific*

ORGANISATION

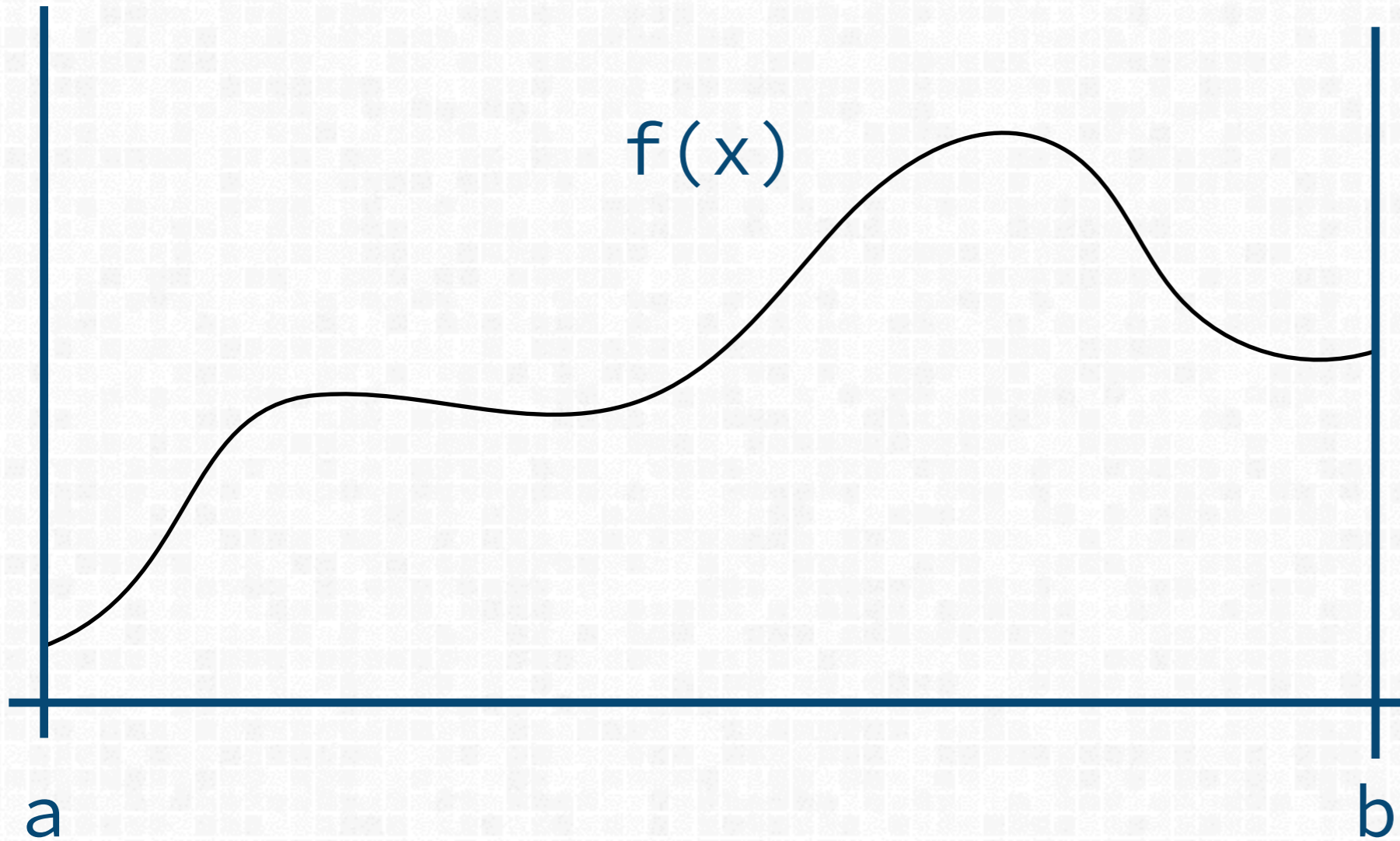
- ❖ Partie théorique de ~1h30
- ❖ Partie pratique en scilab ~1h (surtout différences finies)
- ❖ Approche utilisateur des éléments finis (i.e. minimum de théorèmes mathématiques et pas / peu de démonstrations)

1. INTRODUCTION

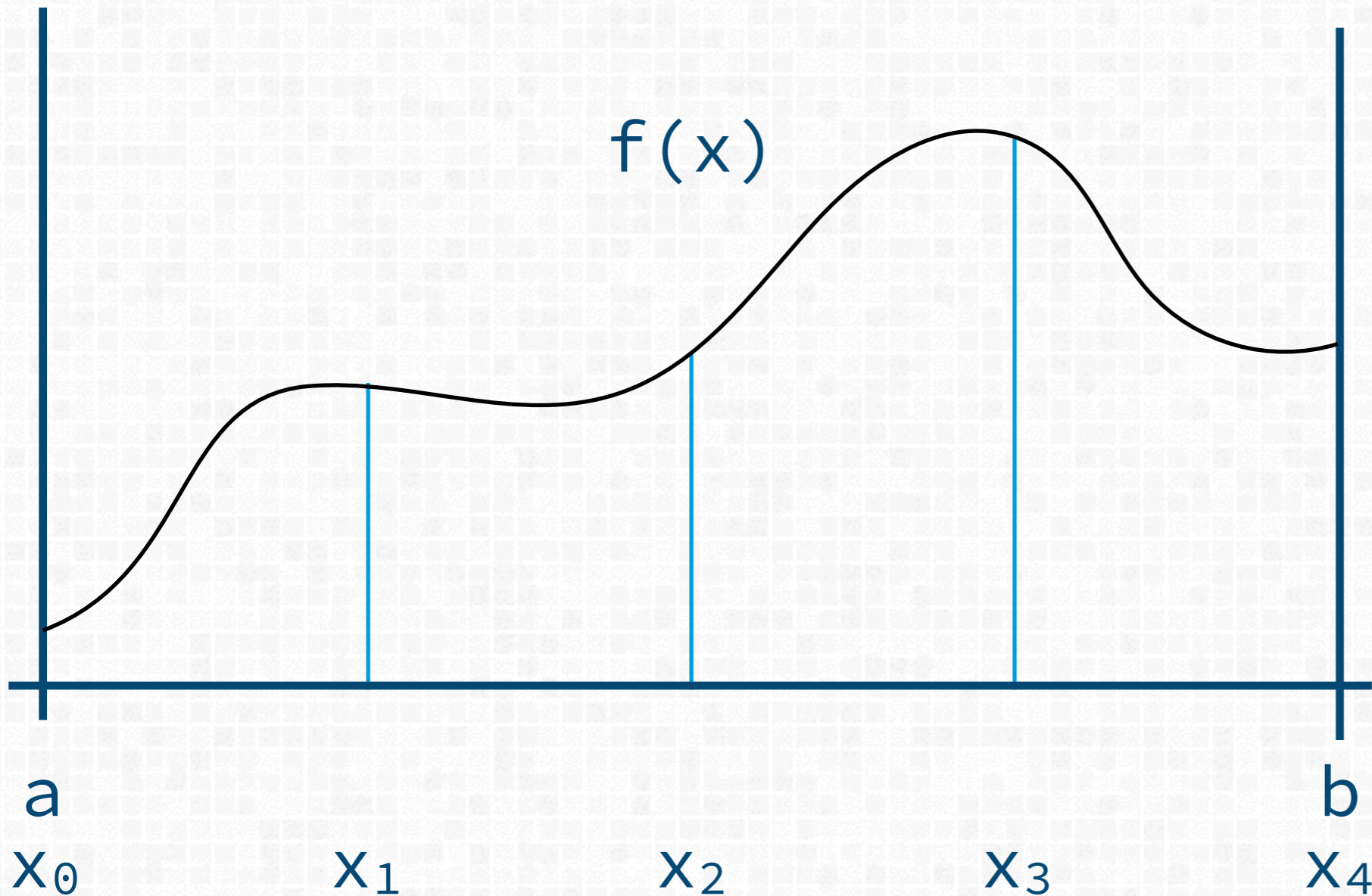
RÉSOLUTION NUMÉRIQUE

- ❖ Problèmes courants en ingénierie sont complexes
- ❖ Pas de solution analytique
- ❖ Utilisation de la puissance de calcul des ordinateurs pour obtenir une solution approchée

ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE

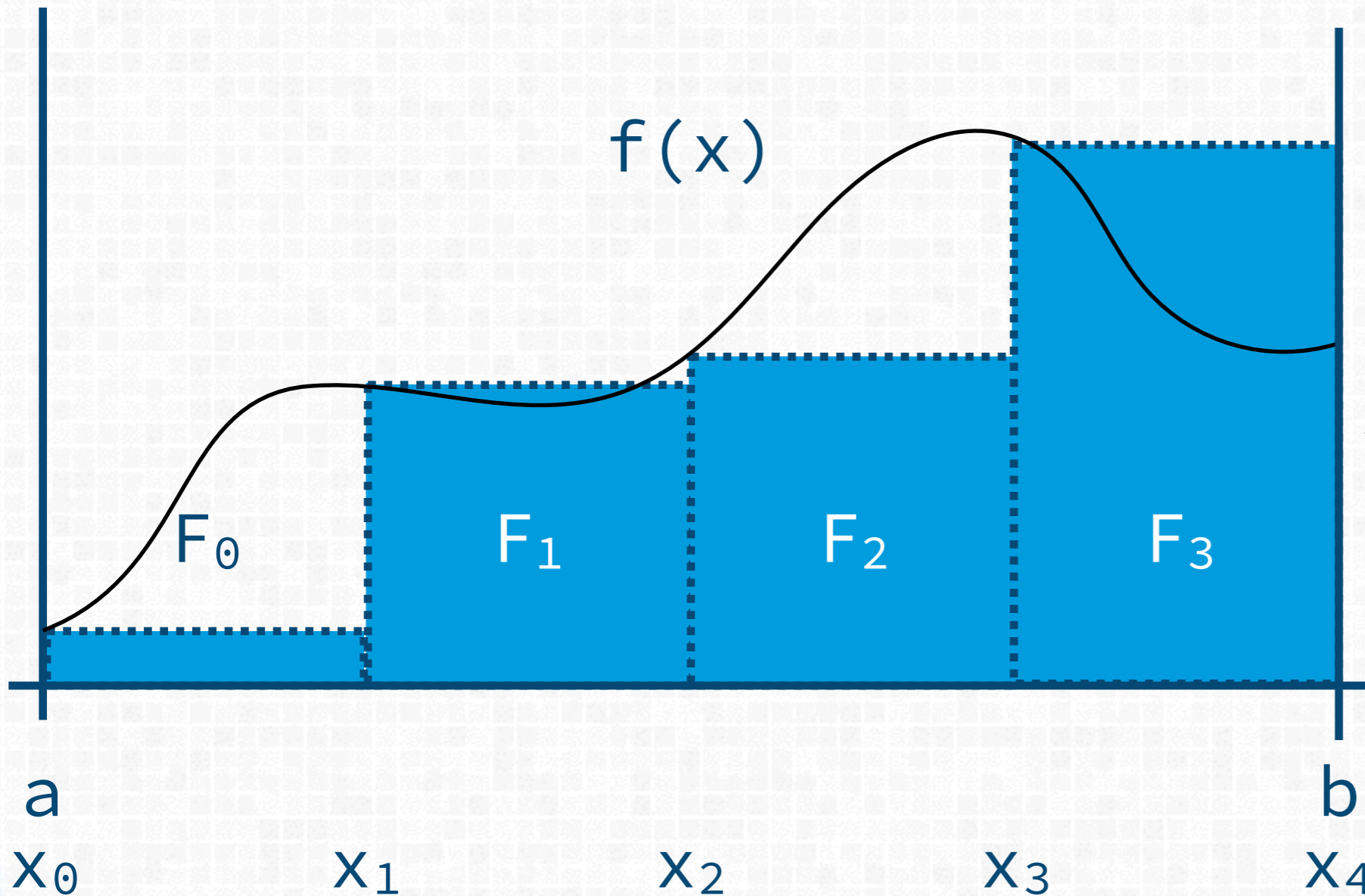


ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE



1. Discrétisation du domaine

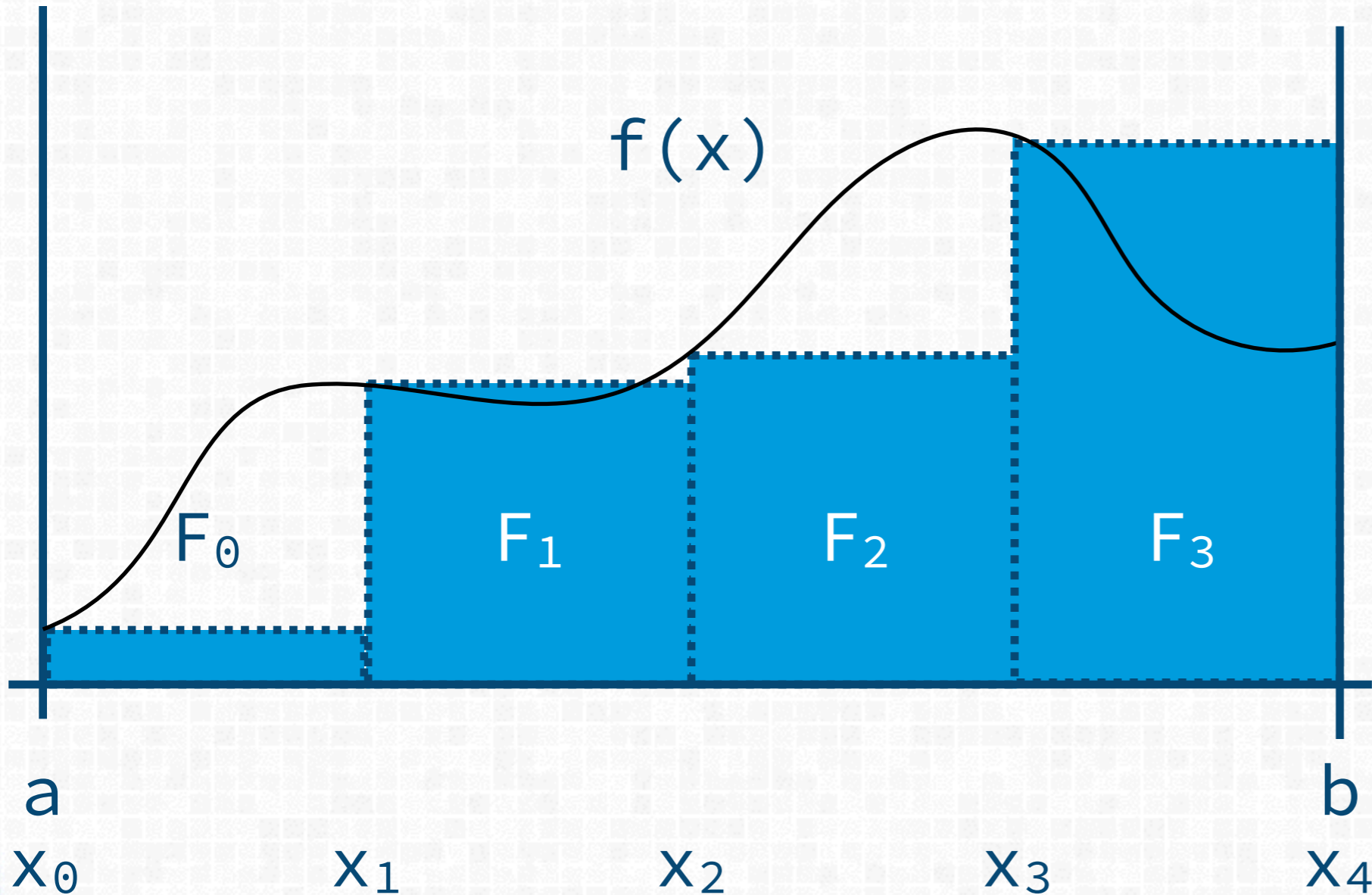
ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE



$$F_i = (x_{i+1} - x_i) \times f(x_i)$$

2. Calcul sur un élément

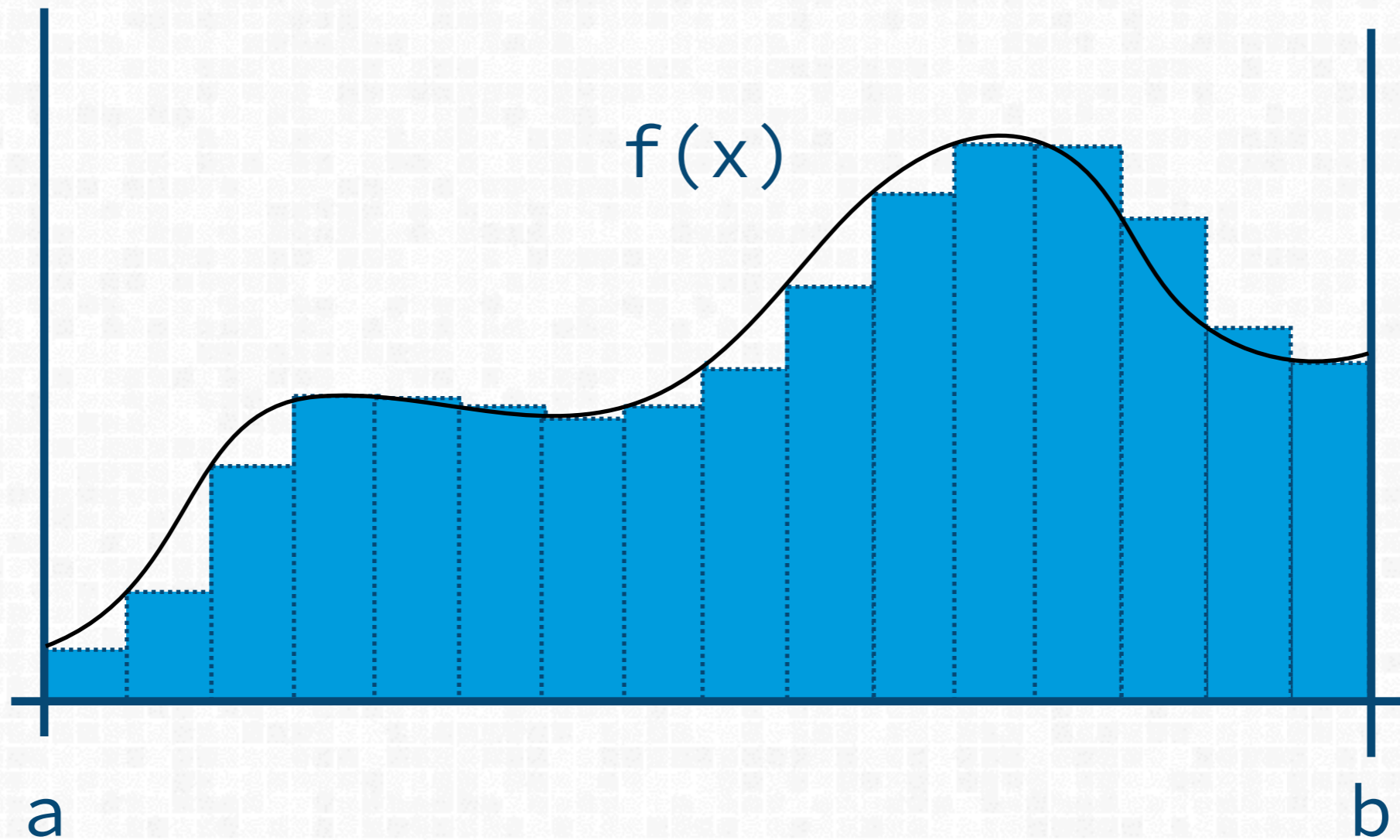
ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE



$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_i F_i$$

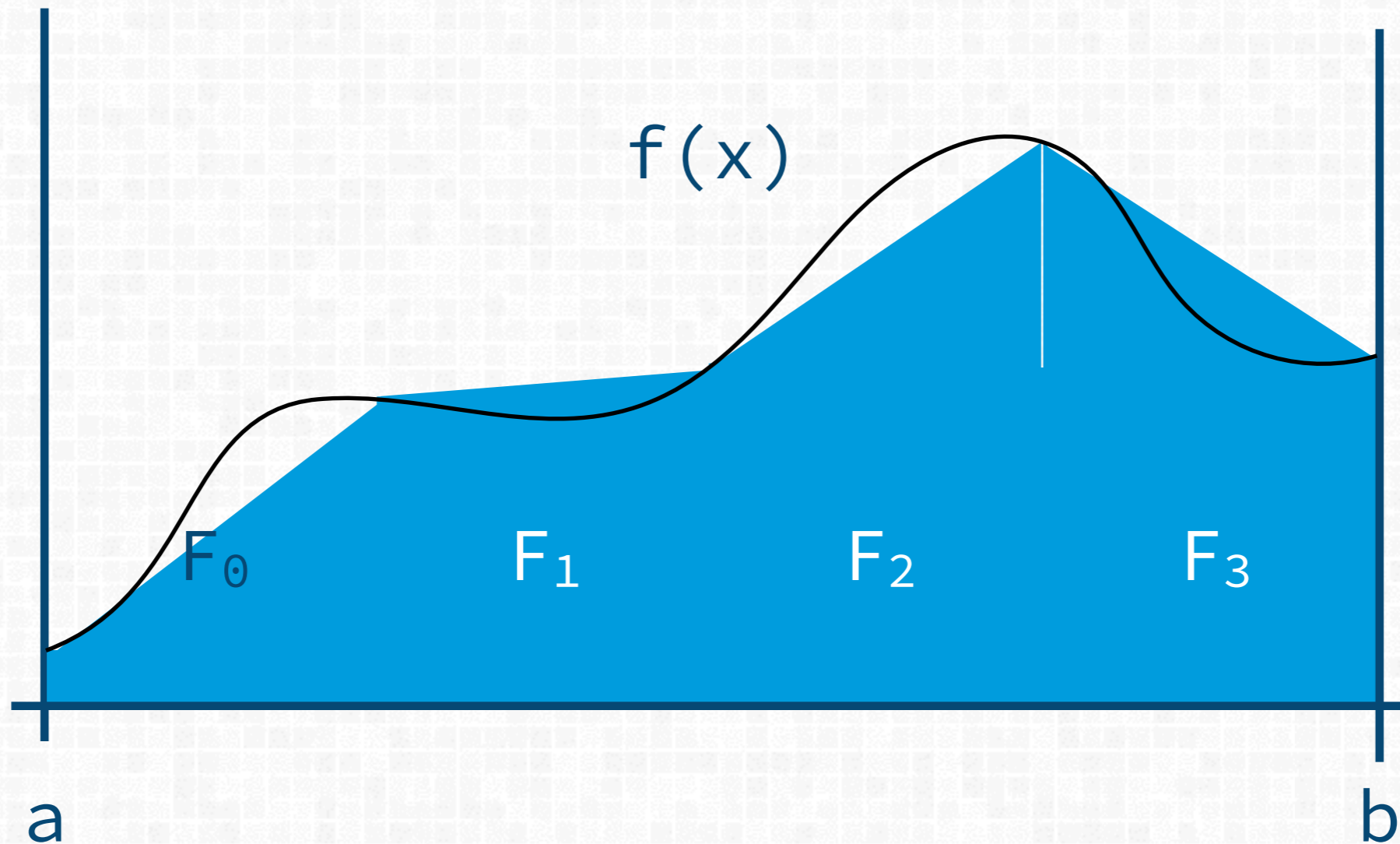
3. Assemblage

ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE



Précision / Erreur liée à la discrétisation

ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE



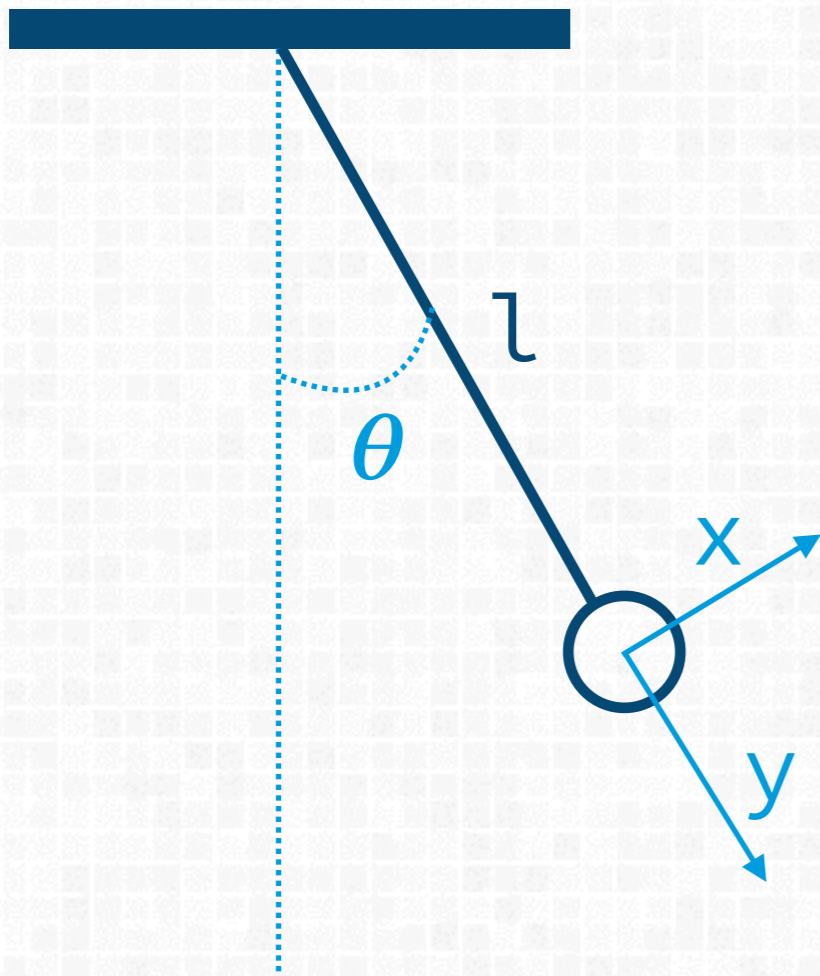
Précision / Erreur lié à l'approximation locale

