

Méthode multipôle rapide et sensibilité topologique pour l'identification approchée de défauts à partir de données de type acoustique

N. Nemitz

▶ **To cite this version:**

N. Nemitz. Méthode multipôle rapide et sensibilité topologique pour l'identification approchée de défauts à partir de données de type acoustique. Mécanique [physics.med-ph]. Ecole Polytechnique X, 2006. Français. NNT : . tel-00120202

HAL Id: tel-00120202
https://pastel.hal.science/tel-00120202

Submitted on 13 Dec 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'école Polytechnique

spécialité : mécanique et matériaux

par

Nicolas Nemitz

sujet de thèse

Méthode multipôle rapide et sensibilité topologique pour l'identification approchée de défauts à partir de données de type acoustique

Soutenue publiquement le 28 juin 2006 devant le jury composé de :

Messieurs	Stéphane ANDRIEUX	*Président*
	Alain CIMETIERE	*Rapporteur*
	Didier CLOUTEAU	*Rapporteur*
	Marc BONNET	*Directeur de thèse*
	Jean-François SEMBLAT	*Examinateur*

Remerciements

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance à Bernard Halphen pour m'avoir accueilli au Laboratoire de Mécanique des Solides de L'École Polytechnique, me permettant d'évoluer au cours de cette thèse dans un cadre scientifique et humain exceptionnel.

Je tiens à remercier tout spécialement Alain Cimetière et Didier Clouteau pour avoir, tous deux, accepté de juger mon travail en tant que rapporteurs. J'ai par ailleurs été très honoré que Stéphane Andrieux préside ce jury de thèse, et que Jean-François Semblat ait montré un grand intérêt pour mon travail.

Un grand merci à Marc Bonnet, mon directeur de thèse. Je le remercie d'abord pour son aide constante et ses conseils judicieux tant du point de vue scientifique que sur les orientations générales de la thèse. Je salue sa disponibilité, ses observations pertinentes, ainsi qu'une certaine conception de la science qui se dégagent directement de sa personnalité.

Parce que ce temps de thèse a aussi été pour la moi l'occasion de découvrir le métier d'enseignant, je voudrais ici remercier tous ceux avec qui j'ai pu partager ces moments et qui m'ont beaucoup apporté par leur expérience et leurs conseils. En particulier je tiens à remercier (par ordre d'apparition) Alain Millard, Joël Frelat, Graciela Bertolino, Andreï Constantinescu, Eveline Hervé, Gilles Perrin, Paolo Vanucci et Sylvain Courtois. Merci également aux élèves dont le contact est toujours rafraîchissant.

Enfin, parce qu'un travail de thèse est un travail personnel mais qu'il implique de nombreuses relations avec les autres chercheurs, je voudrais remercier tous ceux qui ont partagé ces années de ma vie de thésard au (et parfois en dehors du) labo. Merci à Zoumana Soumahoro et Mohamad Jabbado, mes collègues de bureau. Merci à ceux du bureau d'à coté que je retrouvais à l'heure du thé (et pas seulement) Ida Raoult, Benoit Delattre (en souvenir de ces discussions ô combien enrichissantes), Markus Zimmerman, Sebastien Amiable, Xavier Lorang (qui m'a tant appris). Merci à ceux d'un peu plus loin (deux bureaux plus loin) Loïc Faure, François Comte (moi non plus je ne t'ai pas oublié), Arnaud Bastier (champion de baby), Martin Idiart (qui aurait pu devenir champion), Oscar Lopez et tous les autres.

