

Equation Modifiée

Marc Duruflé

August 13, 2004

Chapter 1

Schéma d'ordre 4 pour l'équation des ondes

1.1 Problème Modèle

On veut résoudre l'équation des ondes dans un domaine Ω de frontière Γ

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) - \Delta u(x, t) &= f(x, t) \quad x \in \Omega \\ (1.1) \quad u(x, 0) &= \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = 0 \quad x \in \Omega \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) &= 0 \quad x \in \Gamma \end{aligned}$$

On suppose qu'on a choisi une discrétisation, comme l'utilisation d'éléments finis avec condensation de masse. On se ramène alors au problème matriciel suivant :

$$(1.2) \quad \frac{d^2 U}{dt^2}(t) - A_h U(t) + \Sigma_h \frac{dU}{dt}(t) = F(t)$$

$$A_h = -M_h^{-1} K_h$$

M_h matrice de masse

K_h matrice de rigidité

Σ_h matrice issue de la condition absorbante sur Γ

Pour la discrétisation en temps de cette équation d'évolution, on utilise la technique de l'équation modifiée.

1.2 Approche de l'équation modifiée

On écrit le développement de Taylor de $U(t + (n + 1)\Delta t)$ et $U(t + (n - 1)\Delta t)$. On utilise la notation

$$U^n = U(t + n\Delta t)$$

$$(1.3) \quad \begin{aligned} U^{n+1} &= U^n + \Delta t \frac{dU}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2U}{dt^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3U}{dt^3} + \frac{\Delta t^4}{24} \frac{d^4U}{dt^4} + \dots \\ U^{n-1} &= U^n - \Delta t \frac{dU}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2U}{dt^2} - \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3U}{dt^3} + \frac{\Delta t^4}{24} \frac{d^4U}{dt^4} + \dots \end{aligned}$$

On en déduit que

$$(1.4) \quad \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\Delta t^2} = \frac{d^2U}{dt^2} + \frac{\Delta t^2}{12} \frac{d^4U}{dt^4} + O(\Delta t^4)$$

On a également

$$(1.5) \quad \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{dU}{dt} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{d^3U}{dt^3} + O(\Delta t^4)$$

La technique de l'équation modifiée consiste à approcher les termes correctifs $\frac{d^4U}{dt^4}$ et $\frac{d^3U}{dt^3}$ en dérivant l'équation.

On a

$$(1.6) \quad \frac{d^2U}{dt^2} = A_h U + F - \Sigma_h \frac{dU}{dt}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^3U}{dt^3} &= A_h \frac{dU}{dt} + \frac{dF}{dt} - \Sigma_h \frac{d^2U}{dt^2} \\ &= A_h \frac{dU}{dt} + \frac{dF}{dt} - \Sigma_h (A_h U + F) + \Sigma_h^2 \frac{dU}{dt} \\ &= (A_h + \Sigma_h^2) \frac{dU}{dt} - \Sigma_h (A_h U + F) + \frac{dF}{dt} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d^4U}{dt^4} &= (A_h + \Sigma_h^2) \frac{d^2U}{dt^2} - \Sigma_h (A_h \frac{dU}{dt} + \frac{dF}{dt}) + \frac{d^2F}{dt^2} \\ &= (A_h + \Sigma_h^2)(A_h U + F) - (A_h + \Sigma_h^2) \Sigma_h \frac{dU}{dt} - \Sigma_h A_h \frac{dU}{dt} - \Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{d^2F}{dt^2} \\ &= (A_h + \Sigma_h^2)(A_h U + F) - (\Sigma_h A_h + A_h \Sigma_h + \Sigma_h^3) \frac{dU}{dt} - \Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{d^2F}{dt^2} \end{aligned}$$

Le terme d'ordre deux, de l'équation des ondes est remplacé par :

$$\begin{aligned} \frac{d^2U}{dt^2} &= \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{\Delta t^2}{12} \frac{d^4U}{dt^4} + O(\Delta t^4) \\ &= \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{\Delta t^2}{12} \left[(A_h + \Sigma_h^2)(A_h U^n + F^n) \right. \\ &\quad \left. - (\Sigma_h A_h + A_h \Sigma_h + \Sigma_h^3) \frac{3U^n - 4U^{n-1} + U^{n-2}}{2\Delta t} - \Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{d^2F}{dt^2} \right] + O(\Delta t^4) \end{aligned}$$

On a utilisé un schéma décentré d'ordre deux, pour la dérivée en temps :

$$(1.7) \quad \frac{dU}{dt} = \frac{3U^n - 4U^{n-1} + U^{n-2}}{2\Delta t} + O(\Delta t^2)$$

Le terme d'amortissement est remplacé par :

$$\begin{aligned} \Sigma_h \frac{dU}{dt} &= \Sigma_h \frac{(U^{n+1} - U^{n-1})}{2\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{6} \Sigma_h \frac{d^3 U}{dt^3} + O(\Delta t^4) \\ &= \Sigma_h \frac{(U^{n+1} - U^{n-1})}{2\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{6} \left[(\Sigma_h A_h + \Sigma_h^3) \frac{3U^n - 4U^{n-1} + U^{n-2}}{2\Delta t} \right. \\ &\quad \left. - \Sigma_h^2 (A_h U^n + F^n) + \Sigma_h \frac{dF}{dt} \right] + O(\Delta t^4) \end{aligned}$$

On obtient ainsi le schéma suivant à trois pas de temps

$$\begin{aligned} (I_h + \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h) U^{n+1} &= 2U^n - U^{n-1} + \Delta t^2 (A_h U^n + F^n) + \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h U^{n-1} \\ &\quad + \frac{\Delta t^4}{12} (A_h - \Sigma_h^2) (A_h U^n + F^n) - \frac{\Delta t^3}{24} (A_h \Sigma_h - \Sigma_h A_h - \Sigma_h^3) (3U^n - 4U^{n-1} + U^{n-2}) \\ &\quad + \frac{\Delta t^4}{12} \frac{d^2 F}{dt^2} + \frac{\Delta t^4}{12} \Sigma_h \frac{dF}{dt} \end{aligned}$$

Les premiers instants U^0, U^1, U^2 peuvent être calculés via un schéma à un pas, de type Runge-Kutta. Si les conditions sont nulles, on choisit un temps initial antérieur au premier instant où $F(t)$ est non-nulle. On initialise alors ces trois vecteurs à 0.

1.3 Autres schémas comparatifs

Notre principal schéma de comparaison est le schéma classique d'ordre 2, qui s'écrit

$$(1.8) \quad (I_h + \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h) U^{n+1} = 2U^n - U^{n-1} + \Delta t^2 (A_h U^n + F^n) + \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h U^{n-1}$$

On remarque que le schéma d'ordre 4 issu de l'équation modifiée ajoute à ce schéma des termes correctifs d'ordre 2.

1.4 Source

On prend une source à variables séparées :

$$F(x, t) = f(x) g(t)$$

Pour ce qui est du terme d'espace, on choisit une gaussienne :

$$f(x) = \frac{1}{r_0^2} \exp(-7 \frac{r^2}{r_0^2})$$

r_0 rayon de distribution

Pour ce qui est du terme temporel, on choisit une dérivée seconde de Gaussienne, qu'on appelle aussi Rickert

$$G(t) = -\frac{f_0 t - 1}{f_0} e^{-\pi^2 (f_0 t - 1)^2}$$

$$g(t) = [2\pi^2 (f_0 t - 1)^2 - 1] e^{-\pi^2 (f_0 t - 1)^2}$$

$$g'(t) = f_0 [6\pi^2 (f_0 t - 1) - 4\pi^4 (f_0 t - 1)^3] e^{-\pi^2 (f_0 t - 1)^2}$$

$$g''(t) = f_0^2 [6\pi^2 - 24\pi^4 (f_0 t - 1)^2 + 8\pi^6 (f_0 t - 1)^4] e^{-\pi^2 (f_0 t - 1)^2}$$

1.5 Validation numérique pour un cas Neumann pur

Dans un premier temps, on choisit de remplacer la condition absorbante sur Γ par une condition de Neumann homogène. On prend une cavité carrée 8x8, on place la source au centre. La fréquence de la source est de 1 Hz, le rayon de distribution de 0.3m . On fixe la discrétisation en espace à 24 segments sur chaque côté, et on utilise du Q4. On a mis ainsi 3 éléments par longueur d'onde, soit 12 points par longueur d'onde. On calcule un sismogramme de la solution à l'origine entre $t = 143s$ et $t = 155s$. L'erreur du schéma est calculée à partir de ce sismogramme. On laisse le calcul se terminer à $t = 200s$, on vérifie qu'il n'y a pas apparition d'instabilités au temps final. Tous les temps de calcul sont décomptés entre $t = -1s$ et $t = 200s$.

Le schéma d'ordre 4 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.06	0.0971	—	25s
0.03	0.00592	—	48s
0.015	0.000344	4.04	94s
0.0075	—	4.02	187s

La limite de stabilité est situé entre $\Delta t = 0.06$ et $\Delta t = 0.07$. L'erreur relative est calculée en prenant la solution au pas de temps le plus petit comme référence. L'ordre de convergence est calculé par la formule

$$r = \frac{\log(\|u_{4\Delta t} - u_{2\Delta t}\|) - \log(\|u_{2\Delta t} - u_{\Delta t}\|)}{\log(4\Delta t) - \log(2\Delta t)}$$

Le schéma d'ordre 2 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.06	instable	—	—
0.03	1.33	—	17s
0.015	0.51	—	34s
0.0075	0.133	1.57	63s
0.00375	0.033	1.97	123s

On retrouve bien les ordres des schémas, et si on se fixe une erreur à 5%, on peut estimer le temps de calcul des deux schémas.

Ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.051$ soit **28 s**

Ordre 2 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.0046$ soit **101 s**

Sur cet exemple élémentaire l'ordre 4 est environ trois fois plus rapide ! On peut se poser la question de savoir si la discrétisation en espace est suffisamment fine pour que la solution convergée en temps soit proche de la solution convergée en temps et en espace. On a donc calculé le sismogramme pour 40 intervalles en espace contre 24 et avec $\Delta t = 0,0075$ avec un schéma d'ordre 4. On obtient une erreur relative entre les deux sismogrammes de 6%. Prendre un objectif d'erreur à 5% semble pertinent.

On peut illustrer l'expérience avec les différents sismogrammes obtenus pour les différents pas de temps, sur la figure 1.1. La solution de référence affichée est celle obtenue avec 24 intervalles et $\Delta t = 0.0075$ sur le schéma d'ordre 4.

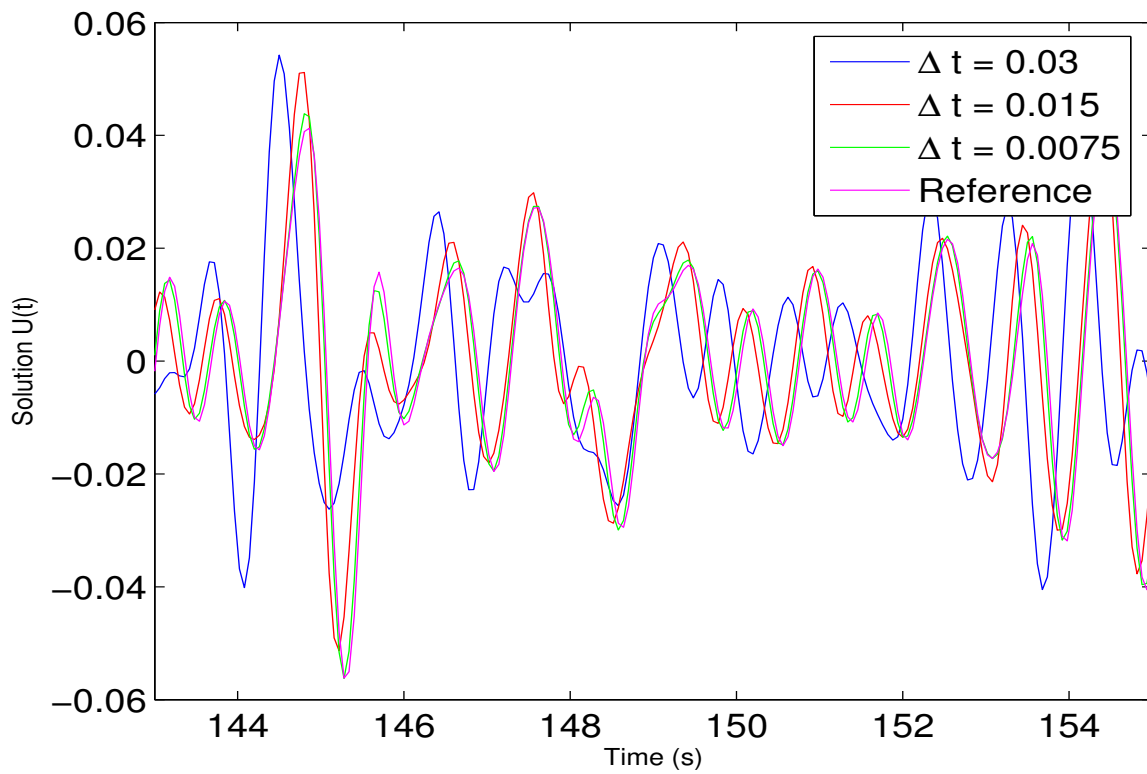


Figure 1.1: Sismogramme dans le cas Neumann pur pour différents pas de temps pour le schéma d'ordre 2

1.6 Validation numérique dans le cas absorbant

Dans cette section, on choisit un domaine Ω circulaire de rayon 4. On place au centre de ce domaine un disque diélectrique $\rho = 4$ de rayon 3. La frontière extérieure est absorbante. On choisit le point source à $(-2;0)$, et le point d'enregistrement du sismogramme à $(2.5 ; 0)$. Les temps de relevé sont identiques à l'expérience précédente : $t = 143s$ et $t = 155s$. On choisit un ordre d'approximation 4 en espace et environ 12 points par longueur d'onde, le maillage est quasi-régulier.

