Modélisation et inversion en géophysique
1 - Introduction

Bernard Giroux
(bernard.giroux@ete.inrs.ca)

Institut national de la recherche scientifique
Centre Eau Terre Environnement

Version 1.1.0
Hiver 2017

Motivation

Motivation

- Dans ce cours, la modélisation fait référence au calcul de la réponse *géophysique* d'un modèle *numérique* donné.

estimé des paramètres du modèle → modèle quantitatif → prédiction des données

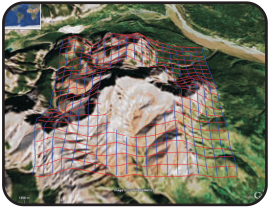
- La modélisation directe peut servir à
  1. planifier et déterminer les paramètres de levés de terrain ;
  2. étudier la sensibilité des méthodes à une distribution donnée des propriétés du sous-sol, ou à une variation de ces propriétés dans le temps ;
  3. calculer la réponse des modèles lors de l'inversion.

INRS
UNIVERSITÉ DE RECHERCHE

Motivation - Planification des levés

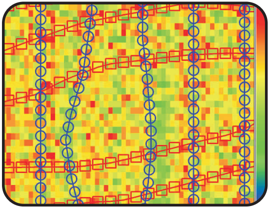
OMNI 3D® Workshop includes the following OMNI 3D® Layout Modules:

- Design & Edit Module
- Target Module
- Status Module
- 2D Ray Model Module
- Array Module
- 4D Module



Advanced Analyses Module

- Assess 3D geometry effects on DMO, PSTM, multiples, and noise
- Analyze potential 3D geometry artifacts (footprints) using existing 2D seismic traces
- Interactive fold analysis
- Estimate PSTM illumination using Fresnel Zone binning
- Generate synthetic SEG Y data using survey geometry and a 3D model
- Build a depth cube of stack fold to analyze illumination at depth
- Analyze illumination on a subsurface horizon using any survey geometry

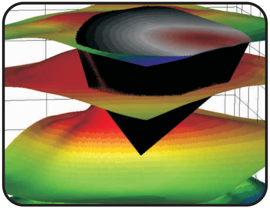


Source : `http://www.gedco.com`

Motivation - Planification des levés

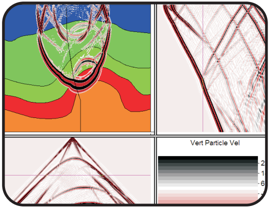
3D Ray Model Module

- Investigate parameters such as bin size, offsets, resolution, and imaging (migration) effects
- Build multi-layer 3D models including surface topography
- Create horizons using theoretical parameters or imported horizon data
- Model diffractions, reflections, and exploding horizons



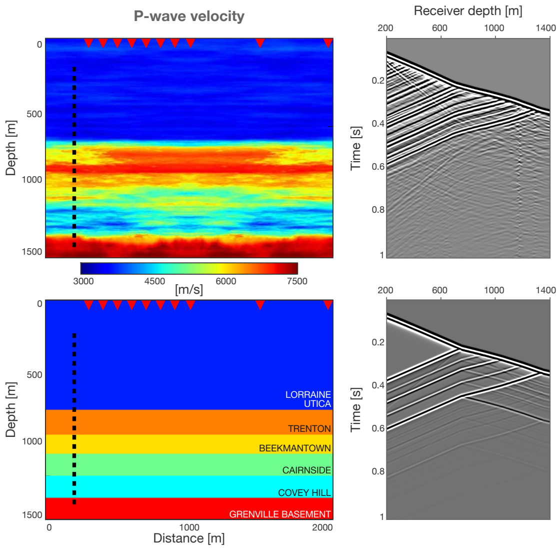
Elastic Wave Equation (EWE) Module

- Calculate Elastic or Acoustic Wave Equation response using a finite-difference solution
- Create full-waveform 2D synthetics using surface, VSP, OBC, and inter-well geometries
- Import model parameters from 2D Ray Models
- Add user-defined velocity gradients and heterogeneity
- Output real-time movies of shot wavefronts in Microsoft AVI format
- Monitor calculations interactively
- Will work on a multi-node cluster
- Built-in cluster manager to spread work across LANs