ANALOGIE / EXEMPLE SIMPLE

- ❖ Mais aussi:
 - ❖ erreurs de codage (float / double)
 - ❖ régularité de l'échantillonnage
 - ❖ homogénéité / hétérogénéité des éléments
 - ❖ estimation de l'erreur...

2. EQUATIONS DIFFÉRENTIELLES POUR LA SIMULATION MÉDICALE

UN EXEMPLE TOUT SIMPLE



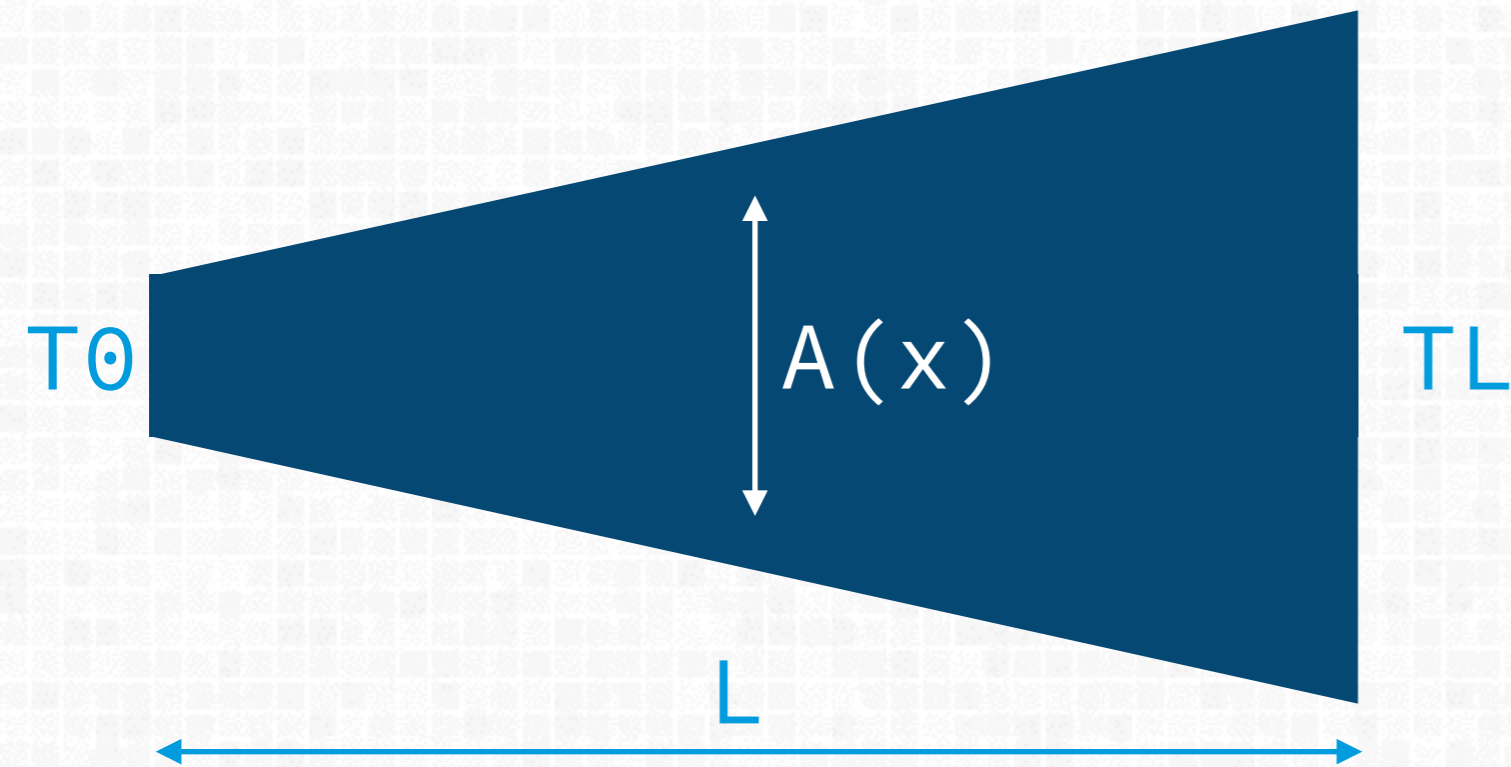
$$\sum F = m \times a$$

$$F_x = m \times \frac{\partial v_x}{\partial t}$$

$$-mg \sin \theta = ml \frac{d^2 \theta}{dt^2}$$

$$\frac{d^2 \theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0$$

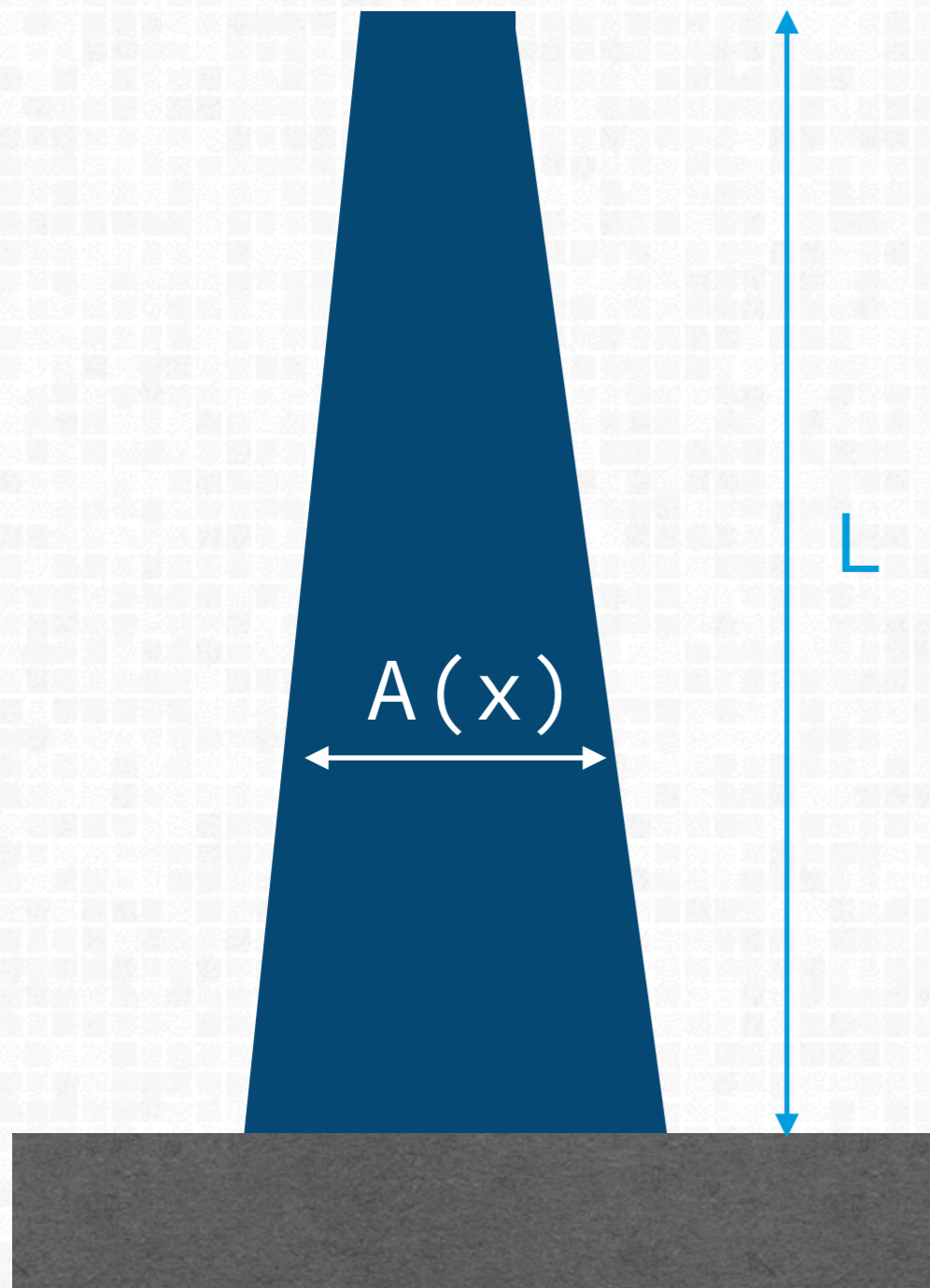
TRANSFERT THERMIQUE



P : périmètre
 β : conductance de l'interface
 k : conductivité thermique du matériel
 g : source de chaleur

$$-\frac{d}{dx} \left(kA \frac{dT}{dx} \right) + \beta P (T - T_L) = Ag$$

MÉCANIQUE



E : module de Young
 u : déplacement

$$\frac{d}{dx} \left(EA \frac{du}{dx} \right) + gA = 0$$

GÉNÉRALISATION... (1D)

$$-\frac{d}{dx} \left(a \frac{du}{dx} \right) + cu - f = 0$$

Domaine	u	a	c	f	Cond. Init.
Transfert Therm.	T (température)	kA	APβ	f	Q (chaleur)
Flux média poreux	ϕ (front)	EA	0	f	Q (source ponctuelle)
Flux tuyaux	P (pression)	1/R	0	0	Q (source ponctuelle)
Flux visqueux	v _x	μ	0	-dP/dx	σ _{xy}
Cables	u (déplacement)	T	0	f	P force ponctuelle
Barres élastiques	u (déplacement)	EA	0	f	P force ponctuelle
Torsion de barres	θ (angle)	GJ	0	0	T couple
Electrostats	ϕ (potentiel elec)	ε	0	ρ	E flux électrique

GÉNÉRALISATION... (2D)

$$-\nabla \cdot (k \nabla u) = f$$

Domaine	u	k	f
Transfert Therm.	T (température)	k	g
Flux laminaire	ψ (flux)	ρ	σ
Flux souterrain	ϕ (potentiel de vitesses)	K	f
Torsion de cylindres	Ψ (fonction de stress)	G	θ
Electrostatique	ϕ (potentiel)	ϵ	ρ
Magnetostatique	ϕ (potentiel magnétique)	μ	ρ
Membranes	u (déflexion transverse)	T	F

EN RÉSUMÉ

- ❖ Un grand nombre de problèmes scientifiques et d'ingénierie sont modélisés par des E.D (ordinaires / dérivées partielles)
- ❖ Forme des E.D. assez générique
- ❖ Solution unique si conditions initiales et/ou aux limites sont connues.