Le schéma d'ordre 4 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.02	$7.72e-4$	—	167s
0.01	$4.68e-5$	—	331s
0.005	$2.74e-6$	4.04	660s
0.0025	—	4.00	1320s

La limite de stabilité est située entre $\Delta t = 0.02$ et $\Delta t = 0.03$.

Le schéma d'ordre 2 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.02	0.648	—	53s
0.01	0.181	—	103s
0.005	0.0457	1.90	205s
0.0025	0.0114	1.99	407s
0.00125	0.00286	1.99	816s

On se fixe une erreur à 5%, on peut estimer le temps de calcul des deux schémas.

Ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.026s$ soit **128 s**

Ordre 2 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.00526s$ soit **195 s**

Sur cet exemple élémentaire l'ordre 4 est environ 1.5 fois plus rapide. On rencontre néanmoins une difficulté par rapport au cas Neumann pur. En effet, la CFL est diminuée du fait de la présence de la condition absorbante. On situe dans le cas présent la limite de stabilité à $\Delta t = 0.026$, l'erreur obtenue sur le sismo est alors de 0.2%. Quand on prend $\Delta t = 0.028s$, on observe une instabilité qui se développe quand le front de l'onde vient taper sur la condition

absorbante. Cette observation nous permet de conjecturer que la présence de la condition absorbante diminue la CFL. Cette diminution semble être moins sensible sur l'ordre 2. Y en a t'il une ???

Comme dans le cas Neumann pur, on mesure l'écart avec une solution raffinée en espace. On prend un maillage deux fois plus fin en espace et avec $\Delta t = 0.0025$ sur le schéma d'ordre 4. On obtient une erreur relative de 1.33%.

On peut illustrer l'expérience avec les différents sismogrammes obtenus pour les différents pas de temps, sur la figure 1.2. La solution de référence est calculée sur le même maillage avec le schéma d'ordre 4 et $\Delta t = 0.0025$.

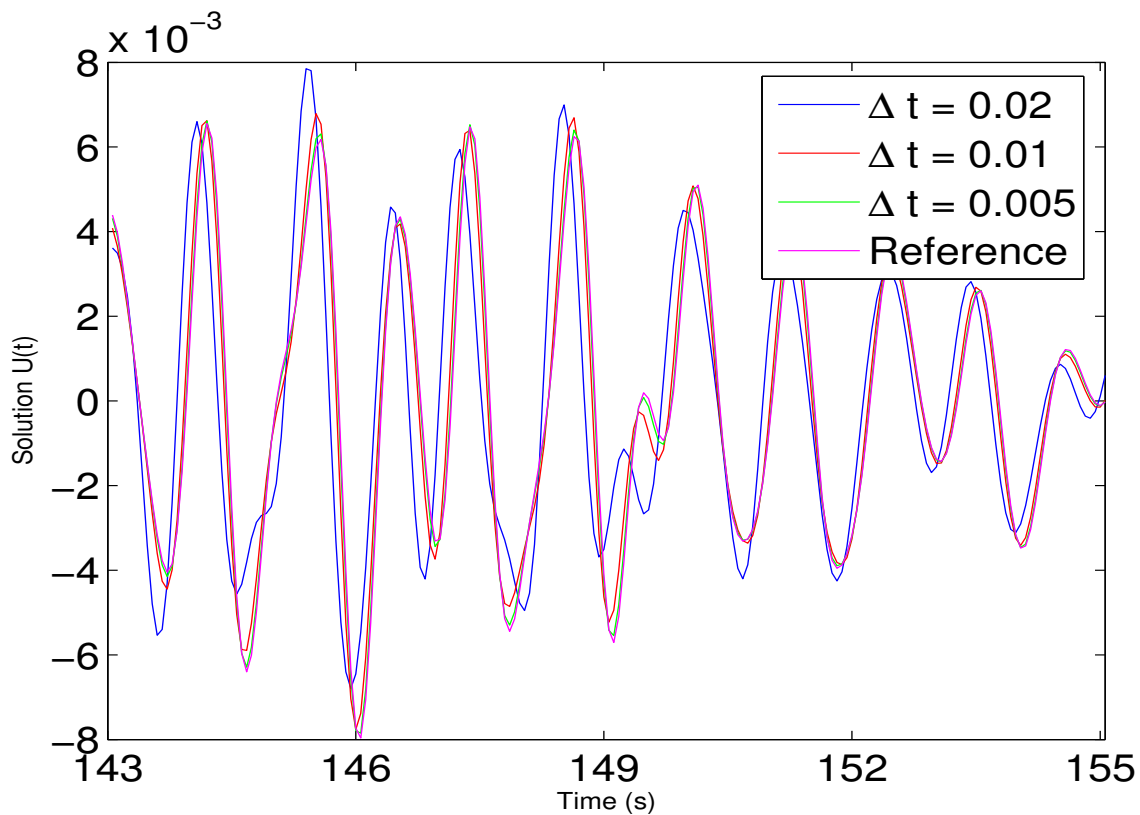


Figure 1.2: Sismogramme dans le cas absorbant pour différents pas de temps pour le schéma d'ordre 2

Chapter 2

Schéma d'ordre 4 pour l'équation des ondes - Formulation mixte

2.1 Formulation mixte du schéma

On considère une formulation sous forme de système d'ordre 1 de l'équation des ondes

$$(2.1) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \operatorname{div}(\vec{v}(x, t)) &= f(x, t) \\ \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}(x, t) - \vec{\nabla} u(x, t) &= 0 \end{aligned}$$

Soit après discrétisation en espace :

$$(2.2) \quad \begin{aligned} D_h \frac{dU}{dt}(t) + R_h V(t) + D_h \Sigma_h U(t) &= F(t) \\ B_h \frac{dV}{dt}(t) - R_h^t V(t) &= 0 \end{aligned}$$

Σ_h est identique à la matrice introduite au début du chapitre. Elle se rapporte à une frontière avec condition absorbante, ou un milieu avec amortissement.

On peut écrire ce système sous la forme condensée

$$\frac{dX}{dt}(t) = BX(t)$$
$$X(t) = \begin{pmatrix} U(t) \\ V(t) \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} \Sigma_h & -D_h^{-1} R_h \\ B_h^{-1} R_h^t & 0 \end{pmatrix}$$

Ce type de problème d'évolution est largement traité dans la littérature ... Un autre avantage de considérer le système d'ordre 1 par rapport à l'équation d'ordre 2 est l'adjonction de PML plus aisée. Mais la résolution de ce système nous semble plus coûteuse si on a uniquement des conditions absorbantes ou de type Neumann, car l'inconnue \vec{v} est trois fois plus volumineuse que u en 3-D.

2.2 Instabilité du schéma saute-mouton ?

On utilise le schéma saute-mouton classique

$$\frac{dU}{dt}(t) = \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t}$$

Ce qui nous donne le schéma suivant sur l'équation des ondes :

$$(2.3) \quad \begin{aligned} U^{n+1} &= U^{n-1} - 2\Delta t D_h^{-1} R_h V^n - 2\Delta t \Sigma_h U^n + F^n \\ V^{n+1} &= V^{n-1} + 2\Delta t B_h^{-1} R_h^t U^n \end{aligned}$$

On va maintenant démontrer l'équivalence de ce schéma avec un schéma d'ordre 2 en U uniquement. On prend une source égale à zéro.

$$\begin{aligned} U^{n+2} - 2U^n + U^{n-2} &= U^{n+2} - U^n - (U^n - U^{n-2}) \\ &= -2\Delta t D_h^{-1} R_h V^{n+1} + 2\Delta t D_h^{-1} R_h V^{n-1} - 2\Delta t \Sigma_h (U^{n+1} - U^{n-1}) \\ &= -4\Delta t^2 D_h^{-1} R_h B_h^{-1} R_h^t U^n - 2\Delta t \Sigma_h (U^{n+1} - U^{n-1}) \end{aligned}$$

Quand on utilise des éléments finis avec condensation de masse, on a un théorème d'équivalence qui dit simplement que

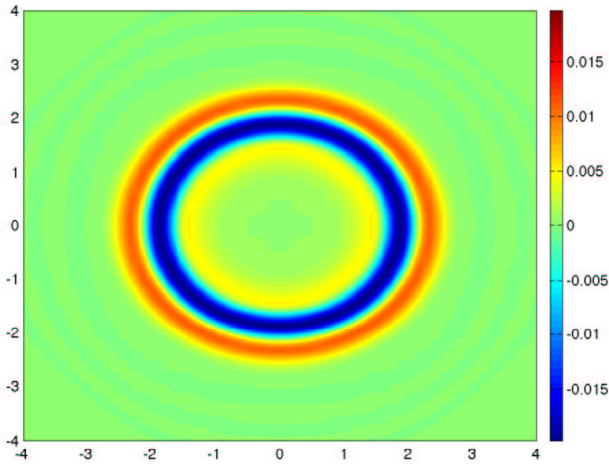
$$A_h = -D_h^{-1} R^h B_h^{-1} R_h^t$$

où A_h est la matrice définie au début du chapitre. Le schéma en U et V est donc équivalent à

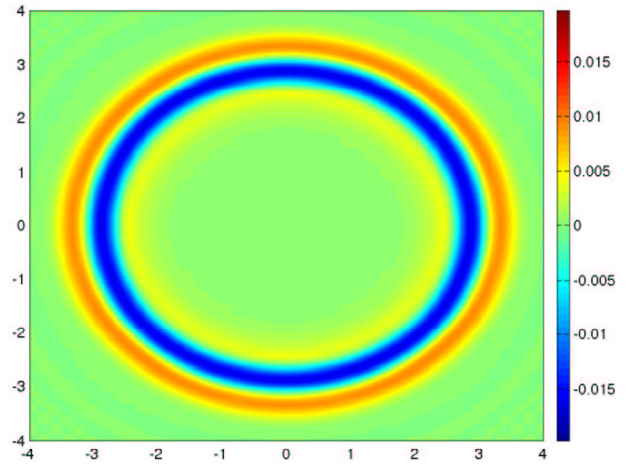
$$(2.4) \quad \frac{U^{n+2} - 2U^n + U^{n-2}}{4\Delta t^2} - A_h U^n + \Sigma_h \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t} = 0$$

En l'absence de condition absorbante ($\Sigma_h = 0$), ce schéma est identique au schéma classique d'ordre deux, excepté le fait qu'on fait deux fois plus de calculs ! Il est dans ce cas parfaitement stable.

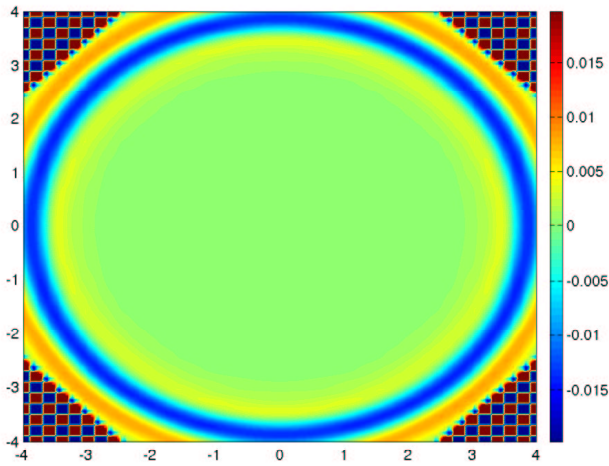
Cependant quand on met une condition absorbante, on observe numériquement des instabilités que ce soit sur l'équation d'ordre deux ou sur le système. En voici un exemple calculé en considérant le système et du Q2 en espace, qu'on peut voir sur la figure 2.1 :



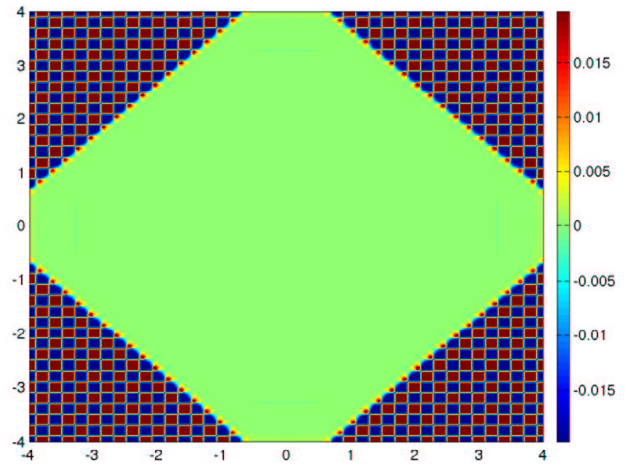
t = 3s



t = 4s



t = 5s



t = 6s

Figure 2.1: Evolution de la solution numérique à plusieurs instants avec le schéma saute-mouton et condition absorbante

On observe aussi des instabilités quand on prend un amortissement dans tout le domaine, pour Q1, Q2 et Q4. Heureusement l'analyse de stabilité théorique nous permet de conclure, je remercie Eliane Bécache pour son aide précieuse.