Table des matières

1 Introduction **9**

1.1 L'identification par signaux acoustiques 9
1.2 Formulation du problème 10
1.2.1 L'équation des ondes acoustiques 10
1.2.2 L'équation de Helmholtz : le régime stationnaire 11
1.2.3 Vers l'électromagnétisme et l'élastodynamique 11
1.3 Equations et représentations intégrales 12
1.3.1 L'identité de réciprocité : la deuxième formule de Green 12
1.3.2 La solution fondamentale ou fonction de Green 13
1.3.3 La représentation intégrale 13
1.3.4 Equation intégrale de frontière 15
1.4 Étude du problème direct 16
1.4.1 Diffraction par un obstacle dans un milieu homogène 16
1.4.2 Propagation en milieu hétérogène 18
1.4.3 Méthodes numériques de domaine 19
1.4.4 La méthode des éléments de frontière 20
1.5 Résolution du problème inverse 21
1.5.1 Méthodes linéaires 21
1.5.2 Écart à la réciprocité 21
1.5.3 Approche par optimisation 21
1.5.4 Méthodes d'exploration globale 22
1.6 Objectif et contenu 24

2 Méthode multipôle rapide : partie théorique **25**

2.1 Présentation 25
2.2 Algorithme 28
2.2.1 La formule d'addition 28
2.2.2 La méthode mono-niveau 33
2.2.3 La méthode multi-niveau 35
2.3 Equation de Helmholtz 44
2.3.1 Une alternative pour l'équation de Helmholtz : la forme diagonale 46

2.3.2 Le calcul complet 51

3 FMM : mise en œuvre et résultats numériques 53
3.1 Présentation 53
3.1.1 Le cas test 53
3.2 Les structures de données et l'algorithme 54
3.2.1 Un arbre autour du nœud 54
3.2.2 Construire l'arbre 56
3.2.3 Parcourir un arbre 56
3.3 Les listes de tâches 58
3.3.1 Principe 58
3.3.2 Les listes 59
3.3.3 Un algorithme général 59
3.3.4 Une réorganisation du calcul 60
3.3.5 Le tri de la liste des transferts 61
3.4 Interpolation et extrapolation 63
3.4.1 Notion de largeur de bande 63
3.4.2 Discrétisation de la sphère unité 64
3.4.3 Schéma d'interpolation 66
3.5 Les fonctions spéciales 69
3.5.1 Polynômes de Legendre et fonctions de Legendre associées . . . 69
3.5.2 Les harmoniques sphériques 71
3.5.3 Les fonctions de Bessel et Hankel 73
3.6 Le nombre de pôles 74
3.7 Calcul global : complexité et précision 76
3.7.1 Temps de calcul d'une itération 77
3.7.2 Evolution de la précision et du nombre d'itérations 78

4 Identification par gradient topologique 91
4.1 Le contexte 91
4.2 Le gradient topologique 92
4.2.1 Présentation 92
4.2.2 Calcul par un champ adjoint. 94
4.2.3 Étude du comportement asymptotique 95
4.2.4 Fin du calcul par le champ adjoint 99
4.2.5 Sur la forme de l'obstacle 100
4.3 Calcul numérique du gradient topologique 101
4.4 Présentation des résultats 102
4.4.1 Un premier cas test 102
4.4.2 Accroissement de la longueur d'onde 106
4.4.3 Variations de la taille de l'obstacle 108

4.4.4 Accroissement de la taille du domaine 114
4.4.5 Variations de la position de l'obstacle 121
4.4.6 Influence de la forme de l'obstacle 124
4.4.7 Données bruitées 127
4.4.8 Conclusion sur les résultats numériques 128

Conclusions et perspectives **129**

A Calcul des intégrales singulières **131**

Chapitre 1

Introduction

1.1 L'identification par signaux acoustiques

L'imagerie classique consiste à créer une image à partir d'informations lumineuses. L' « inversion » est alors effectuée physiquement à l'aide d'un système de lentilles qui permet la convergence des rayons lumineux et ainsi de créer l'image. Plusieurs phénomènes peuvent venir contrarier un tel dispositif : un milieu non homogène par exemple, ou pire, la présence d'obstacles opaques.
Une solution pour contourner ce dernier point est de changer la longueur d'onde des ondes investigatrices : des ondes électromagnétiques aux ondes acoustiques. Mais alors le problème est tout autre car la création de l'image ne peut plus être simplement exécutée et nécessite des calculs afin d'inverser les données.