Source : http://www.gedco.com

Motivation - Études de sensibilité



Source : Perozzi *et al.*, soumis

Motivation - Études de sensibilité

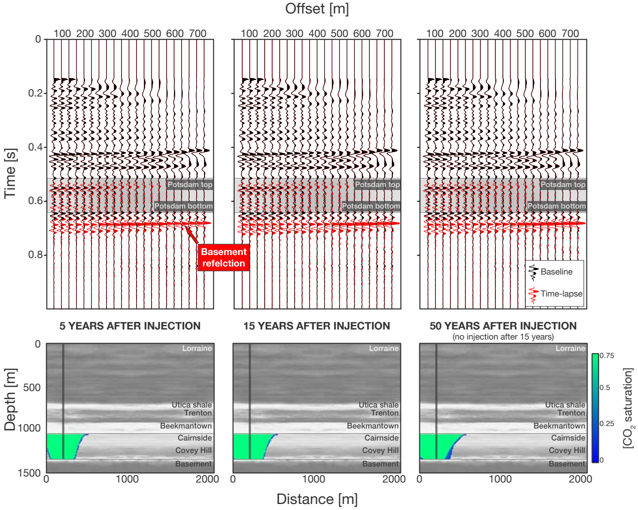
Motivation

Règles d'or en modélisation

Notions utiles en calcul numérique

Discrétisation

Références



Source : Perozzi *et al.*, soumis

Motivation - Inversion

- Problème direct

$\boxed{\text{estimé des paramètres du modèle}} \rightarrow \boxed{\text{modèle quantitatif}} \rightarrow \boxed{\text{prédiction des données}}$

- Problème inverse

$\boxed{\text{données observées}} \rightarrow \boxed{\text{modèle quantitatif}} \rightarrow \boxed{\text{estimé des paramètres du modèle}}$

Règles d'or en modélisation

Règles d'or en modélisation

- Valider son code
  - par comparaison avec une solution analytique
  - par comparaison avec un autre code éprouvé
  - tester les cas extrêmes (forts contrastes de propriétés, position arbitraire des sources/récepteurs, limites du domaine de modélisation, ...)
- Connaître les limites des algorithmes et méthodes utilisés
- Connaitre un débogueur pour le language utilisé
  - MATLAB : le débogueur est intégré à l'éditeur
  - Python : spyder est un IDE (*integrated development environment*) avec débogueur intégré
- Optimiser la performance avec un outil de profilage
  - Dans MATLAB : `doc profile`
  - Python : modules `cProfile` ou `profile`

Notions utiles en calcul numérique

Précision des calculs

- Le fait de négliger la précision des calculs peut avoir des conséquences dramatiques.
- Trois cas tristement célèbres :
  - Des erreurs d'arrondi mal gérées auraient entraîné le mauvais fonctionnement d'un missile Patriot en 1991, causant la mort de 28 personnes ;
  - L'explosion de la fusée Ariane 5 en 1996 aurait été causée par une erreur de dépassement en assignant une valeur réelle à une variable déclarée comme un entier ;
  - Une modélisation numérique par éléments finis imprécise couplée à un mauvais encrage a causé le naufrage de la plate-forme pétrolière Sleipner A en 1991, causant des pertes de plus de 700 millions de dollars.

Source : `http://www.ima.umn.edu/~arnold/disasters/disasters.html`

Précision des calculs

- Dans un ordinateur, les nombres sont représentés par un système *binaire*.
- Les entiers peuvent être représentés de façon exactes, en autant qu'ils se situent à l'intérieur d'une fourchette de valeurs données,
  - La largeur de cette fourchette dépend du nombre de *bits* utilisés pour représenter les nombres, e.g. pour 4 bits

$$\begin{aligned} 0 &= 0000_2 = 0 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 0 \times 2^0 \\ 1 &= 0001_2 = 0 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 1 \times 2^0 \\ 4 &= 0100_2 = 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 0 \times 2^1 + 0 \times 2^0 \\ 15 &= 1111_2 = 1 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 1 \times 2^0 \end{aligned}$$

    Une erreur de dépassement surviendrait si on tentait s'assigner la valeur 16 à un entier 4 bits.
  - Un bit est utilisé pour représenter le signe dans le cas d'entiers positifs et négatifs.
- Quelles sont les limites si on utilise 32 bits, 64 bits ?

Précision des calculs

- Les réels sont représentés en *virgule flottante*, en utilisant
  - un signe s ;
  - une mantisse (ou significande) m ;
  - un exposant e ;

  sous la forme
  $$s \times m \times B^{e-E},$$
  où B est la base de la représentation et E est le *biais* de l'exposant.
- La norme IEEE 754 (la plus courante et celle utilisée par MATLAB et Python) définie B=2, et comporte deux formats : 32 bits et 64 bits, soit

Précision	s	e	m	E	Précision	Ch. significatifs
`single` (32 bits)	1 bit	8 bits	23 bits	127	24 bits	environ 7
`double` (64 bits)	1 bit	11 bits	52 bits	1023	53 bits	environ 16

Précision des calculs

- Avec la norme IEEE 754, la mantisse est “normalisée”, i.e. si les premiers bits du nombre en mantisse sont des zéros, on déplace vers la gauche (*left-shift*) les bits jusqu'au 1^e bit égal à 1 (en ajustant l'exposant en conséquence)
  - comme ce bit est toujours 1, il n'est pas stocké et on augmente ainsi la précision d'un bit ;
  - la mantisse a la valeur numérique $1.f$, où f est la fraction définie par les bits de m ;
    - pour la fraction f, la puissance de la base après le point est négative, i.e. 1.1010_2 est équivalent à $1 \times 2^0 + 1 \times 2^{-1} + 0 \times 2^{-2} + 1 \times 2^{-3} + 0 \times 2^{-4}$, soit 1 + 0.5 + 0.125 = 1.625
- Quelques exemples de nombre représentés en `double`