On cherche

$$U^n = \Lambda e^{i\omega n \Delta t}$$

Si la partie imaginaire de ω est positive ou nulle, on a un schéma stable.

On a alors

$$\frac{e^{2i\omega\Delta t} - 2 + e^{-2i\omega\Delta t}}{4\Delta t^2} \Lambda - A_h \Lambda + \frac{e^{i\omega\Delta t} - e^{-i\omega\Delta t}}{2\Delta t} \Sigma_h \Lambda = 0$$

Soit

$$\frac{-\sin^2(\omega\Delta t)}{\Delta t^2} \Lambda - A_h \Lambda + \frac{i \sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} \Sigma_h \Lambda = 0$$

Si on suppose que A_h et Σ_h peuvent être diagonales dans une même base, on a

$$X = \frac{\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t}$$

$$\text{solution de } -X^2 - A_h + i\Sigma_h X = 0$$

Le discriminant de cette équation vaut

$$\delta^2 = -\Sigma_h^2 - 4A_h$$

On a deux solutions, la racine carrée étant une racine carrée complexe

$$(2.5) \quad \begin{aligned} \frac{\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} &= \frac{i}{2}\Sigma_h - \frac{\sqrt{\delta}}{2} \\ \frac{\sin(\omega\Delta t)}{\Delta t} &= \frac{i}{2}\Sigma_h + \frac{\sqrt{\delta}}{2} \end{aligned}$$

$-4A_h$ est positif et $-\Sigma_h^2$ est négatif. On a donc $\sin(\omega\Delta t)$ complexe. Maintenant posons

$$z = e^{i\omega\Delta t}$$

z vérifie alors l'équation

$$z^2 - 2 + \frac{1}{z^2} - 4\Delta t^2 \hat{A}_h \Lambda + 2\Delta t \left(z - \frac{1}{z}\right) \hat{\sigma} = 0$$

On a noté \hat{A}_h le symbole du laplacien et $\hat{\sigma}$ l'amortissement supposé constant. On obtient ainsi une équation d'ordre 4 en z :

$$z^4 + 2\Delta t \hat{\sigma} z^3 - (2 + 4\Delta t^2 \hat{A}_h) z^2 - 2\Delta t \hat{\sigma} z + 1 = 0$$

On veut montrer que toutes les racines de ce polynôme sont de modules inférieurs ou égal à un. Le coefficient en z^0 et z^4 est égal à un donc

$$\prod z_i = 1$$

Si l'une des racines est de module strictement inférieur à un, on a forcément une autre racine de module strictement supérieur à un. Donc, pour avoir un schéma stable, il faut avoir

$$|z_i| = 1$$

pour toutes les racines, ce qui revient à avoir ω réel et donc $\sin(\omega\Delta t)$ réel. Or l'équation en sinus nous donne des racines complexes pour $\hat{\sigma} > 0$. En conclusion, en présence d'un amortissement non-nul, ce schéma est **inconditionnellement instable**.

2.3 Le schéma saute-mouton comme on devrait l'écrire

Si on enlève la condition absorbante, on remarque que deux suites sont complètement découplées :

$$U^0, U^2 \dots U^{2n} \quad V^1, V^3 \dots V^{2n+1}$$

$$U^1, U^3 \dots U^{2n+1} \quad V^0, V^2 \dots V^{2n}$$

Cette remarque nous permet de simplifier le schéma en ne calculant qu'une seule suite :

$$(2.6) \quad \begin{aligned} U^{n+1} &= U^n - \Delta t D_h^{-1} R_h V^{n+1/2} + F^n \\ V^{n+3/2} &= V^{n+1/2} + 2\Delta t B_h^{-1} R_h^t U^{n+1} \end{aligned}$$

On rajoute la condition absorbante en approximant $U^{n+1/2} = \frac{U^n + U^{n+1}}{2}$

$$(2.7) \quad \begin{aligned} (I + \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h) U^{n+1} &= U^n - \Delta t D_h^{-1} R_h V^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \Sigma_h U^n + F^n \\ V^{n+3/2} &= V^{n+1/2} + \Delta t B_h^{-1} R_h^t U^{n+1} \end{aligned}$$

Ce schéma d'ordre deux sera notre point de comparaison dans les expériences numériques.

2.4 Technique de l'équation modifiée sur le système

Si on considère l'équation

$$\frac{dX}{dt} = BX(t)$$

On approche la dérivée par

$$\frac{dX}{dt} = \frac{X^{n+1} - X^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{6} \frac{d^3 X}{dt^3} = \frac{X^{n+1} - X^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{6} B^3 X^n$$

On obtient le schéma

$$X^{n+1} = X^{n-1} + 2\Delta t B \left(X^n - \frac{\Delta t^2}{6} B^2 X^n \right)$$

Sur l'équation des ondes en dimension 1, d'après le rapport de recherche de S. Piperno, la CFL de ce schéma serait multipliée par 2.8 par rapport à la CFL du schéma saute-mouton.

Cependant, il est préférable d'utiliser un schéma saute-mouton comme on l'a écrit dans la section précédente. Pour simplifier les écritures, on note

$$A^1 = -D_h^{-1} R_h$$

$$A^2 = B_h^{-1} R_h^t$$

On a alors

$$\frac{dU}{dt} = A^1 V + F - \Sigma_h U$$

$$\frac{dV}{dt} = A^2 U$$

En dérivant

$$\begin{aligned} \frac{d^2 U}{dt^2} &= A^1 \frac{dV}{dt} + \frac{dF}{dt} - \Sigma_h \frac{dU}{dt} \\ &= A^1 A^2 U + \frac{dF}{dt} - \Sigma_h (F + A^1 V) + \Sigma_h^2 U \\ &= (A_h + \Sigma_h^2) U + \frac{dF}{dt} - \Sigma_h (F + A^1 V) \end{aligned}$$

En dérivant, on a

$$\begin{aligned} \frac{d^3 U}{dt^3} &= (A_h + \Sigma_h^2) \frac{dU}{dt} + \frac{d^2 F}{dt^2} - \Sigma_h \frac{dF}{dt} - \Sigma_h A^1 A^2 U \\ &= (A_h + \Sigma_h^2) (F + A^1 V) - (A_h \Sigma_h + \Sigma_h A_h + \Sigma_h^3) U - \Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{d^2 F}{dt^2} \end{aligned}$$

Pour V

$$\begin{aligned} \frac{d^3 V}{dt^3} &= A^2 \frac{d^2 U}{dt^2} \\ &= A^2 \left[(A_h + \Sigma_h^2) U - \Sigma_h (F + A^1 V) + \frac{dF}{dt} \right] \end{aligned}$$

Le schéma sur u est modifié

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 U}{dt^3} = (A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) - \Sigma_h \frac{U^n + U^{n+1}}{2} + \frac{\Delta t^2}{8} \Sigma_h \frac{d^2 U}{dt^2}$$

$$\begin{aligned}
(I + \frac{\Delta t}{2}\Sigma_h)U^{n+1} &= U^n + \Delta t(A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) - \frac{\Delta t}{2}\Sigma_h U^n \\
&+ \frac{\Delta t^3}{24}(A_h + \Sigma_h^2)(A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) \\
&- \frac{\Delta t^3}{24}(A_h \Sigma_h + \Sigma_h^3 + \Sigma_h A_h)U^{n+1/2} \\
&- \frac{\Delta t^3}{24}\Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{\Delta t^3}{24} \frac{d^2 F}{dt^2} \\
&+ \frac{\Delta t^3}{8}(\Sigma_h^3 + \Sigma_h A_h)U^{n+1/2} - \frac{\Delta t^3}{8}\Sigma_h^2(A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) \\
&+ \frac{\Delta t^3}{8}\Sigma_h \frac{dF}{dt}
\end{aligned}$$

En regroupant certains termes

$$\begin{aligned}
(I + \frac{\Delta t}{2}\Sigma_h)U^{n+1} &= U^n + \Delta t(A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) - \frac{\Delta t}{2}\Sigma_h U^n \\
&+ \frac{\Delta t^3}{24}(A_h - 2\Sigma_h^2)(A^1 V^{n+1/2} + F^{n+1/2}) \\
&- \frac{\Delta t^3}{24}(A_h \Sigma_h - 2\Sigma_h^3 - 2\Sigma_h A_h) \frac{3U^n - U^{n-1}}{2} \\
&+ \frac{\Delta t^3}{12}\Sigma_h \frac{dF}{dt} + \frac{\Delta t^3}{24} \frac{d^2 F}{dt^2}
\end{aligned}$$

On a utilisé une approximation d'ordre 2 décentrée pour $U^{n+1/2}$. On applique le même procédé et on obtient le schéma sur v

$$V^{n+3/2} = V^{n+1/2} + \Delta t A^2 \left\{ U^{n+1} + \frac{\Delta t^2}{24} \left[(A_h + \Sigma_h^2)U^{n+1} - \Sigma_h(A^1 V + F)^{n+1} + \frac{dF}{dt} \right] \right\}$$

On utilise le même schéma décentré pour évaluer le terme en V^{n+1} .

2.5 Validation numérique dans le cas Neumann pur

Les données sont strictement identiques à celles de la première partie

Le schéma d'ordre 4 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.06	0.0368	—	38s
0.03	0.00221	—	75s
0.015	0.000129	4.05	148s
0.0075	—	4.01	295s

La limite de stabilité est situé entre $\Delta t = 0.09$ et $\Delta t = 0.1$. L'erreur relative est calculée en prenant la solution au pas de temps le plus petit comme référence. L'ordre de convergence est calculé par la formule

$$r = \frac{\log(\|u_{4\Delta t} - u_{2\Delta t}\|) - \log(\|u_{2\Delta t} - u_{\Delta t}\|)}{\log(4\Delta t) - \log(2\Delta t)}$$

Le schéma d'ordre 2 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.06	instable	—	—
0.03	1.33	—	18s
0.015	0.51	—	35s
0.0075	0.133	1.57	67s
0.00375	0.033	1.97	132s

On retrouve bien les ordres des schémas, et si on se fixe une erreur à 5%, on peut estimer le temps de calcul des deux schémas.

Ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.065$ soit **70 s**

Ordre 2 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.0046$ soit **110 s**

Sur cet exemple élémentaire l'ordre 4 est environ 1.5 fois plus rapide. On peut maintenant faire quelques remarques entre les schémas sur le système et ceux écrits sur l'équation d'ordre deux.

On observe en premier lieu que le schéma d'ordre 2 écrit sur l'équation d'ordre 2 est complètement équivalent à celui écrit sur le système, il est légèrement plus rapide car, v comporte plus d'inconnues que u , la différence doit être plus importante en 3-D.

Les deux schémas d'ordre 4 sont quant eux bien distincts, il semblerait que le schéma d'ordre 4 écrit sur le système soit plus lent, mais sa limite de stabilité est plus élevée et il donne une erreur inférieure à pas de temps égal.

2.6 Validation numérique dans le cas absorbant

On vérifie qu'on garde le bon ordre de convergence sur le cas absorbant, détaillé dans la première partie. Le schéma d'ordre 4 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.02	$3.54e-4$	—	255s
0.01	$1.81e-5$	—	510s
0.005	$1.05e-6$	4.30	1011s
0.0025	—	4.03	2020s

La limite de stabilité est située entre $\Delta t = 0.02$ et $\Delta t = 0.03$.

Le schéma d'ordre 2 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.02	0.648	—	56s
0.01	0.181	—	109s
0.005	0.0457	1.90	216s
0.0025	0.0114	1.99	430s
0.00125	0.00286	1.99	856s

On se fixe une erreur à 5%, on peut estimer le temps de calcul des deux schémas.

Ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.028s$ soit **182 s**

Ordre 2 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.00526s$ soit **205 s**

La limite de stabilité est située vers $\Delta t = 0.028s$ pour l'ordre 4. Comme dans la première partie, la présence de la condition absorbante diminue fortement la CFL de l'ordre 4. On pourrait choisir comme remède de développer une méthode d'ordre 4 avec des pas de temps locaux, petits sur les éléments proches de la condition absorbante.