Ce type d'imagerie est donc fortement lié à la résolution de problèmes mathématiques dits *inverses*. Ces problèmes sont délicats à traiter, néanmoins cette approche non conventionnelle de l'imagerie est susceptible de fournir des informations plus riches sur la région explorée. Elle ne se contentera pas de déterminer la présence ou la forme des objets mais pourra également ambitionner de trouver les propriétés physiques des milieux traversés.

Les applications possibles d'un tel procédé sont nombreuses : les radars utilisant des ondes électromagnétiques, la détection de bancs de poissons ou de sous-marins dans les océans par ondes acoustiques ou encore le contrôle non-destructif par ondes élastodynamiques. Les méthodes proposées dans la littérature tiennent compte des spécificités du problème abordé. En particulier, la dimension de l'espace peut jouer un rôle crucial quant à la mise en œuvre effective d'une méthode. L'objectif de ce travail est d'étudier des problèmes de diffraction dans des domaines tridimensionnels et l'essentiel de cette présentation se fera dans ce cadre, parfois certains travaux en $2D$ seront toutefois présentés. Par ailleurs, outre la nature de l'onde éclairante (électromagnétique, acoustique etc...) le type de source permet aussi de classer les méthodes de résolutions

employées. On distingue les sources monochromatiques à fréquence fixe des sources impulsionnelles. Notons toutefois qu'une étude exhaustive du premier cas permet de traiter le second via une transformation de Fourier.

Lors de cette étude nous nous sommes concentrés sur un problème modèle d'ondes acoustiques en régime harmonique (sources monochromatiques). Ce type de problème apparaîtra donc largement lors de cette présentation.

1.2 Formulation du problème

Le but de ce paragraphe est de rappeler brièvement les hypothèses physiques qui permettent d'obtenir l'équation des ondes acoustiques linéaires [21, 51, 54]. Nous traitons ensuite plus particulièrement le cas des ondes stationnaires qui constitue le cadre de notre étude [45, 51]. Enfin nous rappelons les liens qui peuvent être tissés entre ces équations, celles de l'électromagnétisme et celles de l'élastodynamique via un cadre mathématique semblable [46].

1.2.1 L'équation des ondes acoustiques

C'est l'équation des ondes acoustiques linéaire qui servira de problème modèle dans toute cette étude. Rappelons que sous les hypothèses :

- Le fluide sera supposé parfait : absence de viscosité et de flux de chaleur ;
- Le fluide sera isolé et ne comportera pas de sources internes.

les perturbations p, de « petite » amplitude, de la pression autour d'un état de référence vérifient classiquement l'équation des ondes linéarisée [21, 51, 54] :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - c^2(x)\rho \,\mathrm{div}\,(\rho\, \mathbf{grad} p) = 0 \tag{1.1}$$

qui devient dans le cas d'un milieu homogène :

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - c^2 \Delta p = 0 \tag{1.2}$$

où ρ désigne la masse volumique de l'état de référence du fluide (i.e. non perturbée par la présence de l'onde) et c la célérité des ondes dans le milieu. Par définition

$$c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{\rho=\rho_0},$$

par exemple, dans un fluide caractérisé par le premier coefficient de Lamé λ ou module d'incompressibilité (appelé parfois dans ce contexte constante d'élasticité),

$$c = \sqrt{\frac{\lambda}{\rho}} \tag{1.3}$$

1.2.2 L'équation de Helmholtz : le régime stationnaire

Considérons désormais le cas particulier où les grandeurs sont harmoniques de pulsation ω [45, 51]. Toute grandeur u sera alors notée :

$$u(x,t) = Re\{u(x)e^{i\omega t}\} \tag{1.4}$$

où $u(x)$ désigne l'amplitude complexe. Dans les équations nous omettrons le facteur $e^{i\omega t}$ selon l'usage courant.