`0 01111111111 0000` (+ 48 autres zéros) = $+1 \times 2^{1023-1023} \times 1.0_2$ = 1.
`1 01111111111 0000` (+ 48 autres zéros) = $-1 \times 2^{1023-1023} \times 1.0_2$ = -1.
`0 01111111111 1000` (+ 48 autres zéros) = $+1 \times 2^{1023-1023} \times 1.1_2$ = 1.5
`0 10000000000 0000` (+ 48 autres zéros) = $+1 \times 2^{1024-1023} \times 1.0_2$ = 2.
`0 10000000001 1010` (+ 48 autres zéros) = $+1 \times 2^{1025-1023} \times 1.1010_2$ = 6.5

Précision des calculs – Erreurs d'arrondi

- Les réels ne sont pas toujours représentés de façon exacte,
  - e.g. évaluez le nombre 123456789 en simple précision.
- Les opérations arithmétiques en virgule flottante ne sont pas exactes, mêmes si les nombres sont représentés exactement.
  - Par exemple, pour additionner deux entiers, les bits de la mantisse du plus petit nombre sont décalés vers la droite jusqu'à ce que l'exposant soit le même que celui du plus grand nombre, et on perd alors de la précision car des bits sont "perdus" à cause du décalage vers la droite.
- La précision matérielle (*machine accuracy*) ϵ_m est définie comme le plus petit nombre qui, lorsqu'additionné à 1.0, donne une valeur différente de 1.0
  - Pour les `float` IEEE 754, ϵ_m vaut environ 1.19×10^{-7}
  - Pour les `double` IEEE 754, ϵ_m vaut environ 2.22×10^{-16}

Précision – Erreurs d’arrondi

- On peut voir ϵ_m comme la précision de la partie fractionnelle, i.e. correspondant au changement causé par le bit le moins significatif de la mantisse.
- La quasi totalité des opérations arithmétiques entraîne une erreur d’au moins ϵ_m.
- Ce type d’erreur est appelé erreur d’arrondi (*roundoff error*).
- Les erreurs d’arrondi s’accumulent au cours des calculs.
  - En étant chanceux, N opérations entraînent une erreur de $\sqrt{N}\epsilon_m$, si le signe des erreurs est aléatoire
  - Très fréquemment, il y a un biais de signe et on a alors $N\epsilon_m$
  - Certaines opérations peuvent entraîner une erreur d’arrondi beaucoup plus grande que ϵ_m, e.g. la soustraction de deux nombres très rapprochés donne un résultat avec peu de bits significatifs

Précision – Erreurs de troncation

- En calcul numérique, il est fréquent de calculer une approximation "discrète" d'une quantité "continue" ;
  - e.g. une intégrale est évaluée numériquement en calculant une fonction à un nombre fini de points, plutôt qu'en "tout" point.
- Les erreurs de troncation surviennent lorsque le résultat obtenu par calcul numérique diffère de la réponse vraie.
- Contrairement aux erreur d'arrondi, il est possible de contrôler la magnitude des erreurs de troncation
  - e.g. en choisissant avec soin le nombre de points pour évaluer une intégrale.

Précision – Stabilité

- Une méthode est dite instable lorsqu'une erreur d'arrondi introduite au début des calculs est progressivement amplifiée, au point de corrompre complètement la solution.
- Sur un ordinateur "parfait" une telle méthode serait utilisable.

Gestion de la mémoire

- Lors de l'exécution d'un code, la création de variables accapare une certaine quantité de mémoire vive (RAM).
  - Si le nombre de variables est élevé, toute la mémoire physique disponible peut être consommée ;
  - Pour éviter le plantage du programme, le système d'exploitation utilise alors un espace disque (2 à 3 ordres de grandeur plus *lent* que la RAM) pour alouer plus de mémoire (*swap space*).
- La quantité de mémoire se mesure en octet (*byte*), où un octet vaut 8 bits.
- Par convention et abus de language,
  - un kilooctet vaut 1024 (2^{10}) octets (on devrait utiliser un kibioctet...) ;
  - un mégaoctet (mébioctet) vaut 1 048 576 (2^{20}) octets ;
  - un gigaoctet (gibioctet) vaut 1 073 741 824 (2^{30}) octets ;
  - un téraoctet (tébioctet) vaut 1 099 511 627 776 (2^{40}) octets ;
  - etc...