3. DIFFÉRENCES FINIES

EXEMPLE SIMPLE (EDO)

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(t, u) \\ u(t=0) = u_0 \end{cases}$$

$$u(t) = u(t - \varepsilon) + \varepsilon \times u'(t - \varepsilon) + \frac{\varepsilon^2}{2} u''(t - \varepsilon) + \frac{\varepsilon^3}{6} u'''(\zeta_\varepsilon)$$

$$u(t) \approx u(t - \varepsilon) + \varepsilon \times u'(t - \varepsilon)$$

$$u'(t - \varepsilon) \approx \frac{u(t) - u(t - \varepsilon)}{\varepsilon}$$

<= Euler Explicite

EXEMPLE SIMPLE (EDO)

❖ Discrétisation de t en $t_0, t_1, t_2 \dots, t_n$ (chacun espacé de Δt)

❖ Approximation $u_{i+1} = u_i + \Delta t \frac{du_i}{dt}$

$$u_{i+1} = u_i + \Delta t \times f(t_i, u_i)$$

permet de construire historique de u en fonction de t

RETOUR AU PENDULE

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\lambda^2\theta$$

$$v = \frac{d\theta}{dt}, \frac{dv}{dt} = -\lambda^2\theta$$

$$\begin{cases} \theta_{i+1} = \theta_i + \Delta t \times v_i \\ v_{i+1} = v_i - \Delta t \times \lambda^2 \theta_i \end{cases}$$

RETOUR AU PENDULE

- ❖ Schéma numérique sous forme d'une suite qui permet à partir des conditions initiales de trouver la solution
- ❖ Importance du pas de temps, plus il est petit plus l'approximation faite du DL est *valide*

EQUATION DE LA CHALEUR

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} - \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2} = 0, \forall x \in]0, 1[, \forall t \in]0, T[\\ u(0, x) = u_0(x) \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0 \end{array} \right.$$

résolution numérique de cette équation ?

EQUATION DE LA CHALEUR

❖ En reprenant l'exemple précédent:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} \approx \frac{u(t + \varepsilon, x) - u(t, x)}{\varepsilon}, \forall x \in]0, 1[$$

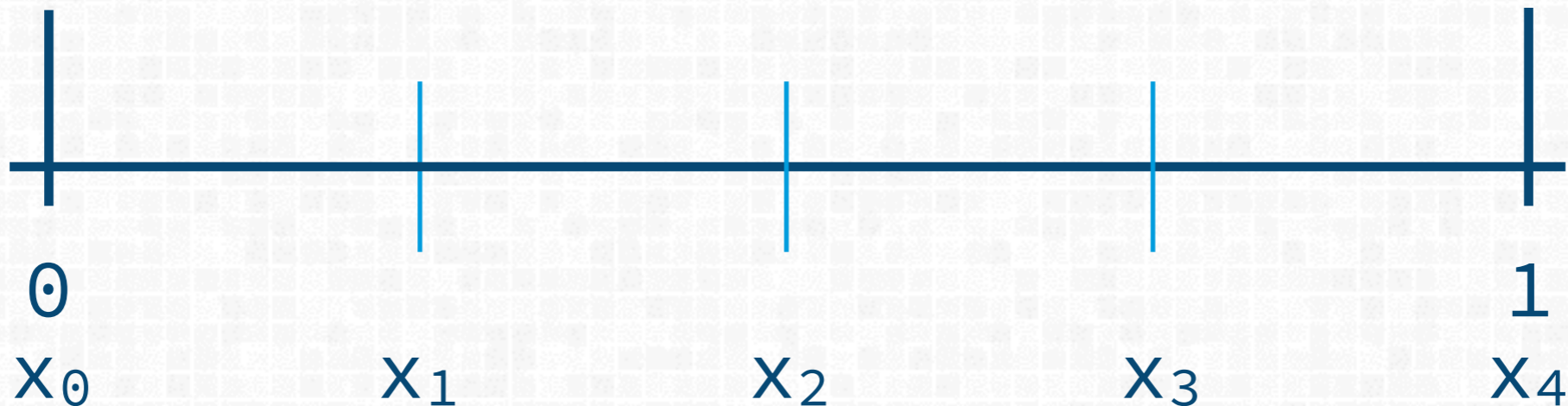
❖ Discrétisation de t en t_j

$$t_j = j \times T / M, j \in [0, M], k = T / M$$

$$\frac{\partial u(t_j, x)}{\partial t} \approx \frac{u(t_{j+1}, x) - u(t_j, x)}{\varepsilon}, \forall x \in]0, 1[, \forall j \in [0, M]$$

EQUATION DE LA CHALEUR

❖ Discrétisation de x



$$x_i = i / N, i \in [0, N]$$

Comment évaluer $\frac{\partial^2 u(t, x_i)}{\partial x^2}$?

DE MANIÈRE GÉNÉRALE

$$u(x_{i+1}) = u(x_i) + h \times u'(x_i) + \frac{h^2}{2} u''(x_i) + \frac{\varepsilon^3}{6} u'''(\zeta_i)$$

$$u(x_{i-1}) = u(x_i) - h \times u'(x_i) + \frac{h^2}{2} u''(x_i) - \frac{\varepsilon^3}{6} u'''(\eta_i)$$

permet d'approximer $u''(x)$ par quotient différentiel

$$u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) = 2u(x_i) + h^2 u''(x_i) + O(h^2)$$

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_{i+1}) + u(x_{i-1}) - 2u(x_i)}{h^2}$$

approx. d'ordre 2
(sous certaines conditions)

EQUATION DE LA CHALEUR

Comment évaluer $\frac{\partial^2 u(t, x_i)}{\partial x^2}$?

$$\frac{\partial^2 u(t, x_i)}{\partial x^2} = \frac{u(t, x_{i+1}) + u(t, x_{i-1}) - 2u(t, x_i)}{h^2}$$

$$h = 1 / (N + 1)$$

EQUATION DE LA CHALEUR

❖ Au final:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{u(t_{n+1}, x_i) - u(t_n, x_i)}{k} + \frac{2u(t_n, x_i) - u(t_n, x_{i+1}) - u(t_n, x_{i-1}))}{h^2} = 0 \\ u(0, x_i) = u_0(x_i) \\ u(t_j, x_0) = u(t_j, x_{N+1}) = 0 \end{array} \right.$$

MISE SOUS FORME MATRICIELLE

$$\lambda = k / h^2$$

$$U_m = (u(t_m, x_i)), i = 1 \dots N, m \in [0, M]$$

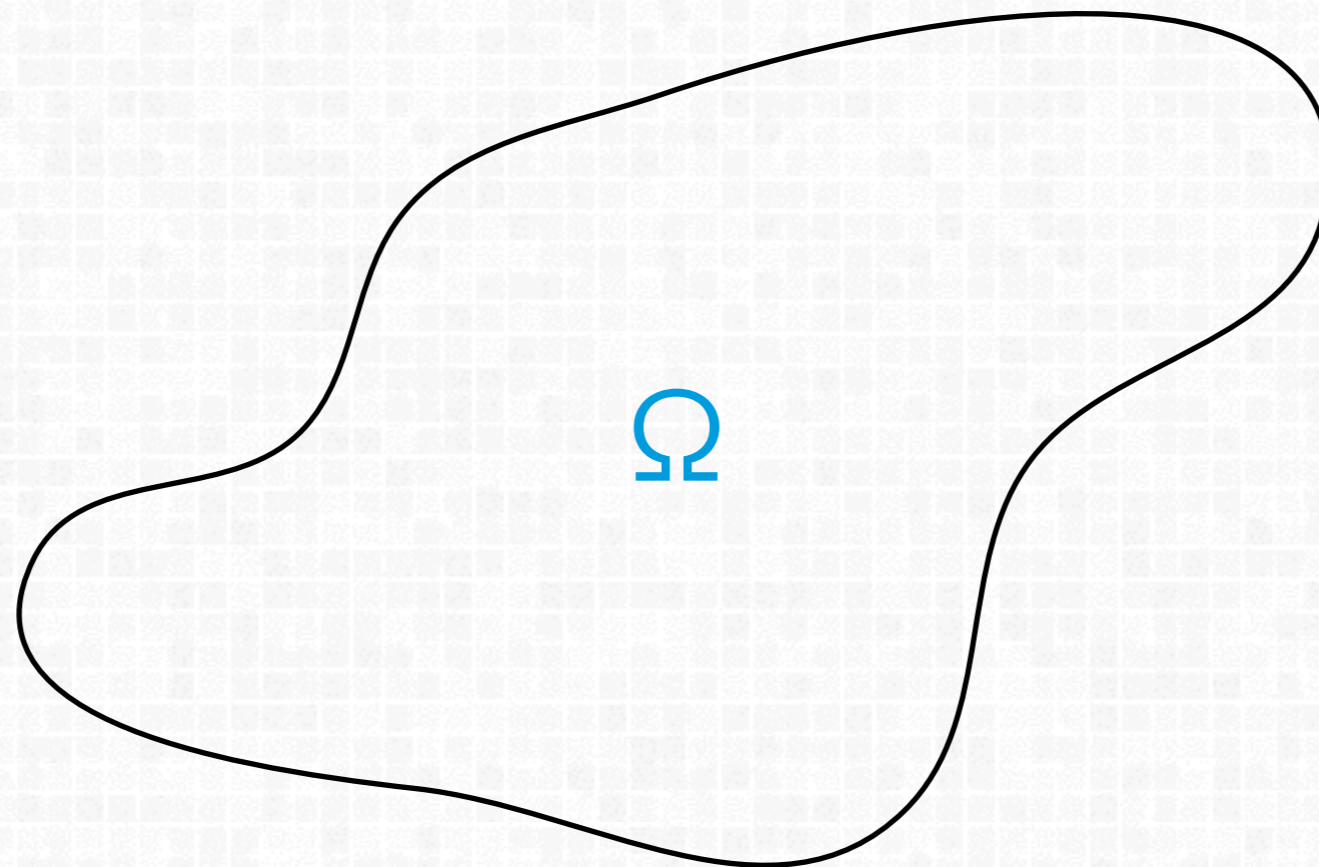
$$U_0 = (u_0(x_i)), i = 1 \dots N$$

$$U_m = A \times U_{m-1}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1-2\lambda & -\lambda & \dots & 0 \\ -\lambda & 1-2\lambda & \dots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & -\lambda \\ 0 & \dots & -\lambda & 1-2\lambda \end{pmatrix}$$