Chapter 3

Schéma d'ordre 4 en utilisant des PML

3.1 Formulation du problème dans les PML

La motivation de cette section est de construire un schéma d'ordre 4 en temps en substituant la condition absorbante par l'ajout de couches absorbantes PML (Perfectly Matched Layers). Dans le domaine Ω_{pml} , on utilise une formulation introduite par S. Fauqueux :

$$\begin{aligned}
 (3.1) \quad & \rho \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\vec{v}) - \sum_{k=1}^d \vec{v}^\diamond \cdot \vec{e}_k = 0 && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \frac{\partial \vec{v}^*}{\partial t} + \mathcal{T} \vec{v}^* = \vec{\nabla} u && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \frac{\partial \vec{v}^\diamond}{\partial t} + \mathcal{T}' \vec{v}^\diamond = \mathcal{T}' \vec{v} && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \mu^{-1} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \mu^{-1} \mathcal{T} \vec{v} = \frac{\partial \vec{v}^*}{\partial t} && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \frac{\partial u}{\partial n} = 0 && \text{sur } \partial\Omega_{pml}
 \end{aligned}$$

Les tenseurs \mathcal{T} et \mathcal{T}' sont diagonaux. Le domaine intérieur est un rectangle/parallépipède

$$\Omega = \prod_{i=1}^d [x_{i\min}, x_{i\max}]$$

On choisit un profil parabolique pour les coefficients d'amortissement

$$(3.2) \quad \tau_i(x_i) = \begin{cases} \frac{3c}{2a} v_\sigma \log(1000) \left(\frac{x_{i\min} - x_i}{a} \right)^2 & \text{pour } x_i \leq x_{i\min} \\ 0 & \text{pour } x_{i\min} \leq x_i \leq x_{i\max} \\ \frac{3c}{2a} v_\sigma \log(1000) \left(\frac{x_{i\max} - x_i}{a} \right)^2 & \text{pour } x_i \geq x_{i\max} \end{cases}$$

$$\tau_i'(x_i) = \frac{d\tau_i(x_i)}{dx_i}$$

c est la plus grande vitesse de l'onde dans le domaine
 a est l'épaisseur de la couche absorbante
 v_σ est un paramètre permettant de régler l'amortissement dans la PML.
 On a pris une condition de Neumann au bord de la PML.
 Dans le domaine physique, on conserve les mêmes équations

$$\begin{aligned}
 (3.3) \quad & \rho \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\vec{v}) = f \quad \text{dans } \Omega \\
 & \mu^{-1} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} - \vec{\nabla} u = 0 \quad \text{dans } \Omega
 \end{aligned}$$

On peut retrouver les équations du domaine physique en étendant les équations du domaine PML à tout le domaine, et en prenant $\mathcal{T} = 0$ $\mathcal{T}' = 0$. En pratique, on sépare les deux domaines pour des raisons évidentes de performance ! L'avantage immédiat de cette formulation est qu'elle est identique en 2-D et en 3-D, ce qui nous permet d'écrire un schéma unifié indépendant de la dimension. Le second avantage est que cette formulation est d'ordre un (absence de dérivées secondes en temps), ce qui permet d'utiliser des schémas "classiques" pour résoudre ce problème d'évolution. Comme dans la première section, on écrit les équations après la discrétisation en espace.

Dans le domaine intérieur :

$$\begin{aligned}
 (3.4) \quad & \frac{dU}{dt} = A^1 V + F \\
 & \frac{dV}{dt} = A^2 U
 \end{aligned}$$

Dans le domaine PML :

$$\begin{aligned}
 (3.5) \quad & \frac{dU}{dt} = A^1 V + S_h V^\diamond \\
 & \frac{dV^*}{dt} = T_h V^* + A^2 U \\
 & \frac{dV^\diamond}{dt} = T_h V^\diamond + T_h' V \\
 & \frac{dV}{dt} = T_h V + B_h \frac{dV^*}{dt}
 \end{aligned}$$

On note ϕ_i les fonctions de base associées à l'inconnue scalaire, prise dans H^1 . ψ_i les fonctions de base associées aux inconnues vectorielles prises dans L^2 .

$$\begin{aligned}
(D_h)_{i,j} &= \int_{\Omega} \phi_i \phi_j \\
(D_h A^1)_{i,j} &= - \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \psi_j \\
(D_h S_h)_{i,j} &= \int_{\Omega} \sum_{k=1}^d \phi_i \psi_j \cdot \vec{e}_k \\
(\tilde{B}_h)_{i,j} &= \int_{\Omega} \psi_i \cdot \psi_j \\
(B_h^2)_{i,j} &= \int_{\Omega} \mu^{-1} \psi_i \cdot \psi_j \\
(B_h^2 A^2)_{i,j} &= \int_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \psi_i \\
(\tilde{B}_h T_h)_{i,j} &= - \int_{\Omega} \mathcal{T} \psi_j \cdot \psi_i \\
(\tilde{B}_h T_h')_{i,j} &= \int_{\Omega} \mathcal{T}' \psi_j \cdot \psi_i \\
(\tilde{B}_h B_h)_{i,j} &= \int_{\Omega} \psi_j \cdot \psi_i
\end{aligned}$$

3.2 Application de la technique de l'équation modifiée

On utilise les deux développements suivants ;

$$(3.6) \quad \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = \frac{dU}{dt} + \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 U}{dt^3} + O(\Delta t^4)$$

$$(3.7) \quad \frac{V^{n+3/2} + V^{n+1/2}}{2} = V + \frac{\Delta t^2}{8} \frac{d^2 V}{dt^2} + O(\Delta t^4)$$

On obtient alors le schéma suivant dans les PML

$$\begin{aligned}
\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 U}{dt^3} &= A^1 V^{n+1/2} + S_h V^{\diamond n+1/2} \\
\frac{V^{*n+3/2} - V^{*n+1/2}}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 V^*}{dt^3} &= T_h \frac{V^{*n+3/2} + V^{*n+1/2}}{2} - \frac{\Delta t^2}{8} T_h \frac{d^2 V^*}{dt^2} + A^2 U^{n+1} \\
\frac{V^{\diamond n+3/2} - V^{\diamond n+1/2}}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 V^\diamond}{dt^3} &= T_h \frac{V^{\diamond n+3/2} + V^{\diamond n+1/2}}{2} - \frac{\Delta t^2}{8} T_h \frac{d^2 V^\diamond}{dt^2} \\
&\quad + T_h' \frac{V^{n+3/2} + V^{n+1/2}}{2} - \frac{\Delta t^2}{8} T_h' \frac{d^2 V}{dt^2} \\
\frac{V^{n+3/2} - V^{n+1/2}}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} \frac{d^3 V}{dt^3} &= T_h \frac{V^{n+3/2} + V^{n+1/2}}{2} - \frac{\Delta t^2}{8} T_h \frac{d^2 V}{dt^2} \\
&\quad + B_h \frac{V^{*n+3/2} - V^{*n+1/2}}{\Delta t} - \frac{\Delta t^2}{24} B_h \frac{d^3 V^*}{dt^3}
\end{aligned}$$

On va maintenant réutiliser les équations pour estimer les dérivées tierces, et exprimer le schéma uniquement avec des dérivées secondes. On a

$$\begin{aligned}
\frac{d^3 U}{dt^3} &= A^1 \frac{d^2 V}{dt^2} + S_h \frac{d^2 V^\diamond}{dt^2} \\
\frac{d^3 V^*}{dt^3} &= T_h \frac{d^2 V^*}{dt^2} + A^2 \frac{d^2 U}{dt^2} \\
\frac{d^3 V^\diamond}{dt^3} &= T_h \frac{d^2 V^\diamond}{dt^2} + T_h' \frac{d^2 V}{dt^2} \\
\frac{d^3 V}{dt^3} &= T_h \frac{d^2 V}{dt^2} + B_h \frac{d^3 V^*}{dt^3}
\end{aligned}$$

Le schéma dans les PML s'écrit alors

$$\begin{aligned}
U^{n+1} &= U^n + \Delta t (A^1 V^{n+1/2} + S_h V^{\diamond n+1/2}) + \frac{\Delta t^3}{24} \left(A^1 \frac{d^2 V}{dt^2} + S_h \frac{d^2 V^\diamond}{dt^2} \right) \\
\left(I - \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{*n+3/2} &= \left(I + \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{*n+1/2} + \Delta t A^2 U^{n+1} - \frac{\Delta t^3}{12} T_h \frac{d^2 V^*}{dt^2} + \frac{\Delta t^3}{24} A^2 \frac{d^2 U}{dt^2} \\
\left(I - \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{n+3/2} &= \left(I + \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{n+1/2} + B_h (V^{*n+3/2} - V^{*n+1/2}) - \frac{\Delta t^3}{12} T_h \frac{d^2 V}{dt^2} \\
\left(I - \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{\diamond n+3/2} &= \left(I + \frac{\Delta t T_h}{2} \right) V^{\diamond n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} T_h' (V^{n+3/2} + V^{n+1/2}) - \frac{\Delta t^3}{12} T_h \frac{d^2 V^\diamond}{dt^2} - \frac{\Delta t^3}{12} T_h' \frac{d^2 V}{dt^2}
\end{aligned}$$

On calcule les dérivées secondes ;

$$\begin{aligned}
\frac{d^2V}{dt^2}(n+1/2) &= T_h \frac{dV}{dt} + B_h \left(T_h \frac{dV^*}{dt} + A^2 \frac{dU}{dt} \right) \\
&= T_h^2 V^{n+1/2} + T_h B_h (T_h V^{*n+1/2} + A^2 U^{n+1/2}) \\
&\quad + B_h \left[T_h^2 V^{*n+1/2} + T_h A^2 U^{n+1/2} + A^2 (A^1 V^{n+1/2} + S_h V^{\diamond n+1/2}) \right] \\
&= T_h^2 V^{n+1/2} + 2T_h B_h (T_h V^{*n+1/2} + A^2 U^{n+1/2}) + B_h A^2 (A^1 V^{n+1/2} + S_h V^{\diamond n+1/2})
\end{aligned}$$

Dans la dernière équation, on a utilisé le fait que B_h permute avec T_h , ce qui est le cas en milieu isotrope. On explicitera ultérieurement comment on calcule $U^{n+1/2}$. Deux alternatives s'offrent à nous, soit prendre une expression décentrée, soit garder une expression centrée avec une estimation d'ordre 2 de U^{n+1} .

$$\begin{aligned}
\frac{d^2V^\diamond}{dt^2}(n+1/2) &= T_h \frac{dV^\diamond}{dt} + T_h' \frac{dV}{dt} \\
&= (T_h T_h' + T_h' T_h) V^{n+1/2} + T_h^2 V^{\diamond n+1/2} + T_h' B_h (T_h V^{*n+1/2} + A^2 U^{n+1/2})
\end{aligned}$$

On explicite maintenant les dérivées secondes dont on a besoin au temps $n+1$.

$$\begin{aligned}
\frac{d^2U}{dt^2}(n+1) &= A^1 \frac{dV}{dt} + S_h \frac{dV^\diamond}{dt} \\
&= A^1 \left[T_h V^{n+1} + B_h (T_h V^{*n+1} + A^2 U^{n+1}) \right] + S_h (T_h V^{\diamond n+1} + T_h' V^{n+1})
\end{aligned}$$

Le même problème se pose pour le calcul de V^{n+1} que pour le calcul de $U^{n+1/2}$.

$$\begin{aligned}
\frac{d^2V^*}{dt^2}(n+1) &= T_h (T_h V^{*n+1} + A^2 U^{n+1}) + A^2 (A^1 V^{n+1} + S_h V^{\diamond n+1}) \\
\frac{d^2V}{dt^2}(n+1) &= T_h^2 V^{n+1} + T_h B_h (T_h V^{*n+1} + A^2 U^{n+1}) + B_h \frac{d^2V^*}{dt^2}(n+1) \\
\frac{d^2V^\diamond}{dt^2}(n+1) &= (T_h T_h' + T_h' T_h) V^{n+1} + T_h^2 V^{\diamond n+1} + T_h' B_h (T_h V^{*n+1} + A^2 U^{n+1})
\end{aligned}$$

3.2.1 Utilisation de termes centrées

On peut utiliser l'approximation suivante

$$U^{n+1/2} = \frac{U^n + U^{n+1}}{2}$$

L'inconvénient est qu'on aboutit à un schéma implicite au niveau des PML, ce qui est prohibitif au niveau du temps de calcul, surtout en 3-D. On peut contourner ce problème en appliquant la technique suivante

- Calcul de $U^{n+1} V^{*n+3/2} V^{\diamond n+3/2} V^{n+3/2}$ à l'aide du schéma d'ordre 2

- Calcul de $U^{n+1/2} = \frac{U^n + U^{n+1}}{2}$ en utilisant ces valeurs, idem pour V^{*n+1} $V^{\diamond n+1}$ V^{n+1}
- Calcul complet de U^{n+1} $V^{*n+3/2}$ $V^{\diamond n+3/2}$ $V^{n+3/2}$ à l'ordre 4

L'approximation de $U^{n+1/2}$ est d'ordre 2, on garde globalement un schéma d'ordre 4.