L'équation des ondes pour un milieu homogène devient alors

$$\Delta p + k^2 p = 0 \tag{1.5}$$

où $k = \omega/c$ est appelé nombre d'onde. Cette équation en régime stationnaire s'appelle *équation de Helmholtz*. On notera qu'en présence d'un terme de source f cette équation s'écrit :

$$\Delta p + k^2 p + f = 0 \tag{1.6}$$

Dans le cas d'un milieu hétérogène pour lequel le terme en $\mathbf{grad}\rho$ est négligé, l'équation des ondes (1.1) devient :

$$\Delta p + \left(\frac{\omega}{c(x)}\right)^2 p = 0 \tag{1.7}$$

1.2.3 Vers l'électromagnétisme et l'élastodynamique

Nous venons de rappeler comment, à partir de la mécanique des fluides et sous quelles hypothèses, on obtenait l'équation des ondes acoustiques. Ce n'est évidemment pas par un lien physique que cette équation est reliée à celles de l'électromagnétisme. Pourtant les phénomènes d'ondes ont des points communs qui se traduisent par une structure mathématique commune des équations qui régissent ces différents phénomènes (voir [46]).

Structure de l'équation d'onde A partir de l'équation dégagée dans le cas particulier des ondes acoustiques, nous allons définir une équation d'onde abstraite.
Soient $u(x,t) \in \mathbb{R}^N$ l'inconnue du problème, et $\underline{A}$ un opérateur différentiel du second ordre, de type elliptique, autoadjoint et positif pour un produit scalaire bien choisi. Sous ces conditions, l'équation

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \underline{A}u = 0 \tag{1.8}$$

est une équation d'onde. On notera que pour l'acoustique $u(x,t) = p(x,t)$, $N = 1$ et

$$\underline{A}u = -c^2(x)\rho \,\mathrm{div}\,(\rho\,\mathbf{grad}u) \tag{1.9}$$

Le cas électromagnétique Dans le cas de l'électromagnétisme, l'inconnue est le champ électrique $u(x,t) = \underline{E}(x,t)$, $N = 3$ et

$$\underline{A}u = \varepsilon\, \mathbf{rot}(\frac{1}{\mu}\mathbf{rot}u) \tag{1.10}$$

où ε est la permittivité diélectrique et μ la perméabilité magnétique du milieu.

Le cas élastodynamique Dans le cas de l'elastodynamique, sous l'hypothèse des petites perturbations, l'inconnue est le déplacement $u(x,t) = \underline{u}(x,t)$, $N = 3$ et

$$\underline{A}u = -\frac{1}{\rho}\mathbf{div}\underline{\underline{\sigma}}(u) \tag{1.11}$$

où $\underline{\underline{\sigma}}$ désigne le tenseur des contraintes ; on rappelle que dans le cadre de l'élasticité linéaire isotrope ses composantes sont reliées au déplacement par

$$\sigma_{ij} = \lambda \mathrm{div}(\underline{u})\delta_{ij} + \mu(u_{i,j} + u_{j,i}) \tag{1.12}$$

où λ et μ sont les coefficients de Lamé.

1.3 Equations et représentations intégrales

Avant d'aborder les études des problèmes direct et inverse de diffraction, nous allons rappeler quelques outils et définitions qui nous serons utiles par la suite [10, 26].

1.3.1 L'identité de réciprocité : la deuxième formule de Green

Multiplions l'équation de Helmholtz (1.6) d'inconnue p_1 par un champ p_2 et intégrons sur un ouvert borné Ω :

$$\int_\Omega p_2 \Delta p_1 + k^2 p_1 p_2 \,\mathrm{dV} + \int_\Omega f_1 p_2 \,\mathrm{dV} = 0 \tag{1.13}$$