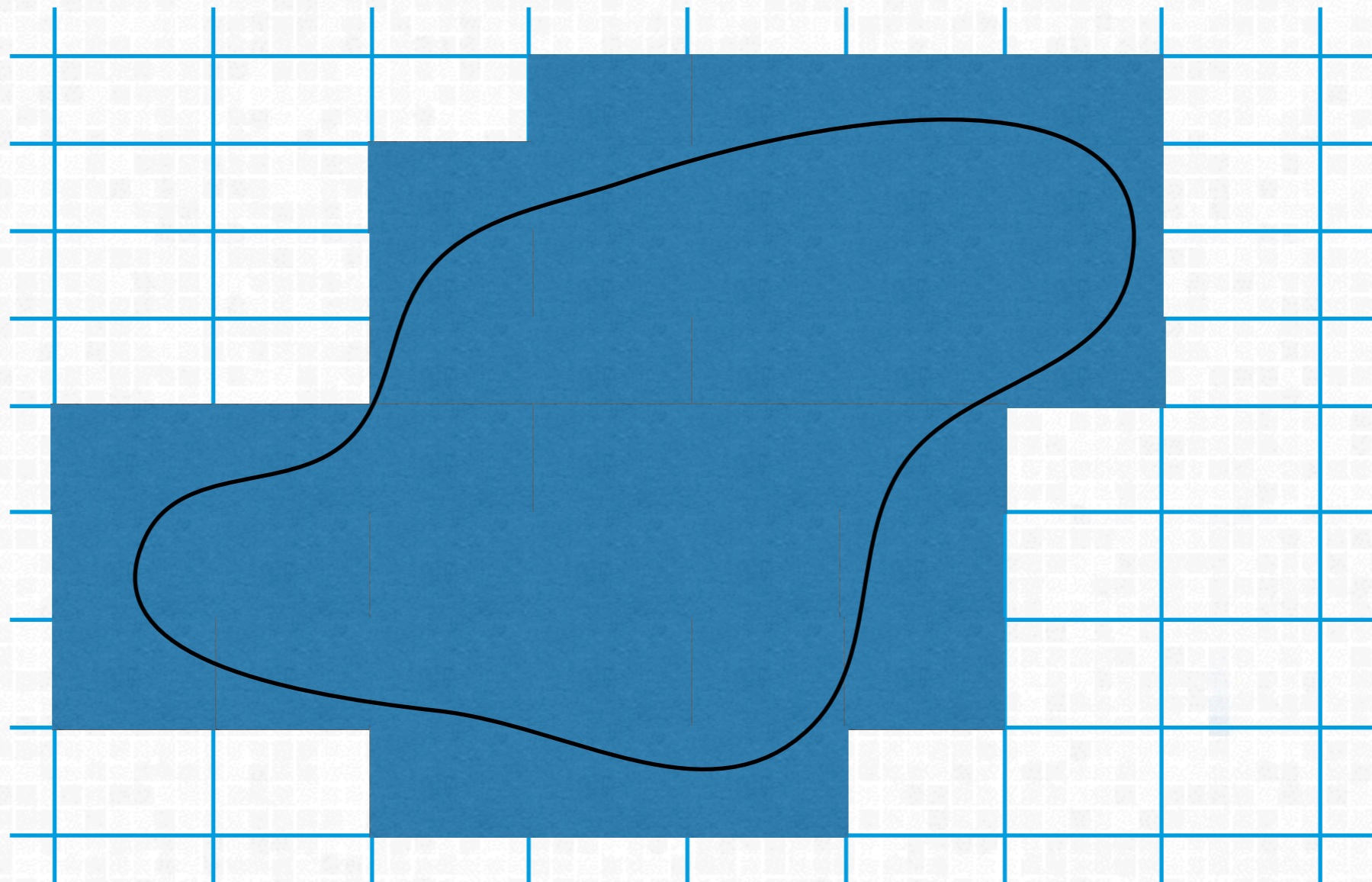
EN DIMENSION 2 ET +

❖ Notion de domaine Ω



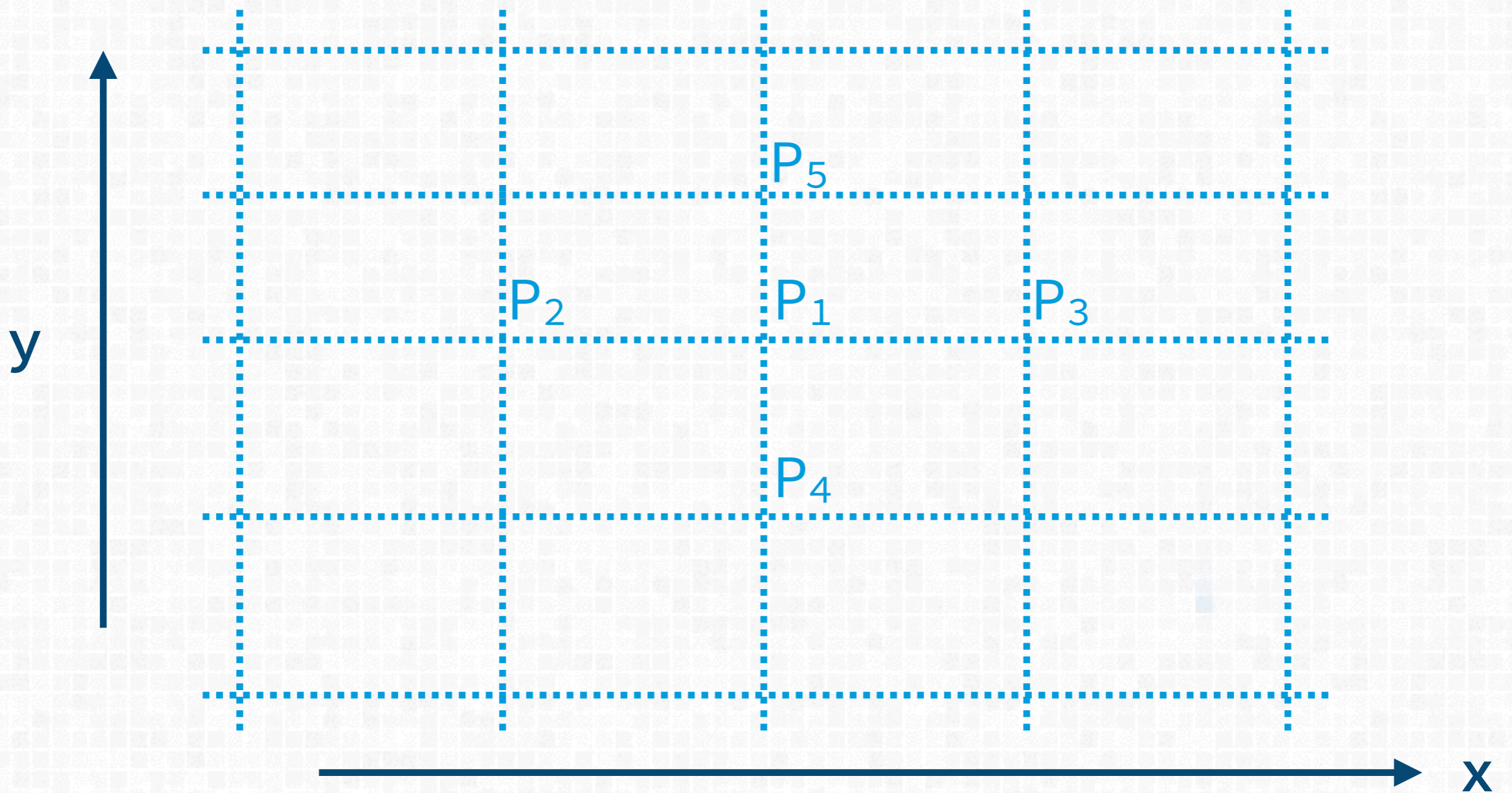
EN DIMENSION 2 ET +

❖ Discrétisation du domaine Ω



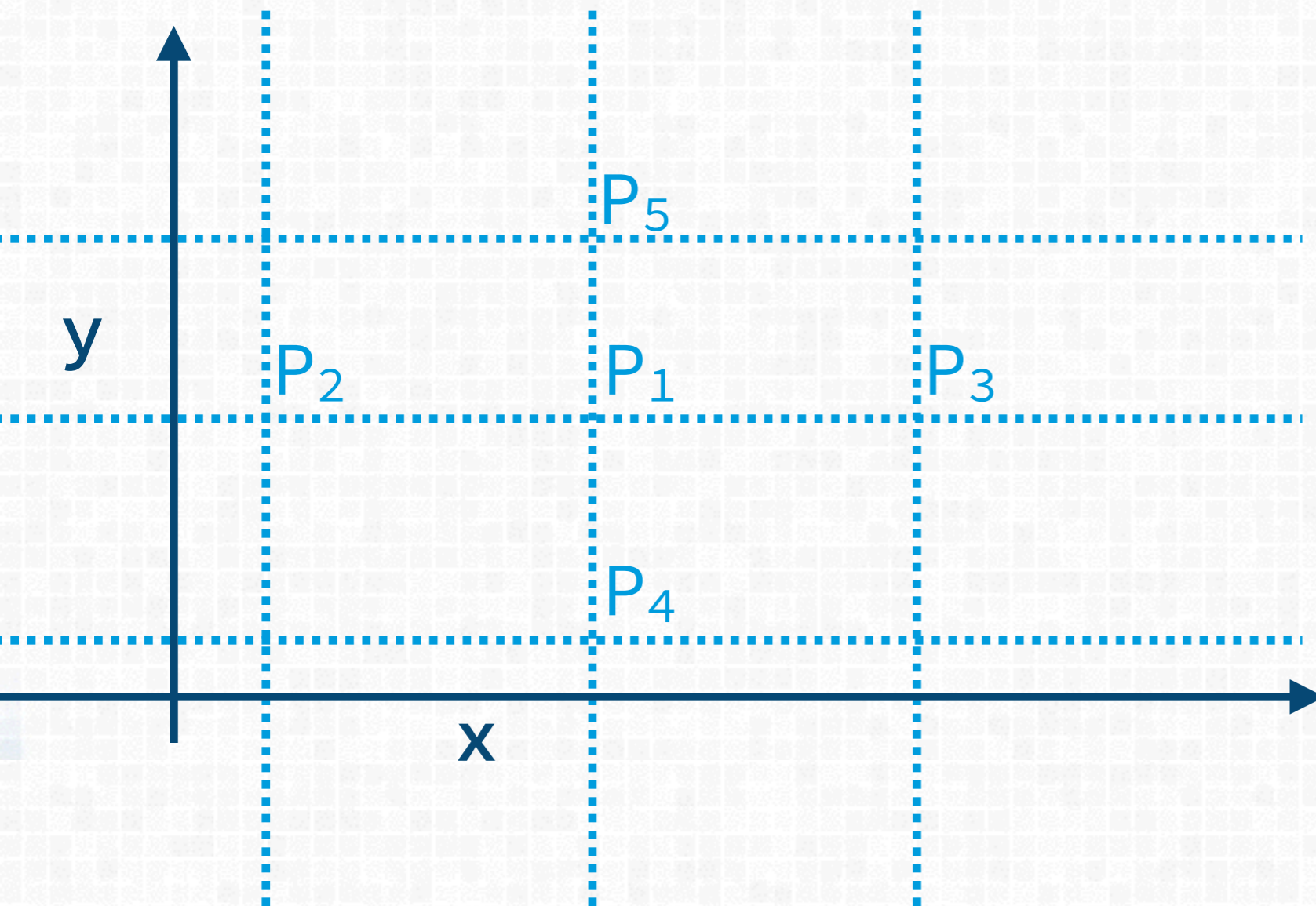
EN DIMENSION 2 ET +

❖ Discrétisation du domaine Ω



EN DIMENSION 2 ET +

❖ Évaluation des dérivées partielles d'ordre 1



$$\frac{\partial u(P1)}{\partial x} \approx \frac{u(P1) - u(P2)}{h}$$

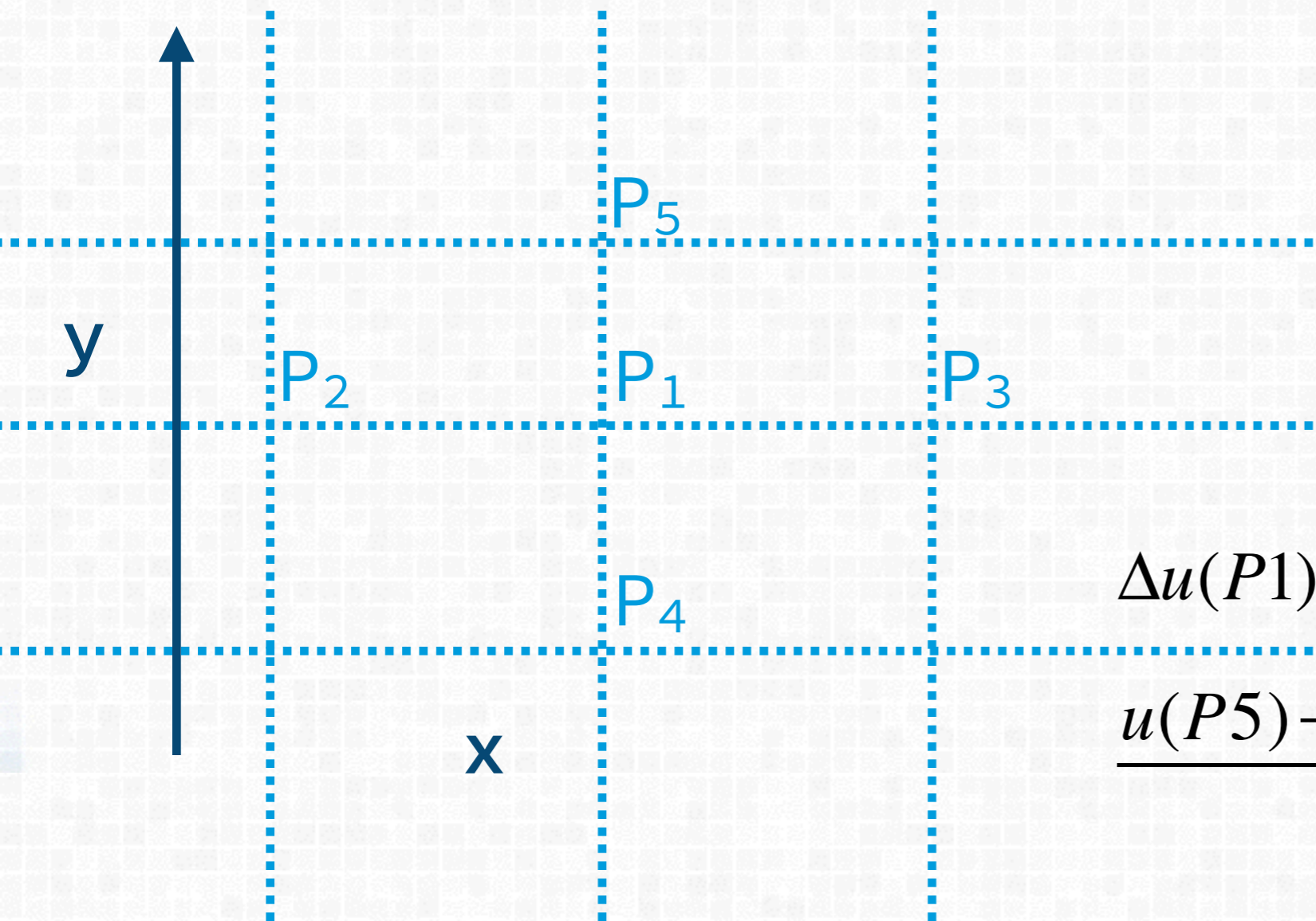
$$\frac{\partial u(P1)}{\partial x} \approx \frac{u(P3) - u(P1)}{h}$$