3.2.2 Utilisation de termes décentrés

On peut également utiliser une évaluation d'ordre 2 décentré

$$U^{n+1/2} = \frac{3U^n - U^{n-1}}{2}$$

Comme les PML sont absorbantes, le décentrage rajoute de l'absorption, ce qui est peu gênant ! Le choix d'une technique doit se faire vis-à-vis de la stabilité. Les résultats numériques présentés ont été réalisés en utilisant des termes décentrés.

3.3 Résultats numériques

On utilise le même cas test que dans le cas de la condition absorbante. On diffracte un disque diélectrique avec un point source. En revanche, on choisit cette fois un domaine carré entouré de couches absorbantes. Le maillage est relativement bien régulier, comme on peut le voir sur la figure 3.1.

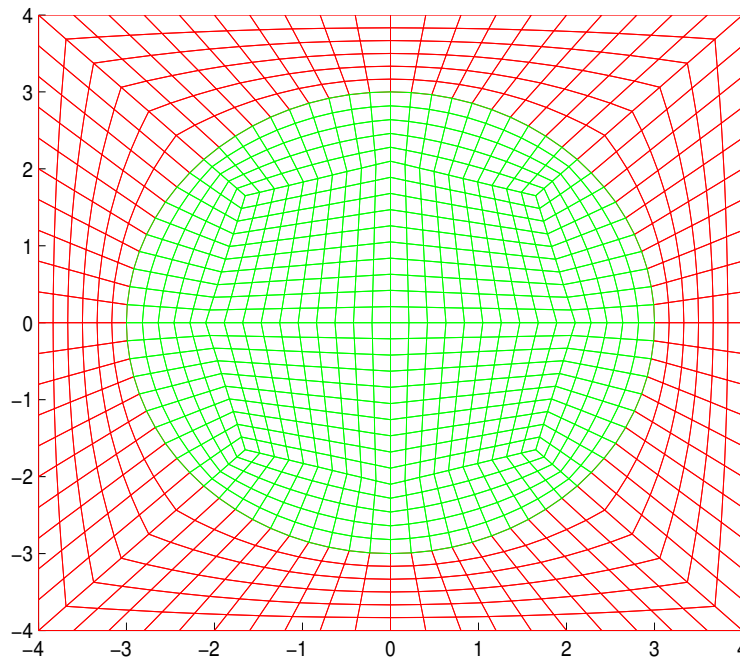


Figure 3.1: Maillage utilisé pour les simulations numériques

Le schéma d'ordre 4 donne les résultats suivants ($v_{\sigma} = 1.2$)

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.04	0.080	—	165s
0.02	$2.88e-4$	—	325s
0.01	$1.79e-5$	8.2	648s
0.005	$1.05e-6$	4.01	1293s
0.0025	—	4.00	2575s

La limite de stabilité est située entre $\Delta t = 0.05$ et $\Delta t = 0.06$. On peut comparer les sismogrammes obtenus avec les PML, par rapport à la condition absorbante sur la figure 3.2.

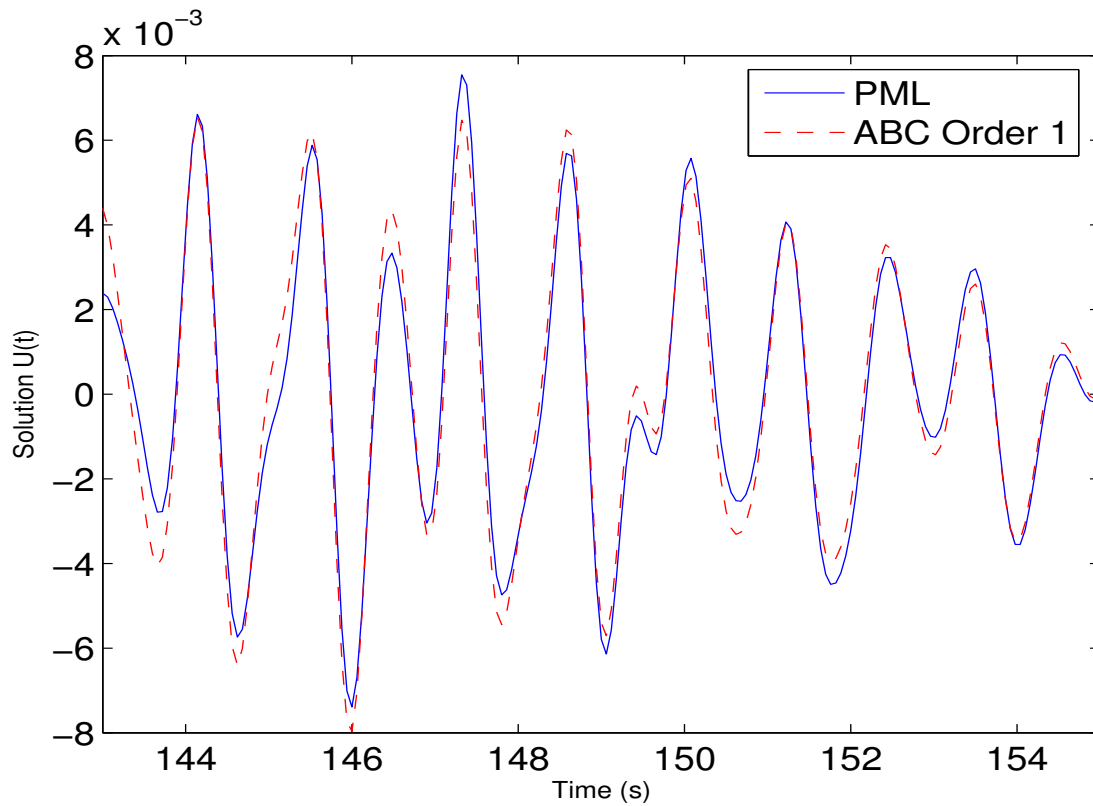


Figure 3.2: Sismogrammes avec condition absorbante et PML

Le schéma d'ordre 2 donne les résultats suivants

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.04	<i>instable</i>	—	—
0.02	0.653	—	109s
0.01	0.183	—	216s
0.005	0.0462	1.90	430s
0.0025	0.0116	1.99	854s
0.00125	0.00289	2.00	1705s

On se fixe une erreur à 5%, on peut estimer le temps de calcul des deux schémas.

Ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.038s$ soit **176 s**

Ordre 2 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.00523s$ soit **412 s**

La limite de stabilité est située vers $\Delta t = 0.052s$ pour l'ordre 4. La présence des PML diminue aussi la CFL, comme dans le cas de la condition absorbante. La CFL dépend en fait de l'amortissement ν_σ . Mais on remarque, que proche de la CFL, on commet une erreur non-négligeable. Quand on utilise de l'ordre 2, il est souvent préférable d'être bien en-dessous de la CFL d'au moins un facteur 10 ! Pour l'ordre 4, on peut se contenter de la CFL divisée par deux. Ces conclusions ne sont valables que sur cet exemple numérique. Il serait judicieux d'étudier le comportement de la solution quand on diminue à la fois le pas d'espace et le pas de temps. Il serait également intéressant de comparer les deux schémas lorsqu'on utilise des maillages pourris. Dans ce cas-là, le facteur limitant n'est plus la précision, mais plutôt la stabilité.

3.4 Comparaison avec d'autres schémas plus classiques

3.4.1 Schémas de Runge-Kutta

On compare avec le schéma de Runge-Kutta d'ordre 4. Sur l'équation ;

$$\frac{dX}{dt} = BX + F(t) = G(t, X)$$

il s'écrit

$$\begin{aligned}
 k_1 &= G(t_n, X^n) \\
 k_2 &= G\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, X^n + \frac{\Delta t}{2}k_1\right) \\
 k_3 &= G\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}, X^n + \frac{\Delta t}{2}k_2\right) \\
 k_4 &= G(t_n + \Delta t, X^n + \Delta tk_3) \\
 X^{n+1} &= X^n + \frac{\Delta t}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
 \end{aligned}$$

Sur le cas PML, il donne les résultats suivants :

Δt	Erreur	Ordre	Temps
0.04	<i>instable</i>	—	—
0.02	$4.59e-3$	—	415s
0.01	$2.87e-4$	—	830s
0.005	$1.79e-5$	4.00	1660s
0.0025	$1.05e-6$	4.00	3320s

La limite de stabilité est située vers $\Delta t = 0.028s$. L'erreur commise sur le sismo est alors de 1.7%

RK d'ordre 4 : 5% d'erreur pour $\Delta t = 0.028s$ soit **298 s**

On peut noter, que le schéma d'ordre 4 utilisant la technique de l'équation modifiée a une constante plus petite que le schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 et une limite de stabilité plus élevée sur ce cas test. Un autre désavantage de ce schéma Runge-Kutta, est qu'il coûte 4 évaluations de G contre 3 pour le schéma équation modifiée. Il est donc plus lent et moins précis ! Il reste néanmoins plus compétitif que le schéma d'ordre 2.

3.4.2 Relation d'un schéma Runge-Kutta avec les séries de Taylor

Si on considère l'équation différentielle

$$\frac{dX}{dt} = BX$$

B étant un opérateur linéaire. On peut alors expliciter par exemple le schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 :

$$k_1 = BX^n$$

$$k_2 = B\left(X^n + \frac{\Delta t}{2}BX^n\right) = BX^n + \frac{\Delta t}{2}B^2X^n$$

$$k_3 = B(X^n + \frac{\Delta t}{2}(BX^n + \frac{\Delta t}{2}B^2X^n)) = BX^n + \frac{\Delta t}{2}B^2X^n + \frac{\Delta t^2}{4}B^3X^n$$

$$k_4 = BX^n + \Delta t B^2X^n + \frac{\Delta t^2}{2}B^3X^n + \frac{\Delta t^3}{4}B^4X^n$$

En regroupant les puissances de B, on obtient le schéma :

$$X^{n+1} = X^n + \Delta t BX^n + \frac{\Delta t^2}{2}B^2X^n + \frac{\Delta t^3}{6}B^3X^n + \frac{\Delta t^4}{24}B^4X^n$$

Ce qu'on peut réinterpréter comme,

$$X^{n+1} = X^n + \Delta t \frac{dX}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2X}{dt^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3X}{dt^3} + \frac{\Delta t^4}{24} \frac{d^4X}{dt^4}$$

où on a une puissance de B pour la dérivée n-ième de X en utilisant l'équation. Dans le cas de systèmes linéaires, il est probable que certains schémas de Runge-Kutta, comme celui qu'on a utilisé soient complètement équivalents à un schéma "série de Taylor". Pour l'équation des ondes, B n'est pas un opérateur linéaire, mais un opérateur affine à cause de la source ! Des expériences numériques ont montré que le schéma "séries de Taylor" d'ordre 4 et le schéma RK4 n'étaient pas équivalents, mais les résultats sont très proches.

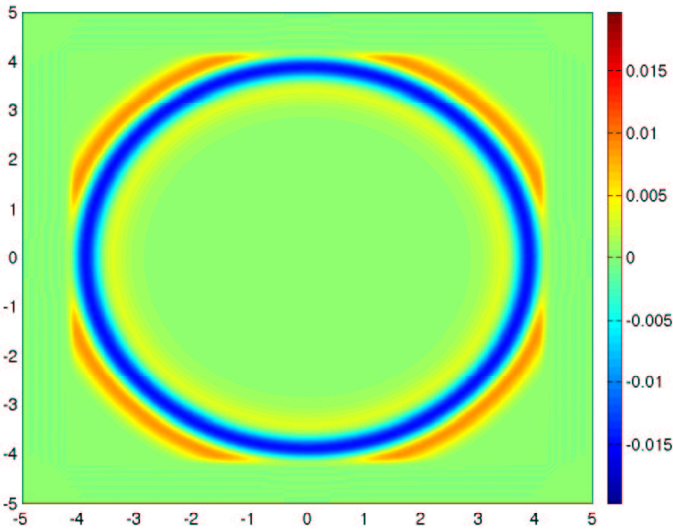
3.5 Instabilité des PML ?