Gestion de la mémoire

- Contrairement au C/C++ ou au FORTRAN, MATLAB et Python gèrent l'allocation de la mémoire de façon transparente.
- Avantage : simplifie la gestion des variables et accélère le développement ;
- Désavantage : peut affecter la performance car les opérations de gestion de mémoire sont "lentes"
  - Lorsque la taille des tableaux est connue, important de créer ces tableaux à la bonne taille ;
  - MATLAB : lors d'appels de fonctions, les variables en arguments sont passées par *référence*. Si la variable est modifiée, une copie est créée automatiquement (inutile si on retourne le résultat à la variable initiale).
- Désavantage : peut entraîner des bogues
  - Comme les variables ne sont pas *déclarées* avant d'être *initialisées*, on peut écraser le contenu d'une variable existante en créant une nouvelle variable sous le nom d'une variable existante (e.g. à l'intérieur d'une boucle).

Gestion de la mémoire

- Désavantage : structures potentiellement inefficaces
  - MATLAB créé une entête pour chaque tableau, pour y stocker la taille du tableau et la classe de variable ;
  - Pour des structures, MATLAB génère une entête pour la structure, pour *chaque* champ de la structure et pour *chaque* variable correspondant aux champs ;
  - Soient deux variables contenant la même information

$$\texttt{S1.R}(1:100, 1:50)$$
$$\texttt{S1.G}(1:100, 1:50)$$
$$\texttt{S1.B}(1:100, 1:50)$$

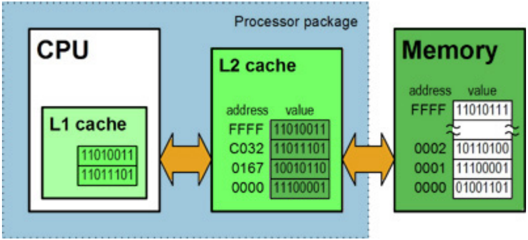
et

$$\texttt{S2}(1:100, 1:50)\texttt{.R}$$
$$\texttt{S2}(1:100, 1:50)\texttt{.G}$$
$$\texttt{S2}(1:100, 1:50)\texttt{.B},$$

`S1` contient 7 entêtes et `S2` contient 15 004 entêtes.

Gestion de la mémoire

- Désavantage (MATLAB) : pas de contrôle sur l'emploi de la mémoire *cache*
  - l'allocation manuelle de la mémoire permet de construire des codes *cache-friendly* ;
  - En calcul haute performance, beaucoup d'efforts sont déployés pour optimiser l'utilisation de la mémoire cache.
- Python : quelques modules disponibles (`cachetools`), `@functools.lru_cache`.

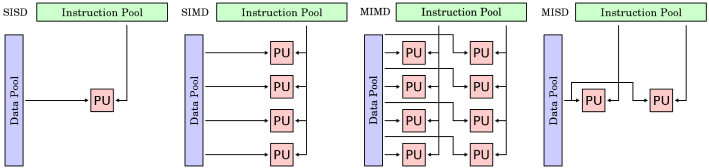


Source : `http://www.talktoanit.com`

Calcul sériel et calcul parallèle

- Calcul sériel : les opérations sont effectuées les unes à la suite des autres ;
  - l'ordre dans lequel les opérations sont effectuées est prédictible.
- Calcul parallèle : des opérations sont effectuées simultanément, sur plusieurs coeurs, processeurs, ou noeuds de calcul ;
  - l'ordre des opérations ne peut pas être prédit.
- Taxonomie de Flynn
  - SISD (Single Instruction, Single Data) : PC jusqu'à la fin des années 90 ;
  - SIMD (Single Instruction, Multiple Data) : unités de calcul spécialisé (traitement du signal ou d'image) ;
  - MIMD (Multiple Instructions, Multiple Data) : processeurs multi-coeur ;
  - MISD (Multiple Instructions, Single Data) : beaucoup plus rarement utilisé.

Calcul sériel et calcul parallèle



Source : C.M.L. Burnett

- Légende
  - PU : Processeur (acronyme anglais)
  - Instruction Pool : ensemble des instructions disponibles pour le ou les PU
  - Data Pool : ensemble des données nécessaires aux calculs

Calcul sériel et calcul parallèle

- Tout les algorithmes ne sont parallélisables
- Différents schémas (*pattern*) de parallélisation existent
  - Décomposition par tâches (*task decomposition*) ;
  - Décomposition des données (*data decomposition*) ;
  - et plusieurs autres (voir Mattson *et al.*, 2004).
- Certains problèmes scientifiques sont propices au schéma de décomposition des données (les données sont séparées en groupes sur lesquels les opérations sont effectuées indépendamment) :
  - multiplication de matrices ;
  - différences-finies.
- Le calcul scientifique parallèle n'est cependant pas limité au schéma de décomposition des données ;
  - Modélisation en parallèle de plusieurs tirs sismiques : décomposition par tâches.