En utilisant la formule de la divergence (où $\underline{n}$ est la normale extérieure à Ω),

$$\int_\Omega \mathrm{div}(\underline{v})\,\mathrm{dV} = \int_{\partial\Omega} \underline{v}.\underline{n}\,\mathrm{dS} \tag{1.14}$$

au champ $\underline{v} = p_2\,\mathbf{grad}p_1$ on obtient :

$$\int_\Omega p_2\Delta p_1 + \mathbf{grad}p_2.\mathbf{grad}p_1\,\mathrm{dV} = \int_{\partial\Omega} p_2\mathbf{grad}p_1.\underline{n}\,\mathrm{dS} \tag{1.15}$$

d'où

$$\int_{\partial\Omega} p_2\mathbf{grad}p_1.\underline{n}\,\mathrm{dS} + \int_\Omega k^2 p_1 p_2 - \mathbf{grad}p_2.\mathbf{grad}p_1\,\mathrm{dV} + \int_\Omega f_1 p_2\,\mathrm{dV} = 0 \tag{1.16}$$

On choisit pour p_2 un champ vérifiant l'équation de Helmholtz dans Ω pour le même nombre d'onde k. En soustrayant à (1.16) l'égalité vérifiée en échangeant les rôles de p_1 et p_2 on obtient :

$$\int_{\partial\Omega} (p_2 \mathbf{grad} p_1 - p_1 \mathbf{grad} p_2).\underline{n}\,\mathrm{dS} + \int_{\Omega} f_1 p_2 - f_2 p_1\,\mathrm{dV} = 0 \tag{1.17}$$

Les champs p_1 et p_2 vérifiant l'équation de Helmholtz dans le domaine Ω, cette relation peut encore s'écrire (sous la forme de la *deuxième formule de Green*) :

$$\int_{\partial\Omega} (p_2 \mathbf{grad} p_1 - p_1 \mathbf{grad} p_2).\underline{n}\,\mathrm{dS} = \int_{\Omega} p_2 \Delta p_1 - p_1 \Delta p_2\,\mathrm{dV} \tag{1.18}$$

Cette formule générale peut être précisée et permet ainsi d'obtenir des informations sur un champ inconnu. C'est le cas en particulier lorsque l'on choisit pour l'un des champs p_1 ou p_2 une solution connue, la fonction de Green par exemple.

1.3.2 La solution fondamentale ou fonction de Green

Soit $G(. - \underline{x})$ la solution de l'équation de Helmholtz pour un domaine infini soumis à une unique source ponctuelle placée en $\underline{x}$:

$$(\Delta_y + k^2) G(\underline{y} - \underline{x}) + \delta(\underline{y} - \underline{x}) = 0 \tag{1.19}$$

En particulier $G(. - \underline{x})$ est solution de l'équation de Helmholtz pour tout domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Elle satisfait donc la condition pour obtenir la relation (1.17) ou (1.18). De plus cette solution, appelée fonction de Green, peut être calculée analytiquement et on obtient le résultat classique :

$$G(\underline{y} - \underline{x}) = \frac{e^{ik|\underline{y}-\underline{x}|}}{4\pi|\underline{y} - \underline{x}|} \tag{1.20}$$

où $|\underline{x}|$ est la norme euclidienne du vecteur $\underline{x}$.

1.3.3 La représentation intégrale

En prenant $p_1 = p$ la solution de (1.6) et $p_2 = G(. - \underline{x})$ dans (1.17) on obtient :

$$\int_{\partial\Omega} \left(G(\underline{y} - \underline{x}) \mathbf{grad} p(\underline{y}) - p(\underline{y}) \mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) \right) .\underline{n}\,\mathrm{dS}_y$$
$$= - \int_{\Omega} f(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x}) - \delta(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y})\,\mathrm{dV}_y \;\forall \underline{x} \notin \partial\Omega \tag{1.21}$$