3.5.1 Formulation “instable”

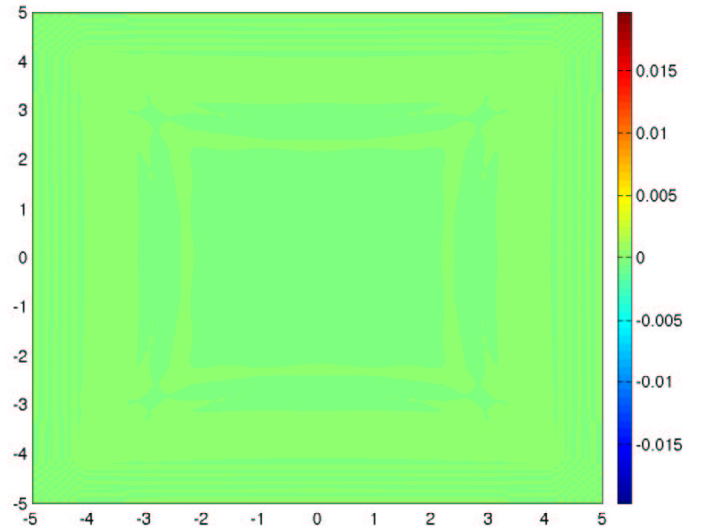
Lors de multiples expériences numériques, nous avons identifié des instabilités dans les PML. Dans cette section, nous allons présenter ces instabilités, mais nous n’avons aucune justification théorique expliquant ce phénomène ! Nous rappelons la formulation PML qu’on a choisi

$$\begin{aligned}
 (3.8) \quad & \rho \frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\vec{v}) - \sum_{k=1}^d \vec{v}^\diamond \cdot \vec{e}_k = 0 && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \frac{\partial \vec{v}^*}{\partial t} + \mathcal{T} \vec{v}^* = \vec{\nabla} u && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \frac{\partial \vec{v}^\diamond}{\partial t} + \mathcal{T}' \vec{v}^\diamond = \mathcal{T}' \vec{v} && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & \mu^{-1} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \mu^{-1} \mathcal{T} \vec{v} = \frac{\partial \vec{v}^*}{\partial t} && \text{dans } \Omega_{pml} \\
 & u = 0 && \text{sur } \partial\Omega_{pml}
 \end{aligned}$$

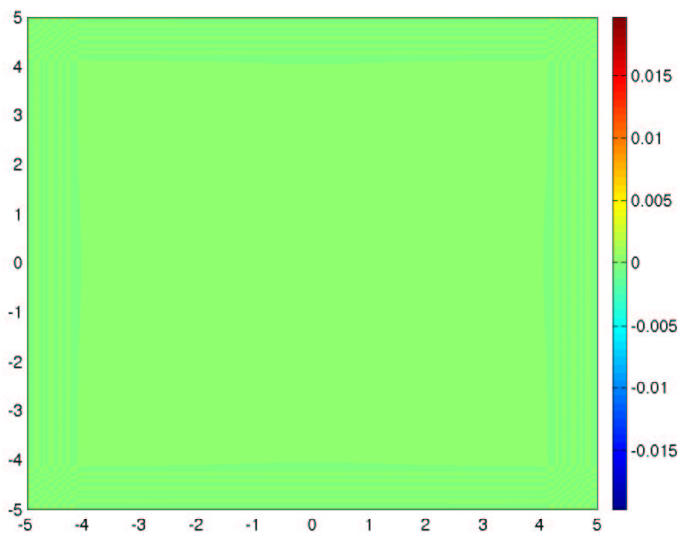
On a discrétisé cette formulation avec des éléments finis quadrilatéraux avec condensation de masse. L’inconnue scalaire est prise dans H^1 et les inconnues vectorielles dans L^2 . Les expériences numériques sont menées sur le carré 8x8 entouré de couches absorbantes. On impose une condition de Dirichlet sur le bord de PML, mais les résultats numériques sont identiques dans le cas Neumann. Le milieu est homogène isotrope $\rho = 1, \mu = 1$. On prend une gaussienne en espace de rayon de distribution 0.3 et un Rickert en temps avec une fréquence de 1. On choisit un maillage Q5 avec trois éléments par longueur d’onde, $\nu_\sigma = 50$. On observe les instabilités sur la figure 3.5.1 et 3.5.1.



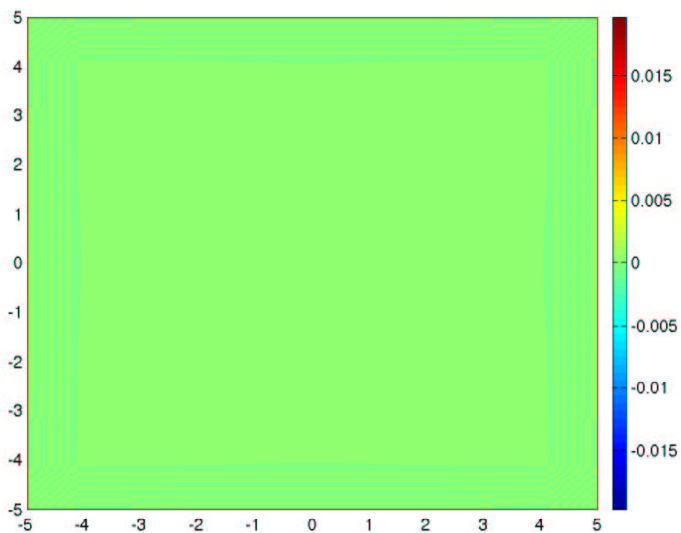
t = 5s



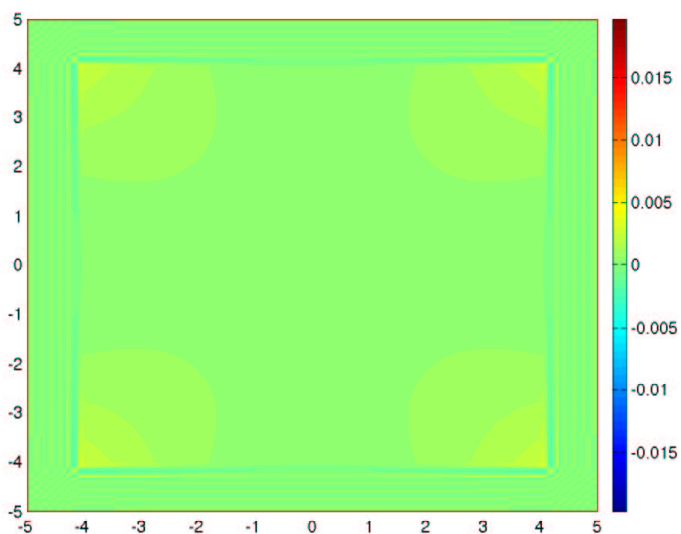
t = 15s



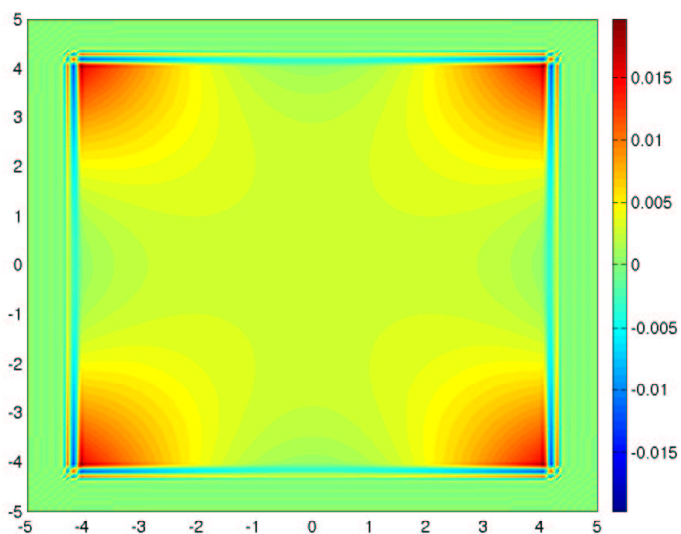
$t = 25s$



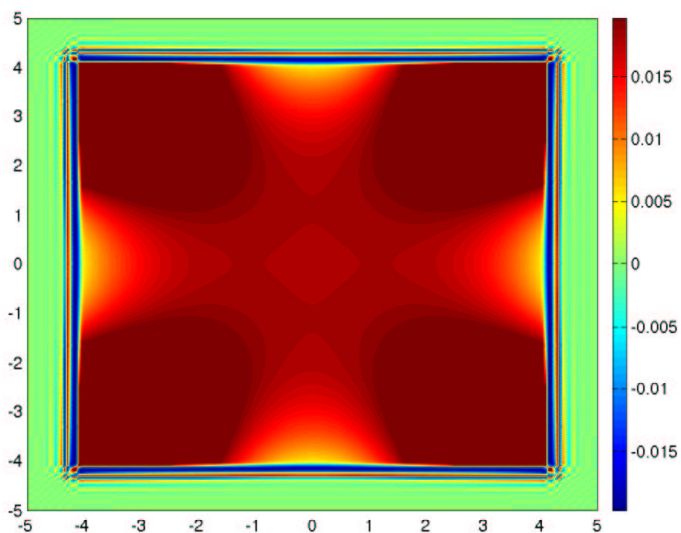
$t = 35s$



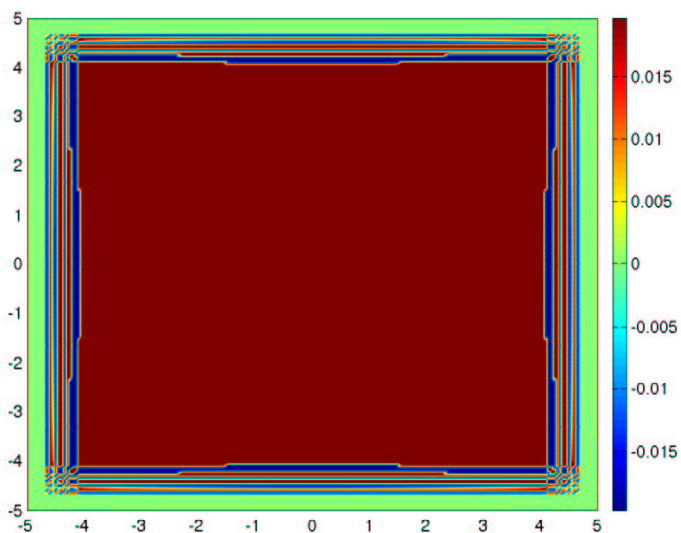
$t = 45s$



$t = 55s$



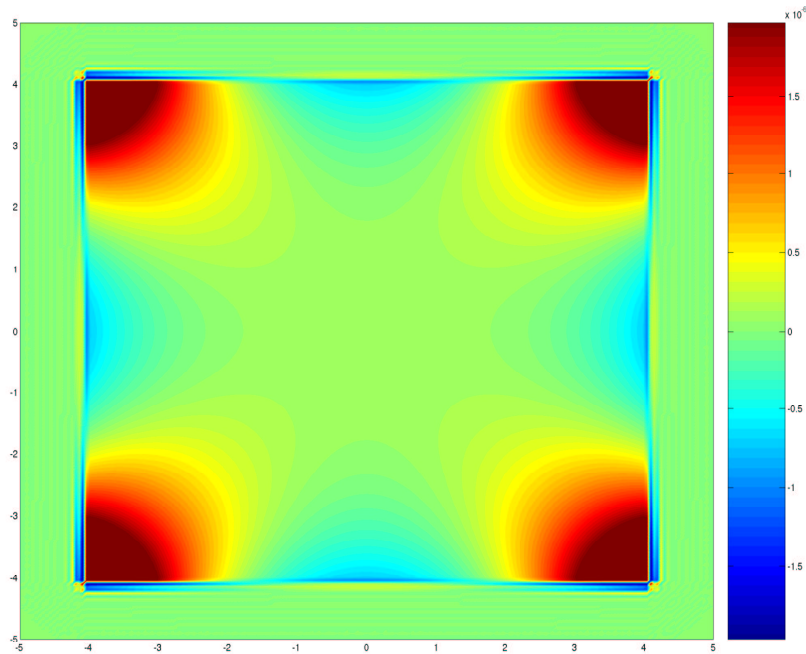
$t = 65s$



$t = 95s$

Figure 3.3: Evolution de la solution à différents instants

Quand on raffine le maillage, les instabilités diminuent fortement et sont repoussées à des temps longs. On affiche sur la figure 3.4 la solution pour un maillage avec 5 éléments par longueur d'onde $\nu_\sigma = 50$, pour $t = 95s$, mais en multipliant par 10 000 l'échelle par rapport aux figures précédentes



$t = 95s$

Figure 3.4: Instabilité se développant sur un maillage plus fin

On peut également afficher sur la figure 3.5 la norme de la solution, qui devrait tendre vers zero. On affiche la norme pour trois maillages avec des pas d'espace différents : trois, quatre et cinq éléments par longueur d'onde.

On voit nettement que l'instabilité se développe très lentement sur des maillages suffisamment fins. En ordonnée, on a utilisé une échelle logarithmique, l'instabilité est exponentielle. Le choix de ν_σ est à ce titre très important. En effet pour $\nu_\sigma = 50$, il est certain que de prendre trois éléments par longueur d'onde est largement insuffisant, car on a une couche limite qui est plus petite que la taille d'une maille ! Pour des amortissements aussi importants, il est conseillé de raffiner le maillage dans la PML. On regarde l'influence de l'amortissement sur les instabilités sur la figure 3.6.