Plateformes de calcul

- Toutes les plateformes récentes permettent un certain degré de parallélisme (même vos téléphones intelligents).
- Plateformes courantes pour le calul scientifique :
  - un ordinateur avec 1 ou quelques CPUs multi-coeurs ;
    - la mémoire RAM est dite *partagée*, i.e. accessible à tous les coeurs ;
    - architecture MIMD.
  - une grappe d'ordinateurs avec 2 ou plusieurs CPUs multi-coeurs ;
    - la mémoire RAM est dite *distribuée*, i.e. chaque noeud n'a accès qu'à sa RAM.
    - architecture MIMD.
  - GPU(s) (*graphics processing unit*), ajouté(s) aux plateformes précédentes.
    - chaque GPU a sa propre RAM qui est indépendante de la RAM sur la carte-mère ;
    - architecture SIMD.

Discrétisation

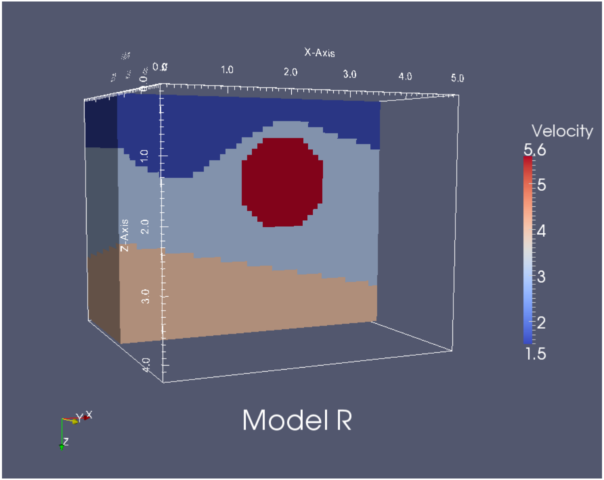
Généralités

- En sciences de la Terre en général, les milieux étudiés sont fortement hétérogènes ou de géométrie complexe ;
- Il est généralement impossible de trouver une solution analytique pour résoudre les problèmes les plus communs ;
- L'approche privilégiée consiste à représenter le milieu par une distribution discrète des propriétés physiques d'intérêt, i.e. le milieu est *discrétisé* ;
- Le choix du type de discrétisation dépend
  - des algorithmes disponibles pour solutionner le système,
  - du coût des calculs (temps et mémoire),
  - et de la précision recherchée.

INRS
UNIVERSITÉ DE RECHERCHE

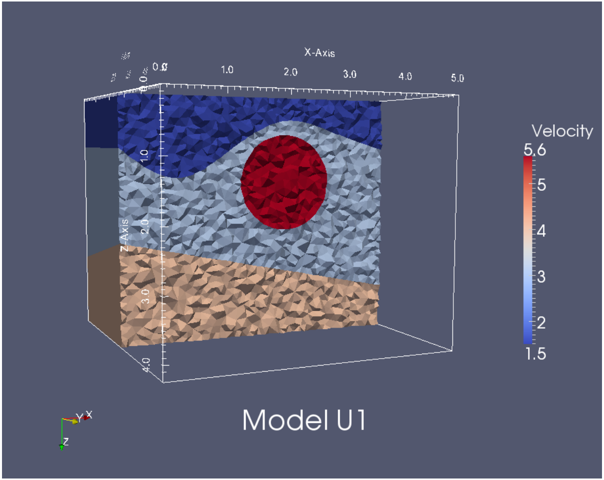
Types de maillage

Grilles régulières



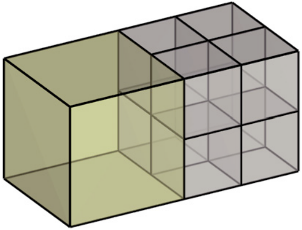
Types de maillage

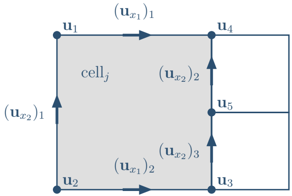
Maillages non structurés



Types de maillage

Multi-grid





Source : Haber *et al.*, 2007

Types de maillage

- La génération de maillages non structurés est une opération pouvant s'avérer complexe.
- Pusieurs mailleurs ont été conçus pour accomplir cette tâche, dont
  - gmsh, tetgen (C++)
  - iso2mesh, DistMesh (MATLAB)
  - MeshPy, frentos (Python)

  et plusieurs autres dans la liste de la page `http://www.robertschneiders.de/meshgeneration/software.html`.
- En sciences de la Terre, des logiciels spécialisés comme
  - GOCAD
  - Petrel

  peuvent également produire des maillages non structurés.

Différences finies

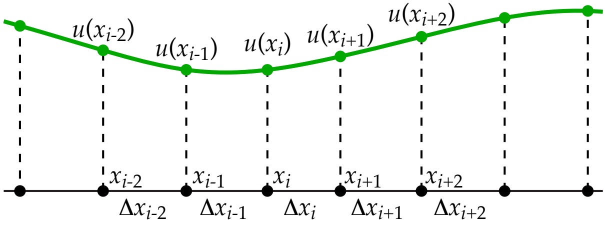
- Les phénomènes géophysiques peuvent souvent être décrits par des équations aux dérivées partielles ;
- Les *différences finies* sont une façon d'approximer numériquement des dérivées ;
- La méthode des différences finies (MDF) constitue une approche conceptuellement simple et intuitive car le formalisme est proche de l'équation aux dérivées partielles ;
- Également, la mise en oeuvre est généralement simple car la MDF est implémentée sur des grilles régulières.