D'où la formule de *représentation intégrale* qui lie la valeur de la pression en tout point de l'espace à sa valeur et à celle de son gradient sur la frontière du domaine ainsi qu'aux sources volumiques. La représentation diffère selon que le point $\underline{x}$ se trouve à l'intérieur du domaine ou non :

$$p(\underline{x}) = -\int_{\partial\Omega} \left(p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y + \int_\Omega f(\underline{y})G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{dV}_y \;\forall \underline{x}\in\Omega \tag{1.22}$$

$$0 = \int_{\partial\Omega} \left(p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y - \int_\Omega f(\underline{y})G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{dV}_y \;\forall \underline{x}\notin\overline{\Omega} \tag{1.23}$$

Comme dans toute la suite de ce travail nous nous plaçons dans le cas où il n'y a pas de source volumique (i.e. $f=0$), le problème intérieur (1.22) se réécrit :

$$p(\underline{x}) = -\int_{\partial\Omega} \left(p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y \;\forall \underline{x}\in\Omega \tag{1.24}$$

$$0 = \int_{\partial\Omega} \left(p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y \;\forall \underline{x}\notin\overline{\Omega} \tag{1.25}$$

Problème extérieur Comme nous n'avons pas encore présenté le problème au limite, le choix du domaine Ω n'a pas encore été posé. Prenons un peu d'avance, en considérant les problèmes dit *extérieurs* c'est à dire définis sur un domaine non borné extérieur à un domaine borné Ω. Les équations (1.24) sont alors encore valables (on fera attention dans ce cas à l'orientation de la normale) à condition que les champs soient décroissants (i.e. $p=o(1)$) ou satisfassent à la condition de *radiation de Sommerfeld* à l'infini.

Cette condition qui traduit l'absence de source à l'infini s'écrit pour p :

$$\mathbf{grad}p.\underline{x} - ikp = O(\frac{1}{|\underline{x}|}) \text{ pour } |\underline{x}|\to\infty \tag{1.26}$$

Une solution satisfaisant cette condition, dite *radiative*, peut aussi se mettre sous la forme (voir [26])

$$p(\underline{x}) = \frac{e^{ik|\underline{x}|}}{|\underline{x}|}\left\{p_\infty(|\underline{x}|) + O(\frac{1}{|\underline{x}|})\right\} \text{ pour } |\underline{x}|\to\infty \tag{1.27}$$

où p_∞ est appelé le *champ lointain* (*far field pattern* en anglais). Certaines approches de la diffraction inverse repose sur l'hypothèse que le champ lointain est mesuré.

1.3.4 Equation intégrale de frontière

On peut être tenté une fois en possession des équations de représentations intégrales (1.24) d'étudier le cas limite où le point $\underline{x}$ appartient à la frontière.

Or la fonction $G(. - \underline{x})$ est singulière en $\underline{x}$ et la singularité de son gradient est de l'ordre de $1/|\underline{y} - \underline{x}|^2$, il ne suffit donc pas de prendre $\underline{x}$ sur la frontière dans l'équation (1.24) pour obtenir l'*équation intégrale de frontière*.
Nous allons considérer un domaine, nommé $\Omega_\varepsilon(\underline{x})$, qui correspond au domaine Ω privé d'un ouvert de dimension caratéristique ε contenant le point de frontière $\underline{x}$ (cet ouvert est appelé ouvert d'exclusion et noté v_ε). La frontière du nouveau domaine $\Omega_\varepsilon(\underline{x})$ est donc $(\partial\Omega - e_\varepsilon) + s_\varepsilon$ avec $e_\varepsilon = \partial\Omega \cap v_\varepsilon$ et $s_\varepsilon = \partial v_\varepsilon \cap \Omega$. L'équation intégrale de frontière s'obtient après passage à la limite quand ε tend vers zéro du problème extérieur :

$$0 = \int_{(\partial\Omega - e_\varepsilon) + s_\varepsilon} (p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) - G(\underline{y} - \underline{x})\mathbf{grad} p(\underline{y})).\underline{n}\, dS_y \\ - \int_\Omega f(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x})\, dV_y \quad (1.28)$$