Dans cette expérience, on a l'illusion que pour $\nu_\sigma = 2$, le schéma est stable, ce qui est faux. On affiche le logarithme de la norme de la solution pour t allant de **50s** à **950s** sur la figure 3.7.

Des expériences numériques 3-D, qu'on a représentées sur la figure 3.5.1 et 3.8, nous permettent d'affirmer que cette formulation donne lieu également à des instabilités, comme on peut le voir ;

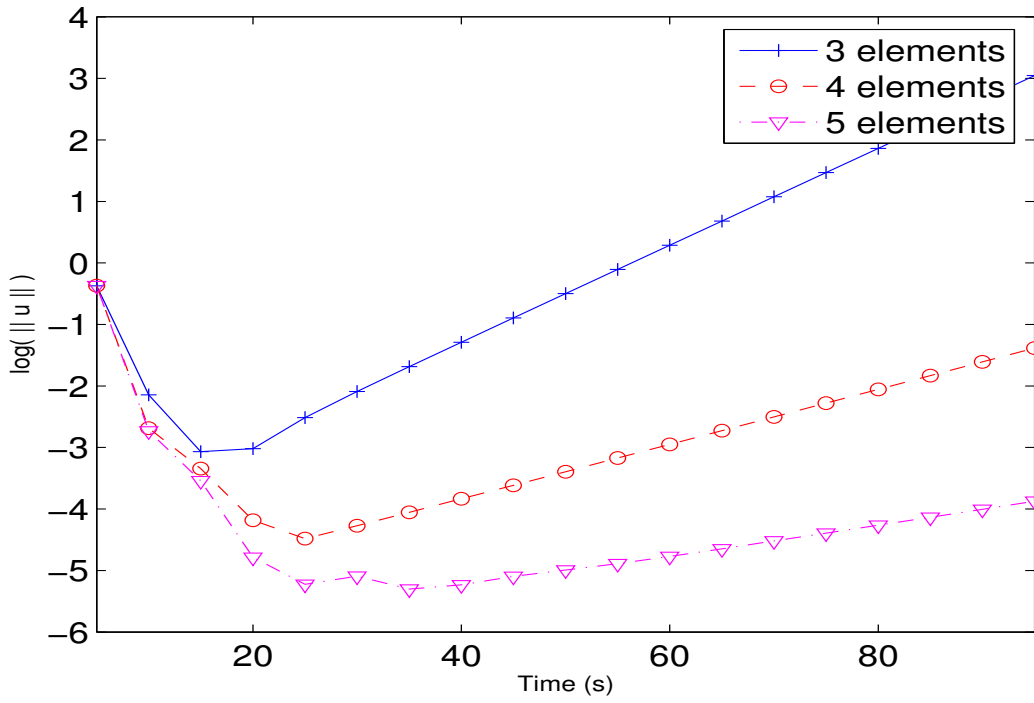


Figure 3.5: Logarithme en base 10 de la norme de la solution en fonction du temps

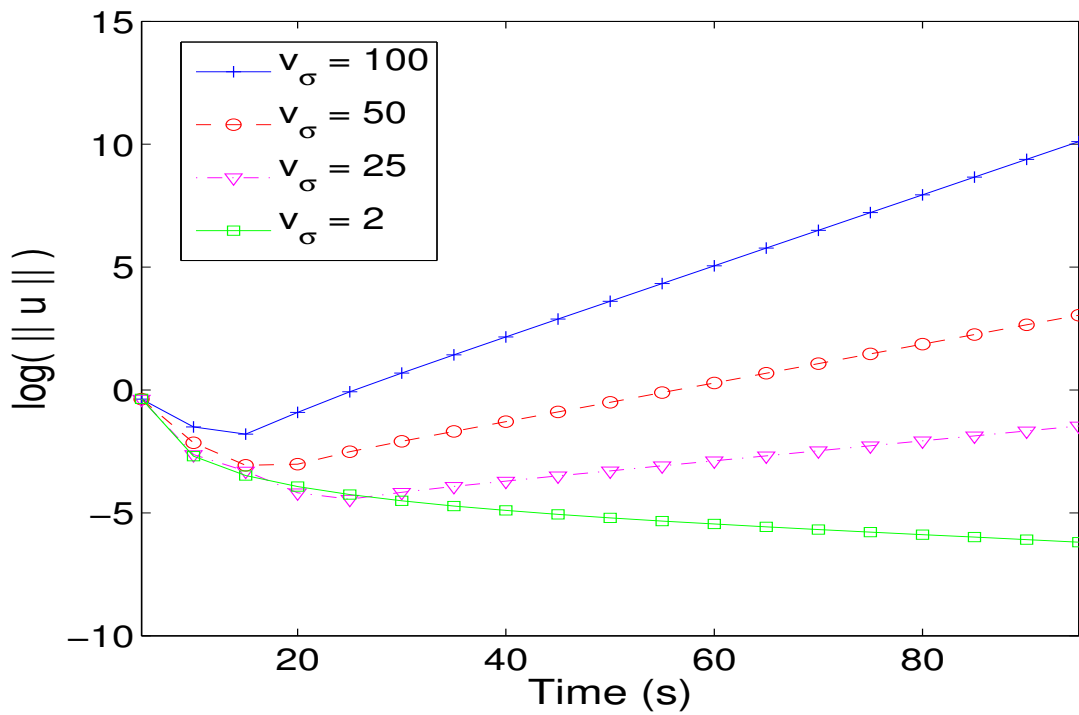


Figure 3.6: Logarithme de la norme de la solution en fonction du temps pour différentes valeurs de ν_σ

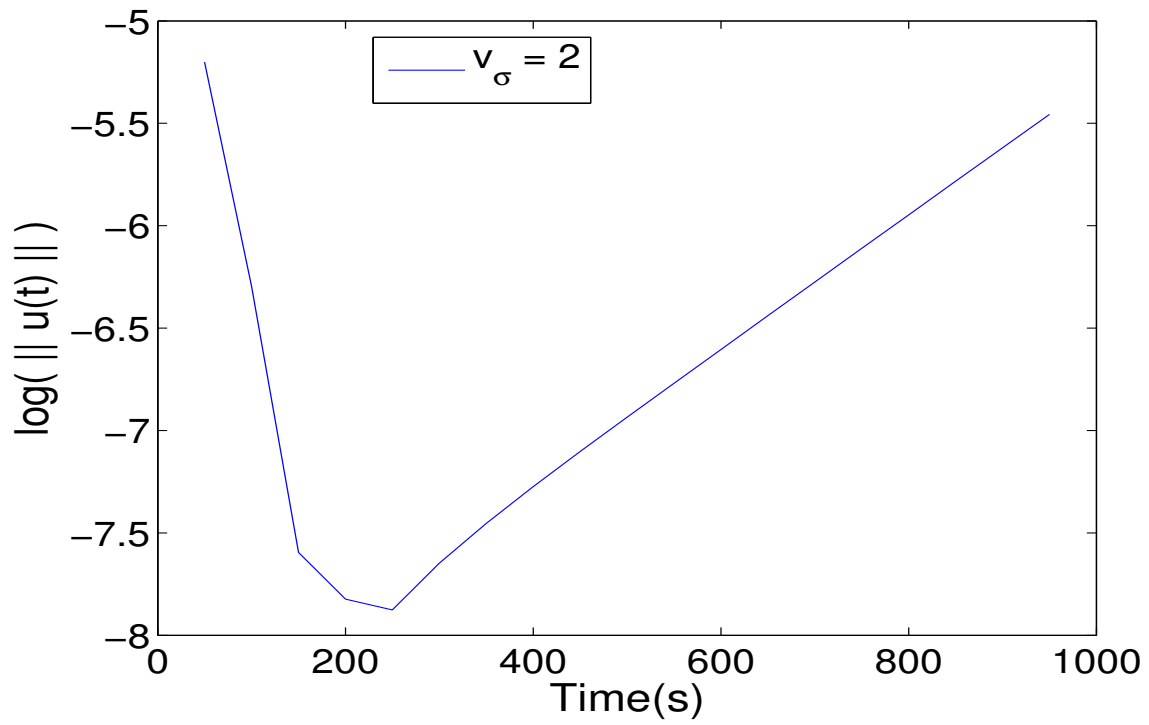
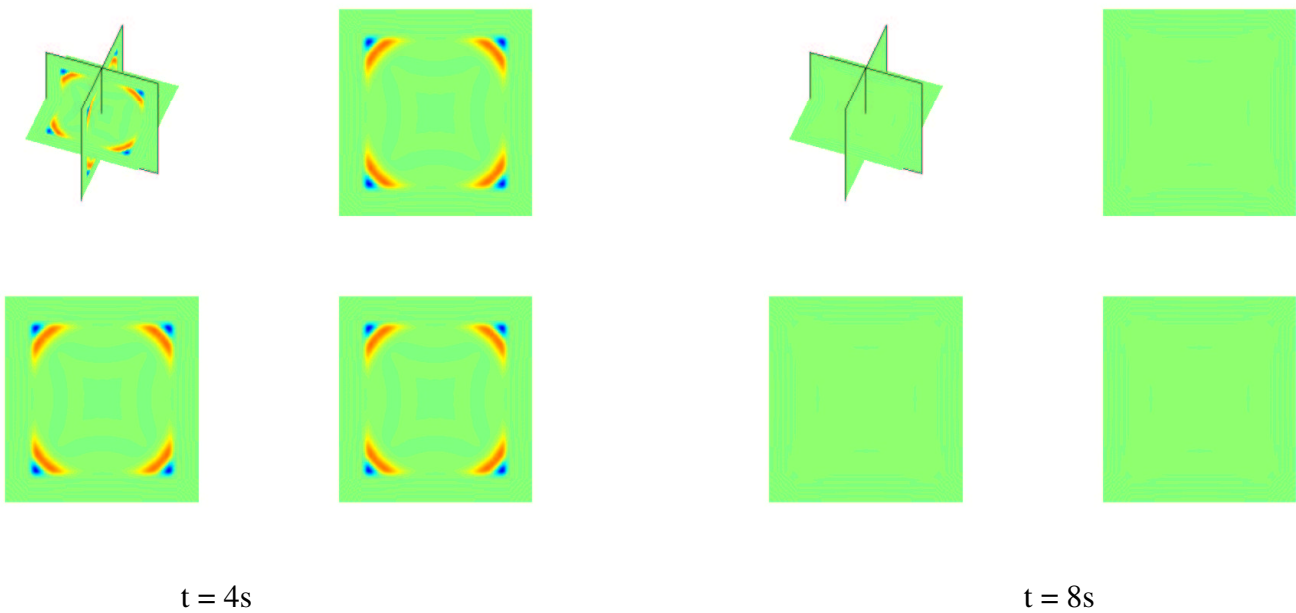


Figure 3.7: $\log(\|U(t)\|)$ pour $v_\sigma = 2$ sur des temps longs, jusqu'à 950s.