Différences finies

- La définition classique de la dérivée d'une fonction $u(x)$ est

$$u'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \tag{1}$$

- Un ordinateur ne peut gérer la limite $\Delta x \to 0$;
- L'idée est de définir un ensemble de points discrets x_i, où la fonction u est évaluée ($u_i = u(x_i)$) ;
- La distance entre les points est $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$, ou simplement Δx si la distance est constante partout.



Différences finies

- Dans le cas discret, on a ainsi

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \tag{2}$$

  qui est nommé opérateur de différence avant ;
- Similairement, on a l'opérateur de différence arrière :

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i) - u(x_i - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} \tag{3}$$

  et l'opérateur de différence centrée :

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}. \tag{4}$$

- Dans le cas discret, ces expressions donnent un résultat différent : comment quantifier l'erreur ?
  - L'analyse par séries de Taylor peut nous donner la réponse.

Différences finies - Séries de Taylor

- Partant de l'identité

$$u(x) = u(x_i) + \int_{x_i}^{x} u'(s)\mathrm{d}s, \tag{5}$$

cette relation tient si on remplace $u(x)$ par $u'(x)$, i.e.

$$u'(x) = u'(x_i) + \int_{x_i}^{x} u''(s)\mathrm{d}s \tag{6}$$

- En insérant (6) dans (5) et en intégrant, on trouve

$$u(x) = u(x_i) + (x - x_i)u'(x_i) + \int_{x_i}^{x}\int_{x_i}^{x} u''(s)\mathrm{d}s\,\mathrm{d}s. \tag{7}$$

Différences finies - Séries de Taylor

- En répétant l'opération n fois, on trouve

$$u(x) = u(x_i) + (x - x_i)u'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}u''(x_i) + \cdots + \frac{(x - x_i)^n}{n!}u^{(n)}(x_i) + R_{n+1} \tag{8}$$

où

$$R_{n+1} = \int_{x_i}^{x} \cdots \int_{x_i}^{x} u^{(n+1)}(s)(\mathrm{d}s)^{n+1}. \tag{9}$$

- L'équation (8) est la série de Taylor de la fonction $u(x)$ en x_i.

Différences finies - Séries de Taylor

Évaluons la précision de l'opérateur de différence avant.

- Développons la fonction u à x_{i+1} à partir de la série en x_i, soit

$$u(x_i + \Delta x_i) = u(x_i) + \Delta x_i \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x_i^2}{2!} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x_i^3}{3!} \left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x_i} + \dots \tag{10}$$

- En réarrangeant on trouve

$$\frac{u(x_i + \Delta x_i) - u(x_i)}{\Delta x_i} - \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \underbrace{\frac{\Delta x_i}{2!} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x_i^2}{3!} \left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x_i} + \dots}_{\text{erreur de troncation}} \tag{11}$$

Différences finies - Séries de Taylor

- L'erreur de troncation est la différence entre la dérivée exacte et sa représentation discrète
  - Pour des fonctions lisses et un pas Δx_i petit, le 1^e terme est utilisé pour caractériser l'ordre de grandeur de l'erreur ;
  - Ce terme dépend de $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ et de Δx, ce dernier seulement sur lequel il est possible d'agir pour réduire l'erreur ;
  - La notation $\mathcal{O}(\Delta x_i)$ est utilisée pour représenter le 1^e terme de l'erreur de troncation, i.e.

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{u(x_i + \Delta x_i) - u(x_i)}{\Delta x_i} + \mathcal{O}(\Delta x). \qquad (12)$$

- Pour l'opérateur de différence arrière, on trouve également une erreur en $\mathcal{O}(\Delta x)$, soit

$$\frac{u(x_i) - u(x_i - \Delta x_{i-1})}{\Delta x_{i-1}} - \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \underbrace{-\frac{\Delta x_{i-1}}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x_i} - \frac{\Delta x_{i-1}^2}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x_i} + \ldots}_{\text{erreur de troncation}} \qquad (13)$$

Différences finies - Séries de Taylor

- Pour l'opérateur de différence centrée, l'erreur de troncation est obtenu en combinant les équations (10) et (13), ce qui donne (si $\Delta x_{i-1} = \Delta x_i = \Delta x$)

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{\Delta x^2}{3!} \left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{x_i} + \ldots \tag{14}$$

- On a alors une convergence quadratique :

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \tag{15}$$

- Puisqu'on examine la convergence pour $\Delta x \to 0$, on a que $\mathcal{O}(\Delta x^2) < \mathcal{O}(\Delta x)$;
  - l'erreur est plus *faible* en utilisant un opérateur centré qu'en utilisant un opérateur avant ou arrière.