$$\frac{\partial u(P1)}{\partial y} \approx \frac{u(P1) - u(P4)}{k}$$

$$\frac{\partial u(P1)}{\partial y} \approx \frac{u(P5) - u(P1)}{k}$$

EN DIMENSION 2 ET +

❖ Évaluation des dérivées partielles d'ordre 2

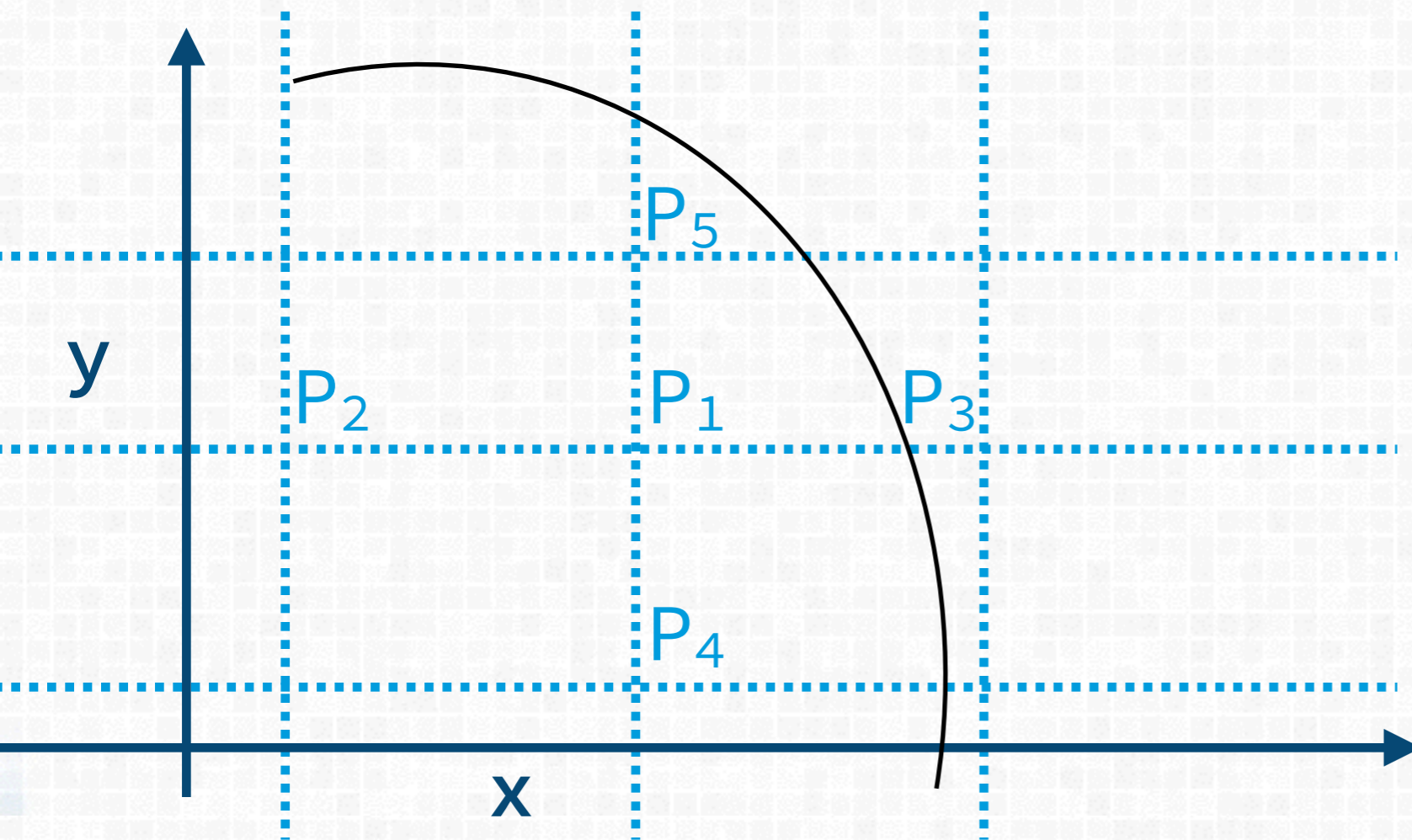


$$\Delta \cdot = \nabla^2 \cdot = \frac{\partial^2 \cdot}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \cdot}{\partial y^2}$$

$$\Delta u(P1) = \frac{u(P2) + u(P3) - 2u(P1)}{h^2} + \frac{u(P5) + u(P4) - 2u(P1)}{k^2}$$

POINT SINGULIER

❖ Évaluation des dérivées partielles



via Taylor

$$\begin{cases} \alpha + \beta + \gamma = 0 \\ -\alpha h_1 + \gamma h_2 = 0 \\ \alpha h_1^2 / 2 + \gamma h_2^2 / 2 = 0 \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 u(P1)}{\partial x^2} + O(h) = \alpha u(P2) + \beta u(P1) + \gamma u(P3)$$

POINT SINGULIER

- ❖ Évaluation des dérivées partielles
 - ❖ erreur de consistance / précision moindre $O(h)$
 - ❖ matrice du système n'est plus symétrique

CONCLUSION

- ❖ Méthode simple à implémenter:
 - ❖ matricielle, creux, (symétrique)
 - ❖ adapté aux discrétisations régulières (grilles)
 - ❖ moins évident / précis pour discrétisation arbitraire

4. VOLUMES FINIS

EXEMPLE SIMPLE

$$-u''(x) = f(x), \forall x \in]0,1[$$

$$u(0) = u(1) = 0$$

Principe des volumes finis, avec un volume de contrôle K

$$\int_K -u''(x) = \int_K f(x)$$

Discrétisation de K : $K = \bigcup K_i$ $K_i =]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[$

EXEMPLE SIMPLE

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} -u''(x) = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x)$$

on pose:

$$f_i = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x)$$

$$u'(x_{i+1/2}) - u'(x_{i-1/2}) = h_i \times f_i$$

i.e passage à ED d'ordre 2 à ordre 1 (égalité des flux à travers les volumes de contrôle)

$$u'(x_{i+1/2}) \approx \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h_i} - \frac{u_{i+1} - u_i}{h_i} + \frac{u_i - u_{i-1}}{h_{i-1}} = h_i \times f_i$$

CONCLUSION

- ❖ Se généralise aux problèmes 2D/3D+
- ❖ Equivalent aux différences finies pour les maillages réguliers

5. ÉLÉMENTS FINIS

PRINCIPE

- ❖ Avoir une approche systématique que les schémas numérique de DF / VF
- ❖ Estimation de la convergence + vitesse de convergence

FORMULATION VARIATIONNELLE

$$-u''(x) = f(x), \forall x \in]0,1[$$

$$u(0) = u(1) = 0$$

$$\int_0^1 -u''(x)w(x)dx = \int_0^1 f(x)w(x)dx$$

$$\int_0^1 u'(x)w'(x)dx - (u'(1)w(1) - u'(0)w(0)) = \int_0^1 f(x)w(x)dx$$

$$\int_0^1 u'(x)w'(x)dx = \int_0^1 f(x)w(x)dx, \forall w(x) \text{ tq } w(0) = w(1) = 0$$

FORMULATION VARIATIONNELLE

- ❖ Ne nécessite qu'une évaluation de u' (au lieu de u'')
- ❖ Est dite formulation faible (par rapport à la formulation forte: EDP originale)
- ❖ Solution de la formulation forte est solution de la formulation faible ...
reciproque ?

FORMULATION VARIATIONNELLE

❖ Soit $u(x)$ solution de la formulation faible

$$\int_0^1 -u''(x)w(x)dx + (u'(1)w(1) - u'(0)w(0)) = \int_0^1 f(x)w(x)dx$$

$$\int_0^1 (-u''(x) - f(x))w(x)dx = 0$$

❖ On veut $-u''(x) - f(x) = 0 \dots$ dépend du choix de $w(x)$

FORMULATION VARIATIONNELLE

❖ Soient:

$$\phi(x) = x(1-x)$$

$$w(x) = \phi(x)(-u''(x) - f(x))$$

❖ w est bien nul en 0 et 1

$$\int_0^1 (-u''(x) - f(x))w(x)dx = 0$$

$$\int_0^1 (-u''(x) - f(x))^2 \phi(x)dx = 0$$

❖ on en déduit: $-u''(x) - f(x) = 0$

GÉNÉRALISATION

- ❖ Comment déterminer les fonctions w ?
- ❖ Conditions d'unicité de la solution pour la formulation variationnelle ?
- ❖ Conditions d'équivalence entre form. forte et form. faible ?
- ❖ Convergence vers solution analytique ?

GÉNÉRALISATION

- ❖ Réponses à ces questions reposent sur large palette d'outils et théorèmes (Galerkin, Méthode de Ritz, Théorème de Lax-Milgram)
- ❖ Les FEM '*classiques*' sont présentés ici pour lesquels les conditions d'existence d'unicité et de convergence sont connus

FEM / MEF PRINCIPES

- ❖ Discrétisation d'un domaine continu en un nombre fini de sous-domaines
- ❖ Construction de l'approximation nodale par sous-domaine (i.e. choix de w)
- ❖ Calcul des matrices élémentaires correspondant à la forme intégrale du problème
- ❖ ...