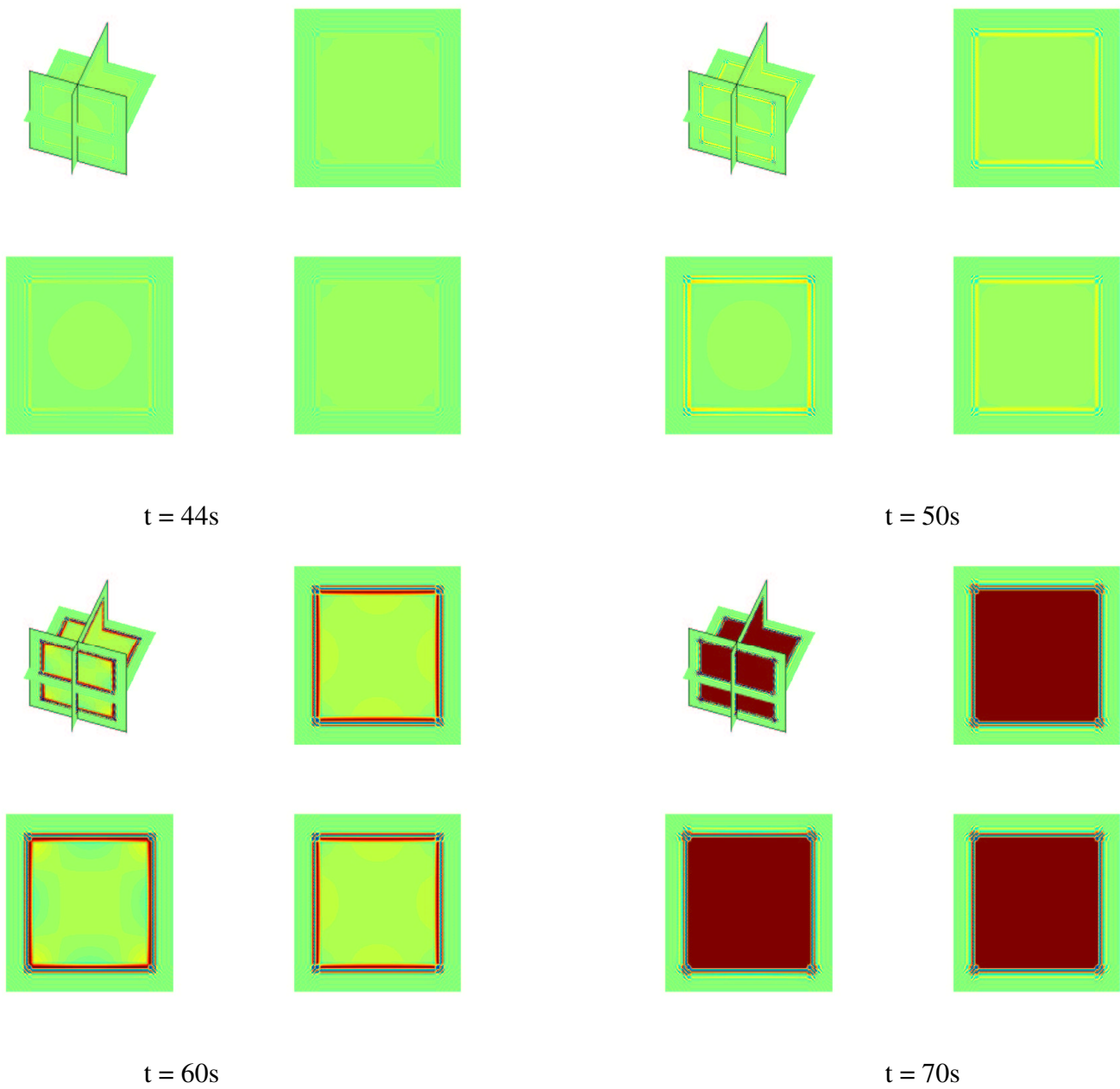


Figure 3.8: Solution numérique sur un maillage $4 \times 4 \times 4$ longueurs d'onde, $\nu_\sigma = 5$ avec trois éléments par longueur d'onde et du Q5. Apparition d'une instabilité à partir de $t = 42s$, et croissance exponentielle ...

Là aussi, on observe une instabilité exponentielle ! Ces instabilités sont obtenues que ce soit avec un schéma d'ordre deux en temps, d'ordre 4 avec l'équation modifiée ou avec un schéma de Runge-Kutta. Les résultats sont identiques et semblent ne pas dépendre du schéma en temps. On peut s'interroger sur la nuisance d'une telle instabilité. Il nous apparait clairement que ce type d'instabilités n'est pas nuisible pour la plupart des cas. En effet si on veut avoir une solution précise pour des temps longs, on est amené à raffiner le maillage en espace, et par là même on éloigne l'instabilité ! Si on veut utiliser les PML dans des milieux hétérogènes avec des forts contrastes de vitesses, il est important de mailler suffisamment la PML, dans les zones où la vitesse est faible. Comme ultime argument, si on calcule l'erreur $u(x,T)$ à T fixé, on convergera vers la solution quand $(\Delta t, \Delta x)$ tend vers zéro. L'ordre de convergence sera alors de 4, si on utilise du Q3, Q4 ou Q5 avec le schéma d'ordre 4 qu'on a présenté. A ce titre-là, est-ce vraiment une stabilité, puisqu'on a la convergence ? On notera qu'aucune instabilité n'a été observée en Q1, mais Q1 donne des résultats faux sur des temps longs, alors le fait que ce soit stable ne nous réjouit pas outre mesure...

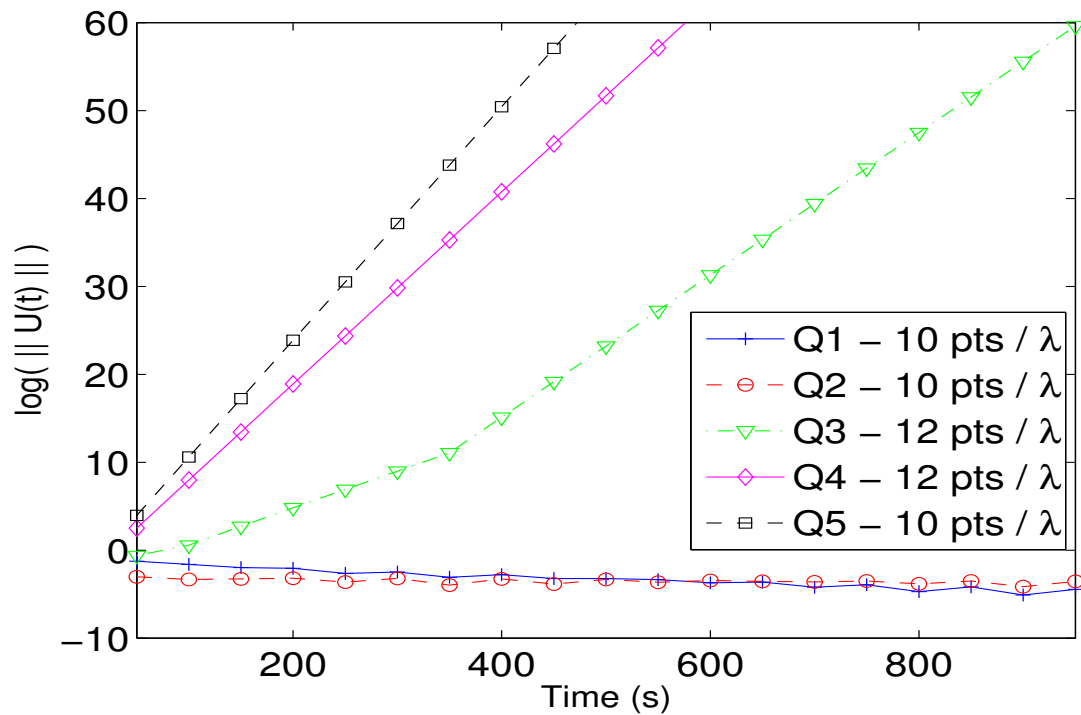


Figure 3.9: Logarithme de la norme de la solution sur des temps longs, de 50s à 950s, pour plusieurs ordres d'approximation et $\nu_\sigma = 50$.

Dans cette dernière expérience - cf figure 3.9 -, on a voulu comparer l'évolution d'instabilité pour divers ordres d'approximations. $\nu_\sigma = 50$, et le maillage n'est pas adapté à cet amortissement, on prend un maillage avec environ 10 points par longueur d'onde. On confirme que Q1 est stable, et l'énergie converge vers zéro. Q2 n'est pas vraiment stable, ni vraiment instable. De fait, on observe qu'une solution oscillante perdure, sans jamais tendre vers zéro, ni exploser ! A partir de Q3, on observe une instabilité d'autant plus forte que l'ordre d'approximation est élevé.

3.5.2 Formulation “stable”

En 2-D, on a la formulation suivante des PML

$$\begin{aligned}
 \rho \frac{du^\heartsuit}{dt} - \operatorname{div}(\vec{v}) &= 0 \\
 \frac{d\vec{v}^\heartsuit}{dt} &= \nabla u \\
 (3.9) \quad \frac{d^2 u}{dt^2} + (\tau_1 + \tau_2) \frac{du}{dt} + \tau_1 \tau_2 u &= \frac{d^2 u^\heartsuit}{dt^2} \\
 \mu^{-1} \frac{d\vec{v}}{dt} + \mu^{-1} \mathcal{T} \vec{v} &= \frac{d\vec{v}^\heartsuit}{dt} + \tau_1 \tau_2 \mathcal{T}^{-1} \vec{v}^\heartsuit \\
 u &= 0 \text{ sur } \partial\Omega_{pml}
 \end{aligned}$$

Dans cette formulation, on a les inconnues $u, v, u^\heartsuit, v^\heartsuit$, soit deux inconnues scalaires et deux inconnues vectorielles. Mais on a des dérivées secondes en temps. Dans la première formulation, on avait comme inconnues u, v, v^*, v^\diamond , soit une inconnue scalaire et trois inconnues vectorielles. On a en revanche, uniquement des dérivées premières en temps. Dans la première formulation, on a introduit les dérivées en fonction de l'espace de l'amortissement dans la PML, tandis que ces dérivées sont absentes de la seconde formulation. Après discrétisation en espace, la seconde formulation aboutit au système semi-discret :

$$\begin{aligned}
 \frac{dU^\heartsuit}{dt} &= A^1 V \\
 \frac{dV^\heartsuit}{dt} &= A^2 U \\
 (3.10) \quad \frac{d^2 U}{dt^2} + \Sigma_{h,1} \frac{dU}{dt} + \Sigma_{h,2} U &= \frac{d^2 U^\heartsuit}{dt^2} \\
 \frac{dV}{dt} &= T_{h,1} V + \frac{dV^\heartsuit}{dt} + T_h^2 V^\heartsuit
 \end{aligned}$$

Pour résoudre cette EDO, on utilise un schéma saute-mouton d'ordre 2 :

$$\begin{aligned}
 (3.11) \quad \frac{U^{\heartsuit n+1} - U^{\heartsuit n}}{\Delta t} &= A^1 V^{n+1/2} \\
 \frac{U^{n+1} - 2U^n + U^{n-1}}{\Delta t^2} &= -\Sigma_{h,1} \frac{U^{n+1} - U^{n-1}}{2\Delta t} - \Sigma_{h,2} \frac{U^{n+1} + 2U^n + U^{n-1}}{4} + \frac{U^{\heartsuit n+1} - 2U^{\heartsuit n} + U^{\heartsuit n-1}}{\Delta t^2} \\
 \frac{V^{\heartsuit n+3/2} - V^{\heartsuit n+1/2}}{\Delta t} &= A^2 U^{n+1} \\
 \frac{V^{n+3/2} - V^{n+1/2}}{\Delta t} &= T_{h,1} \frac{V^{n+3/2} + V^{n+1/2}}{2} + T_{h,2} \frac{V^{\heartsuit n+3/2} + V^{\heartsuit n+1/2}}{2} + \frac{V^{\heartsuit n+3/2} - V^{\heartsuit n+1/2}}{\Delta t}
 \end{aligned}$$

Comme dans le cas de la première formulation, on affiche le logarithme de la norme de U pour différentes valeurs de σ , sur la figure 3.10.

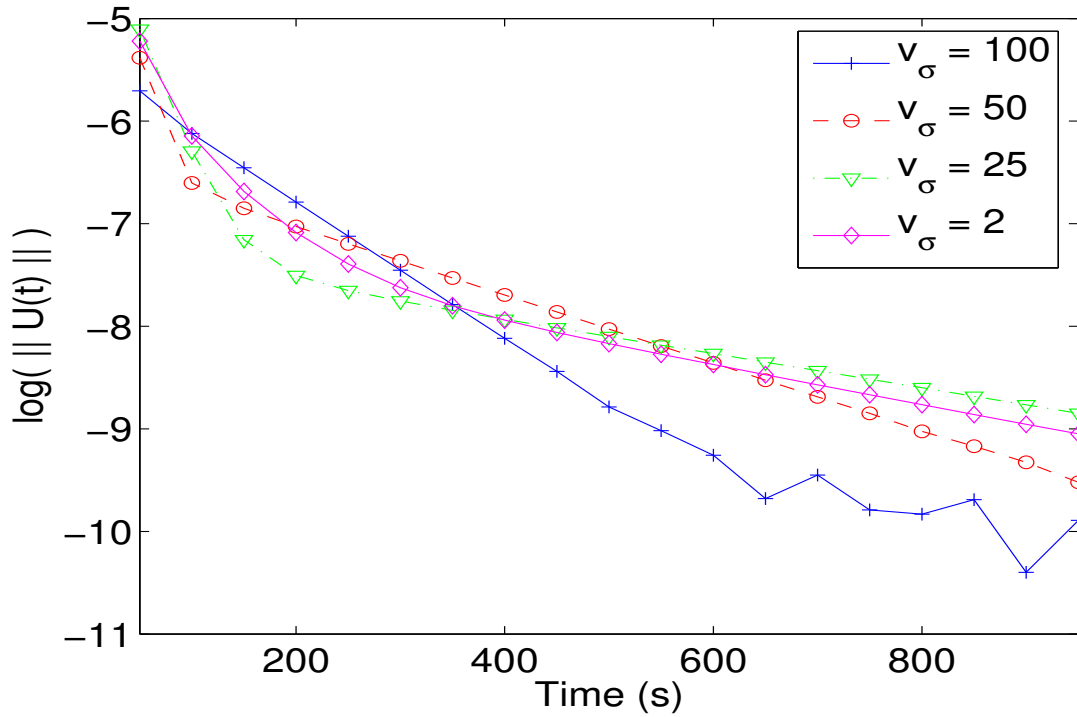


Figure 3.10: Logarithme de la norme de la solution sur des temps longs, pour différentes valeurs de ν_σ . Utilisation de la seconde formulation PML

On est clairement stable ! Le maillage utilisé est du Q5, avec 3 éléments par longueur d'onde. On constate également la stabilité de ces PML, quand on remplace la condition de Dirichlet par la condition de Neumann.