Différences finies - Séries de Taylor

Exercice sous MATLAB/Python

- Évaluez la fonction sinus dans l'intervalle $[0, 4\pi]$ avec un pas de $\pi/10$.
- Calculez la dérivée
  - avec l'opérateur avant ;
  - avec l'opérateur centré.
- Pour les deux dérivées discrètes, calculez l'erreur avec la solution analytique.
- Répétez avec un pas de $\pi/20$.
- Comment varie l'erreur en fonction de l'opérateur et en fonction du pas ?

Différences finies - Ordres supérieurs

- Les opérateurs précédents sont définis avec deux points, on dit qu'ils sont d'ordre 2.
- Que se produit-il si on utilise 4 points ?
- Partons de l'équation (14)

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{\Delta x^4}{5!}\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \frac{\Delta x^6}{7!}\frac{\partial^7 u}{\partial x^7} + \ldots + \frac{\Delta x^{2m}}{(2m+1)!}\frac{\partial^{(2m+1)} u}{\partial x^{(2m+1)}} + \ldots \quad (16)$$

- Utilisons maintenant les points x_{i-2} et x_{i+2}, et remplaçons Δx par $2\Delta x$:

$$\frac{u_{i+2} - u_{i-2}}{4\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(2\Delta x)^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \frac{(2\Delta x)^4}{5!}\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} + \frac{(2\Delta x)^6}{7!}\frac{\partial^7 u}{\partial x^7} + \ldots \quad (17)$$

Différences finies - Ordres supérieurs

- En multipliant (16) par 2^2 et en soustrayant le résultat à (17), on trouve

$$\frac{8(u_{i+1}-u_{i-1})-(u_{i+2}-u_{i-2})}{12\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{4\Delta x^4}{5!}\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} - \frac{20\Delta x^6}{7!}\frac{\partial^7 u}{\partial x^7} + \dots \tag{18}$$

- On remarque que l'erreur de troncation est maintenant d'ordre 4 :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i-2} - 8_{i-1} + 8_{i+1} - u_{i+2}}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \tag{19}$$

- De façon générale, plus l'ordre de l'opérateur est élevé, plus faible est l'erreur (Fornberg, 1998).

Différences finies - Exemple

- Considérons la distribution verticale de la température dans la croûte terrestre.
- En l'absence de variations latérales, l'équation de la chaleur en régime permanent est

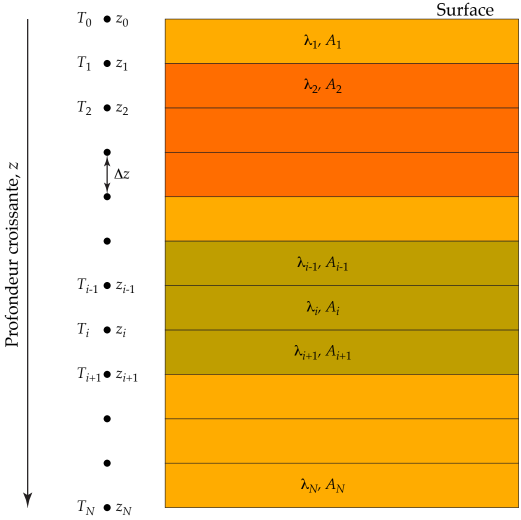
$$\frac{d}{dz}\left(\lambda(z)\frac{dT}{dz}\right) = -A(z), \tag{20}$$

  où

  - λ est la conductivité thermique (W/m/K) ;
  - T est la température (K) ;
  - A est la production de chaleur (W/m^3) ;
  - z est la profondeur (m).

Différences finies - Exemple

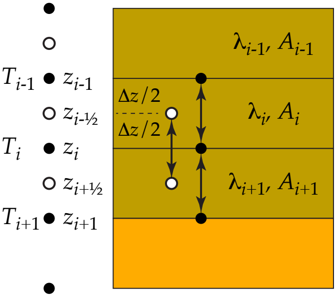
Discrétisation du milieu en N couches homogènes



Différences finies - Exemple

- Pour solutionner le problème, il est nécessaire de poser des conditions aux limites ;
- Considérons
  - une température connue en surface, T_0 ;
  - un flux de chaleur $\mathbf{Q}$ dans la N^e couche.
- L'objectif est de déterminer les valeurs de température aux noeuds de la grille.