FEM / MEF PRINCIPES

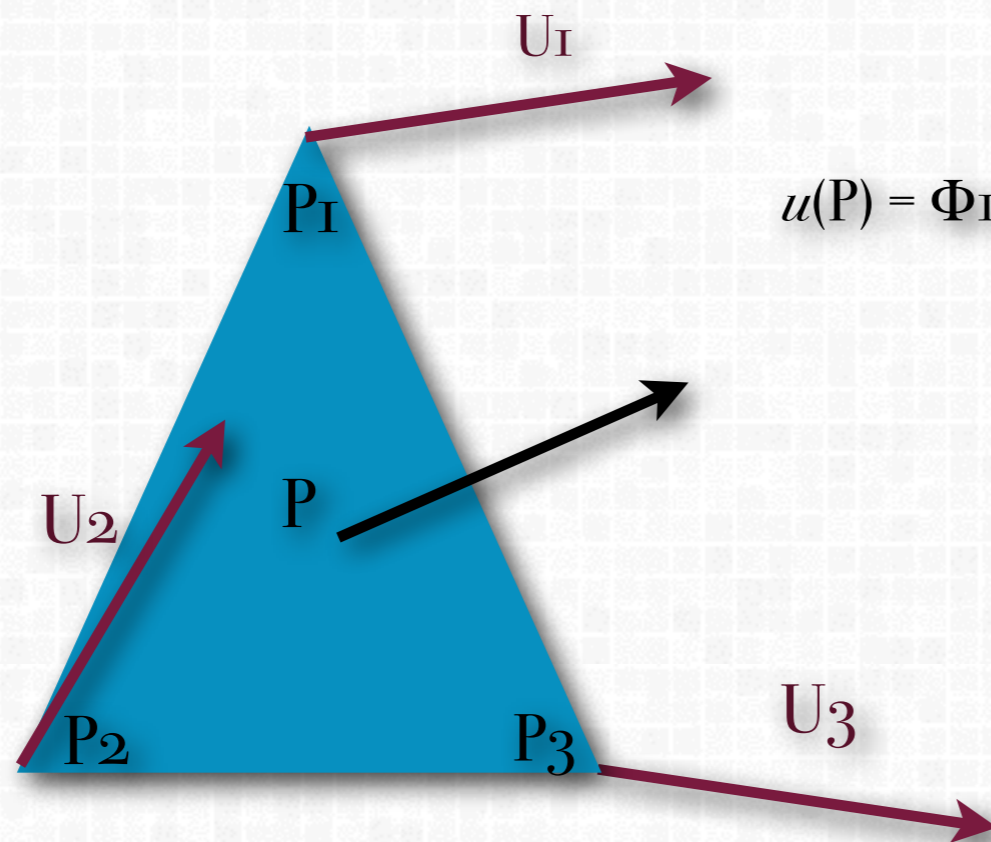
- ❖ ...
- ❖ assemblage des matrices élémentaires
- ❖ prise en compte des conditions aux limites
- ❖ résolution du système d'équations

DISCRÉTISATION

- ❖ Même principe que pour DF 2D:
- ❖ passage d'un domaine continu à un union de domaines élémentaires (carrés, triangles, cubes, tétraèdres)
- ❖ Première source *d'erreur*: approximation du domaine (erreur géométrique)

APPROXIMATION NODALE

- ❖ A l'intérieur de l'élément, le déplacement de tout point est donné par une fonction des déplacements aux noeuds:



$$u(P) = \Phi_1(P) * U_1 + \Phi_2(P) * U_2 + \Phi_3(P) * U_3$$

$$\Phi_1(P) = a_1 + b_1 x + c_1 y$$

$$\Phi_2(P) = a_2 + b_2 x + c_2 y$$

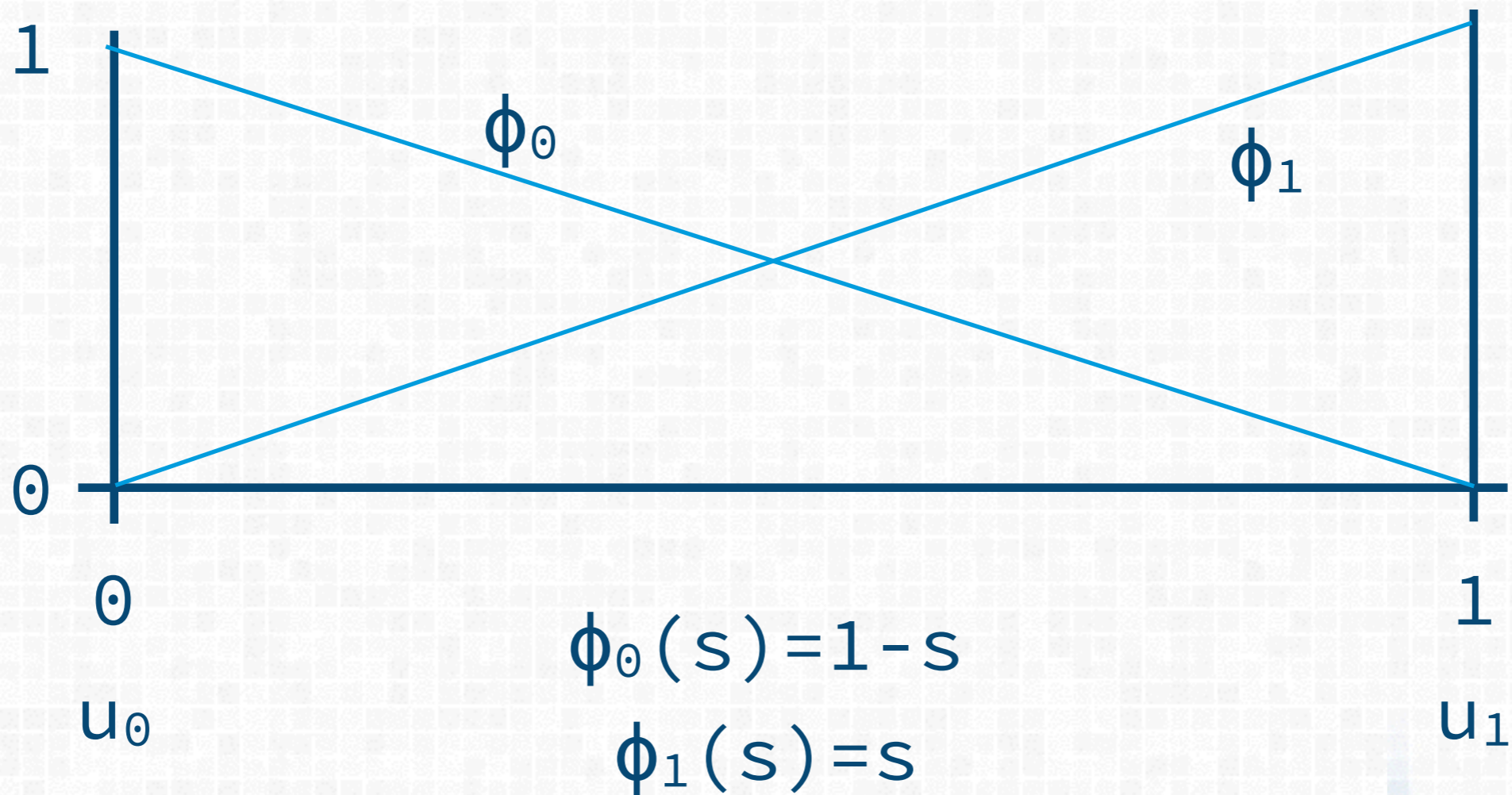
$$\Phi_3(P) = a_3 + b_3 x + c_3 y$$

APPROXIMATION NODALE

- ❖ Contraintes $u(P) = u_i$ aux noeuds
- ❖ En général utilisation de bases polynomiales (linéaire ou quadratique)

APPROXIMATION NODALE

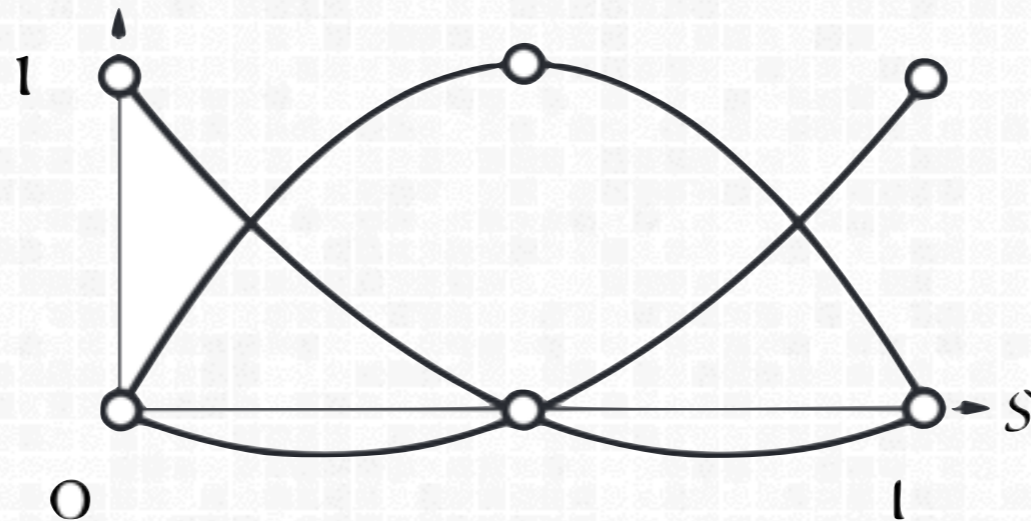
❖ Element de dimension 1 (linéaire)



$$u(s) = \phi_0(s)u_0 + \phi_1(s)u_1$$

APPROXIMATION NODALE

- ❖ Element de dimension 1 (quadratique)



$$L1(s) = 1 - s$$

$$L2(s) = s$$

$$\phi_0(s) = L1(s) [2L1(s) - 1]$$

$$\phi_1(s) = 4L1(s)L2(s)$$

$$\phi_2(s) = L2(s) [2L2(s) - 1]$$

$$u(s) = \phi_0(s)u_0 + \phi_1(s)u_{1/2} + \phi_2(s)u_1$$

CALCUL DES MATRICES ELEM.

- ❖ Dépendantes du problème, évaluation sur un élément des formes intégrales du problème
- ❖ En pratique cette évaluation est rarement analytique (sauf pour pb et discretisation simple)
- ❖ En pratique (bis) évaluation sur un élément de référence: barre de longueur 1, tri elem.

CALCUL DES MATRICES ELEM.

- ❖ En pratique (bis) évaluation sur un élément de référence:
segment de longueur 1 aligné sur Ox ...
- ❖ Utilisation de transfo géométrique (et sa jacobienne) entre l'élément réel et celui de référence...
- ❖ ... plus l'élément réel diffère de l'élément de référence, moins bonne est l'approx. (maillage dégénéré)

CALCUL DES MATRICES ELEM.

- ❖ Exemple pour méca.
(voir cours précédents)

$$\forall D_e, \mathbf{M}_e \ddot{\mathbf{u}}_n + \mathbf{K}_e \mathbf{u}_n = \mathbf{F}_{d_e} + \mathbf{F}_{i_e}$$

avec \mathbf{K}_e qui peut être constant (linéaire),
avec transformation rigide extraite
(co-rotationnel) ou évalué systématique
(non-linéaire)

ASSEMBLAGE

- ❖ Aggrégation des contributions de tous les éléments
- ❖ Importance de la numérotation des noeuds pour obtenir une matrice avec les bonnes propriétés

PRISE EN COMPTE DES CL

- ❖ Système tel que présenté n'est pas inversible...
- ❖ ... obligation de conditions aux limites pour contraindre / fixer certains noeuds
- ❖ dépendant du problème

RÉSOLUTION DU SYS. D'EQ.

- ❖ Résolution statique vs dynamique...
- ❖ Méthode d'intégration numérique temporelle (Euler explicite, implicite...)

BILAN SUR LES FEM

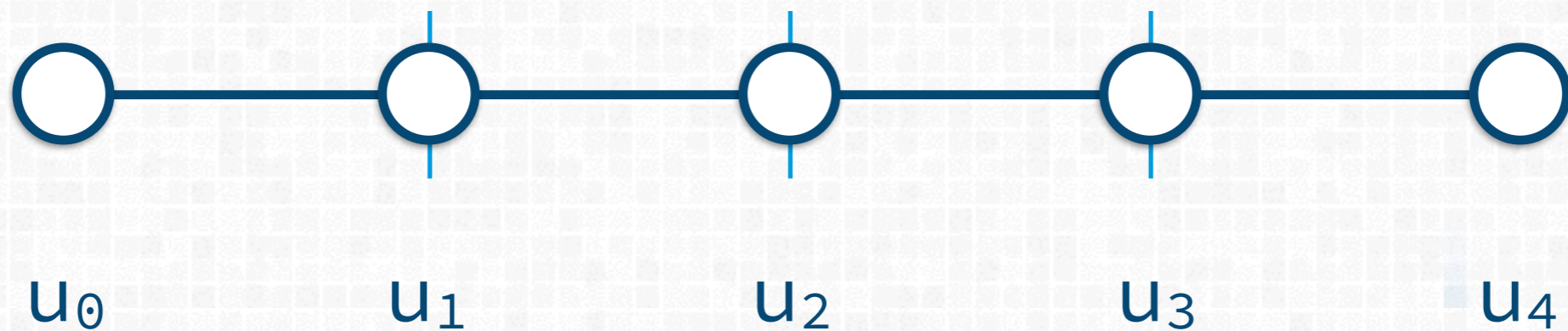
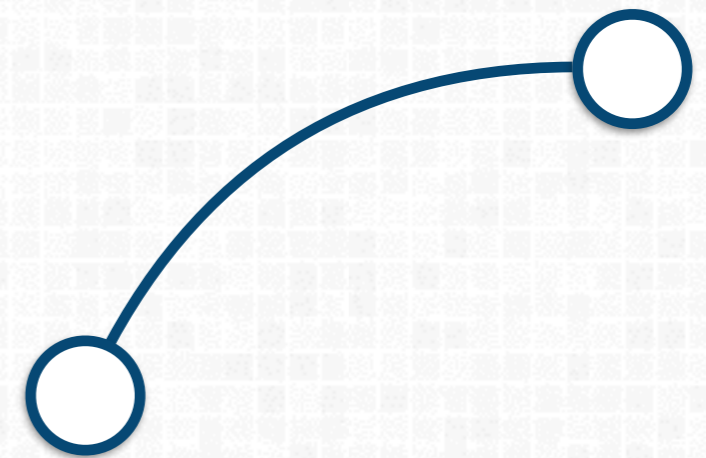
- ❖ Approche 'introductive': connaître le principe général et les étapes clés
- ❖ Schéma systématique et générique
- ❖ Précision dépend d'un certain nombre de choix:
 - ❖ discrétisation du domaine, fonctions d'interpolation, matrices élémentaires...