Différences finies - Exemple



- Considérons le i^e noeud.
- En choisissant un opérateur centré de largeur $\Delta z/2$, la dérivée du terme entre parenthèses de l'équation (20) vaut

$$\frac{d}{dz}\left(\lambda(z)\frac{dT}{dz}\right)\bigg|_{z_i} = \frac{\lambda_{i+1}\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z_{i+1/2}} - \lambda_i\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z_{i-1/2}}}{\Delta z} \qquad (21)$$

Différences finies - Exemple

- Avec également un opérateur centré de largeur $\Delta z/2$ pour la dérivée de la température, on trouve

$$\left.\frac{d}{dz}\left(\lambda(z)\frac{dT}{dz}\right)\right|_{z_i} = \frac{\lambda_{i+1}\left(\frac{T_{i+1}-T_i}{\Delta z}\right) - \lambda_i\left(\frac{T_i-T_{i-1}}{\Delta z}\right)}{\Delta z} \quad (22)$$

- En réarrangeant le terme de droite, on trouve

$$\frac{\lambda_i}{\Delta z^2}T_{i-1} - \frac{\lambda_{i+1}+\lambda_i}{\Delta z^2}T_i + \frac{\lambda_{i+1}}{\Delta z^2}T_{i+1} \quad (23)$$

- L'équation (23) est égale à la production de chaleur à z_i, soit $A(z)|_{z_i}$
  - Puisque A est défini pour les couches et non aux noeuds, on prends la moyenne entre deux couches, i.e.

$$A(z)|_{z_i} = \frac{A_i + A_{i+1}}{2} \quad (24)$$

- Les équations (23) et (24) vont nous permettre de construire un système matriciel de la forme $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ où le vecteur $\mathbf{x}$ est le vecteur des températures.

Différences finies - Exemple

Mais

- L'équation (23) contient le terme T_{i-1}, ce qui pose un problème en surface
  - Heureusement, on sait que la température T_0 est déjà connue étant donnée les conditions aux frontières posées ;
  - C'est une condition dite *de Dirichlet*, i.e. la valeur que la solution doit vérifier sur les frontières est spécifiée.

Différences finies - Exemple

- En profondeur, le flux $\mathbf{Q}$ est connu.
  - Par définition, le flux de chaleur vaut

$$\mathbf{Q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \tag{25}$$

  - Évalué dans la N^e couche avec un opérateur de différence arrière, on a

$$\mathbf{Q} = -\lambda_N \frac{T_N - T_{N-1}}{\Delta z} \tag{26}$$

    ou bien

$$\frac{\lambda_N}{\Delta z} T_{N-1} - \frac{\lambda_N}{\Delta z} T_N = \mathbf{Q}. \tag{27}$$

- Lorsqu'on spécifie les valeurs des *dérivées* que la solution doit vérifier sur les frontières, on a une condition dite *de Neumann*.

Différences finies - Exemple

- Le système matriciel peut maintenant se construire :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda_1}{\Delta z^2} & -\frac{\lambda_2+\lambda_1}{\Delta z^2} & \frac{\lambda_2}{\Delta z^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\lambda_2}{\Delta z^2} & -\frac{\lambda_3+\lambda_2}{\Delta z^2} & \frac{\lambda_3}{\Delta z^2} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\lambda_{N-1}}{\Delta z^2} & -\frac{\lambda_N+\lambda_{N-1}}{\Delta z^2} & \frac{\lambda_N}{\Delta z^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\lambda_N}{\Delta z} & -\frac{\lambda_N}{\Delta z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ \vdots \\ T_{N-2} \\ T_{N-1} \\ T_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_0 \\ -\frac{A_1+A_2}{2} \\ -\frac{A_2+A_3}{2} \\ \vdots \\ -\frac{A_{N-1}+A_N}{2} \\ \mathbf{Q} \end{bmatrix} \quad (28)$$

où les valeurs de production de chaleur A_i sont interpolées aux noeuds.

Différences finies - Exemple

Exercice sous MATLAB/Python

- Partant des conditions
  - T_0 = 280 K ;
  - **Q** = -55 mW/m^2 ;

  et considérant un milieu à 20 couches de 100 m d'épaisseur chacune.
- Calculez le profil vertical de température si

$\lambda = \{1.8, 1.8, 1.8, 1.8, 1.8, 3.7, 3.7, 3.7, 3.7, 3.7, 2.4, 2.4, 2.4, 2.4, 2.4, 2.4, 3.5, 3.5, 3.5, 3.5\}$

et

$A = \{0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2.8 \times 10^{-6}, 2.8 \times 10^{-6}, 2.8 \times 10^{-6}, 2.8 \times 10^{-6}\}$

Références

Références

- Fornberg, B. (1998). *A Practical Guide to Pseudospectral Methods*, volume 1 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics*. Cambridge University Press
- Franek, F. (2004). *Memory as a Programming Concept in C and C++*. Cambridge University Press
- Karniadakis, G. E. and Kirby, II, R. M. (2003). *Parallel Scientific Computing in C++ and MPI*. Cambridge University Press
- Mattson, T. G., Sanders, B. A., and Massingill, B. L. (2004). *Patterns for Parallel Programming*. Software Patterns Series. Addison-Wesley
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., and Flannery, B. P. (1992). *Numerical Recipes in C : The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2nd edition