EXEMPLE

❖ Modélisation d'outils de neuro-radiologie

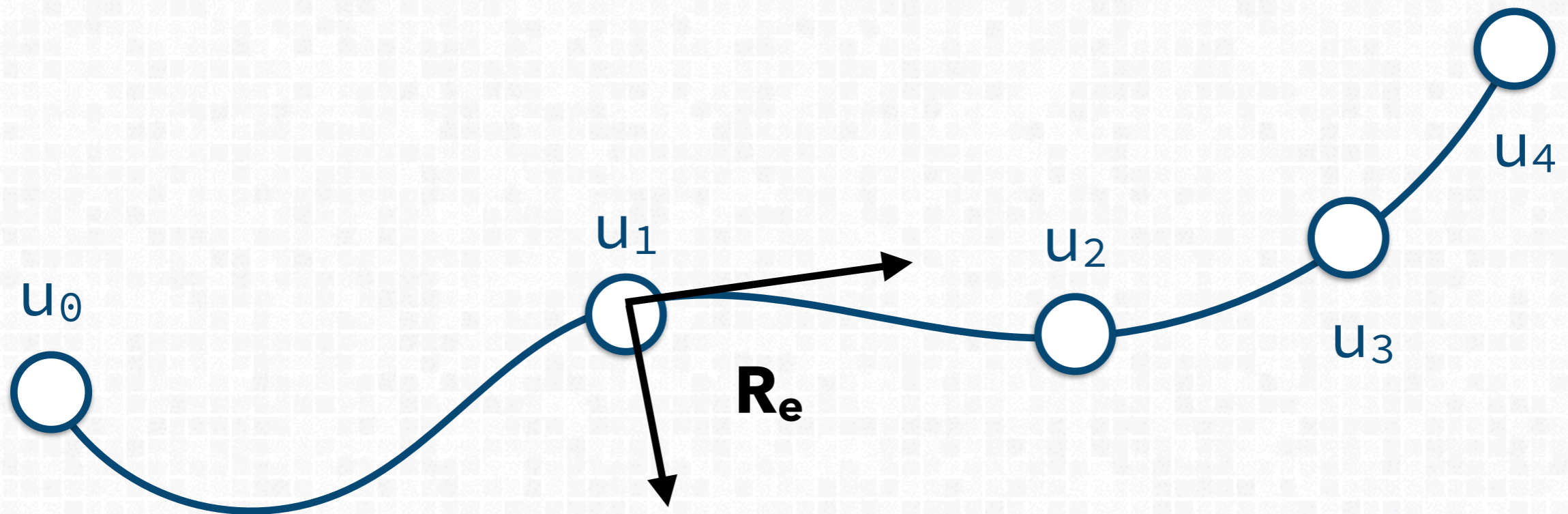
❖ Modèles filaire en 3D

❖ Chaque noeud à 6 DDL



EXEMPLE

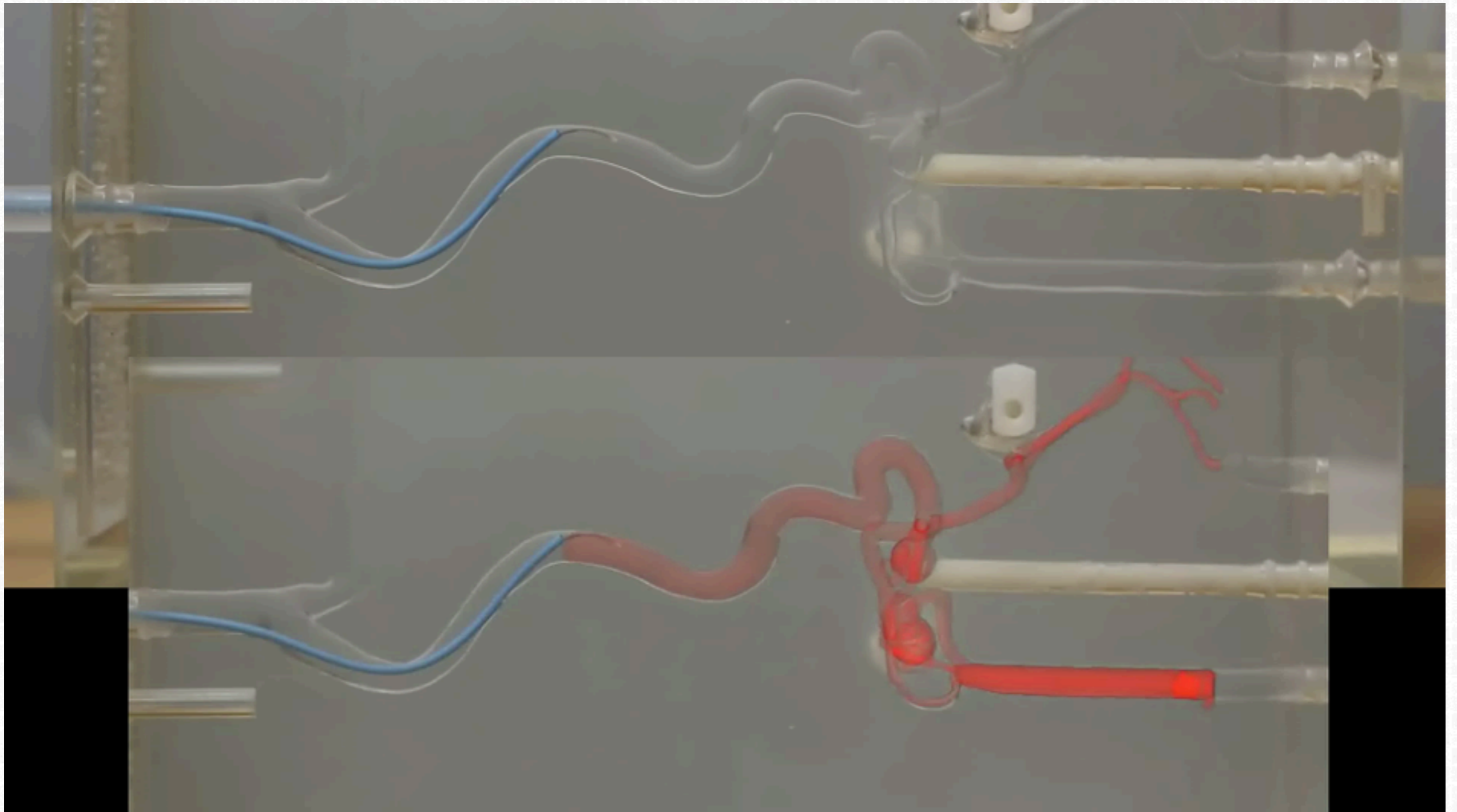
- ❖ Possibilité de spécifier une forme initiale pour éviter d'avoir une structure rectiligne



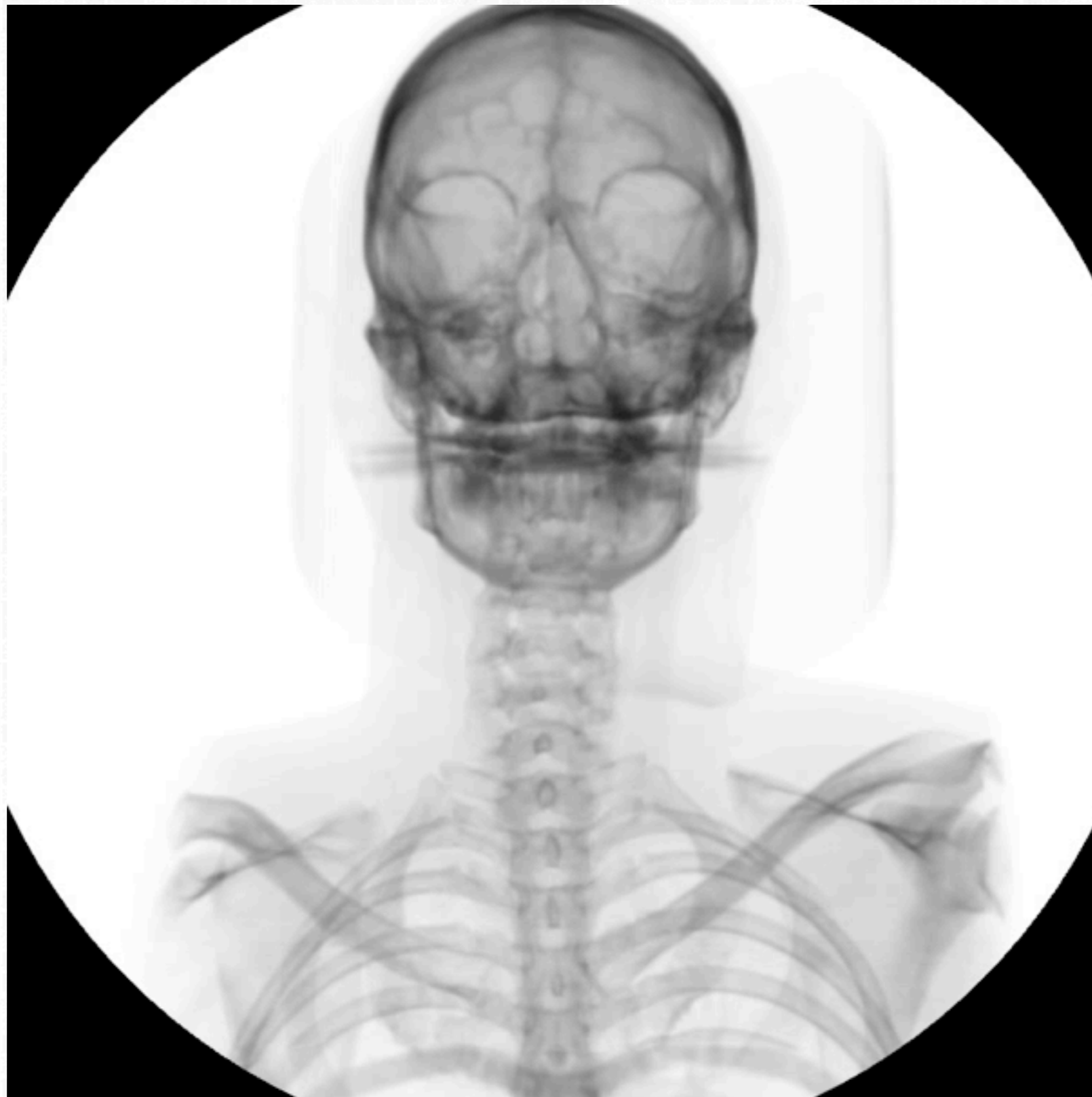
EXAMPLE



EXEMPLE



EXAMPLE



6. CONCLUSION

BILAN

- ❖ D'un point de vue informatique, implémentation relativement simple: système matriciel à résoudre
- ❖ D'un point de vue mathématique:
 - ❖ DF / VF méthode directe mais limitée à des discrétisations simples
 - ❖ FEM plus complexe à mettre en oeuvre mais plus générique

DEMAIN

- ❖ Extension aux cas 2D / 3D
 - ❖ importance du maillage
 - ❖ matrices élémentaires pour des lois (bio-)mécaniques
 - ❖ identification de paramètres
 - ❖ précautions à prendre pour garantir précision et convergence

TP !

- ❖ 3 exercices en scilab sur les DF
- ❖ squelette disponible à l'adresse:
<http://dequidt.plil.net/ecole>

ADVECTION + DIFFUSION