Sous des conditions de régularités suffisantes (nous renvoyons le lecteur à [10] pour la démonstration complète), le passage à la limite $\varepsilon \to 0$ donne l'équation intégrale régularisée :

$$\int_{\partial\Omega} (p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) - p(\underline{x})\mathbf{grad}_y G^0(\underline{y} - \underline{x}) - G(\underline{y} - \underline{x})\mathbf{grad} p(\underline{y})).\underline{n}\, dS_y \\ - \int_\Omega f(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x})\, dV_y = 0 \ \forall \underline{x} \in \partial\Omega \quad (1.29)$$

où G^0 est la solution de Green pour un domaine infini de l'équation de Laplace (équation « statique » associée à l'équation de Helmholtz), $G^0(\underline{y} - \underline{x}) = 1/(4\pi|\underline{y} - \underline{x}|)$. De même que pour la représentation intégrale, nous considérerons dans la suite la forme simplifiée en l'absence de sources volumiques :

$$\int_{\partial\Omega} (p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) - p(\underline{x})\mathbf{grad}_y G^0(\underline{y} - \underline{x})).\underline{n}\, dS_y \\ = \int_{\partial\Omega} G(\underline{y} - \underline{x})\mathbf{grad} p(\underline{y}).\underline{n}\, dS_y \ \forall \underline{x} \in \partial\Omega \quad (1.30)$$

Bien que l'on préférera généralement évaluer ce terme numériquement, on notera que

$$\int_S \mathbf{grad}_y G^0(\underline{y} - \underline{x}).\underline{n}\, dS_y = -\frac{\omega(\underline{x}, S)}{4\pi} \quad (1.31)$$

où ω est l'angle solide algébrique sous lequel $\underline{x}$ voit S, il est donc égal à 2π si S est fermée et $\underline{x}$ un point suffisamment régulier (c.à.d. auquel S admet une normale unique). On pourra retrouver dans ce cas l'équation intégrale plus classique (i.e. non régularisée) :

$$\frac{1}{2}p(\underline{x}) = -\int_{\partial\Omega} (p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})).\underline{n}\, dS_y \tag{1.32}$$

Dans ce cas, l'intégrale est prise au sens de la valeur principale de Cauchy. De la même manière on obtiendrait l'équation intégrale pour le problème extérieur :

$$\frac{1}{2}p(\underline{x}) = \int_{\partial\Omega} (p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})).\underline{n}\, dS_y \tag{1.33}$$

où $\underline{n}$ est encore la normale extérieure à Ω donc intérieure à $\mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega}$.

Par ailleurs, notons enfin que tout champ p vérifiant l'équation intégrale (1.30) satisfait automatiquement à la condition de radiation de Sommerfeld. Ceci a une conséquence pratique importante que certaines méthodes exploitent. En effet, la résolution du problème extérieur se réduit alors à une équation intégrale définie sur une surface bornée.

1.4 Étude du problème direct

Comme on le verra dans la suite, la résolution du problème inverse nécessite une bonne connaissance du problème direct associé. Vu les éléments que nous avons déjà mis en place, nous préciserons juste dans cette section les conditions aux limites spécifiques à la diffraction. Les problèmes directs sont, par définition, bien posés au sens de Hadamard. Ils sont étudiés depuis longtemps, et de nombreuses méthodes de résolution existent (voir par exemple [50], [51] ou [27]), nous en présenterons quelques unes. On peut classer les problèmes directs de diffraction en deux grandes catégories : ceux pour lesquels on considère un obstacle inclus dans un milieu homogène (on notera le cas particulier des fissures : variétés à 2 dimensions) et ceux d'une région hétérogène.

1.4.1 Diffraction par un obstacle dans un milieu homogène

Lorsque l'on considère un obstacle Θ, mou ou rigide, celui-ci n'appartient pas au domaine de propagation des ondes. Il intervient comme *frontière* du domaine de propagation. Les conditions aux limites imposées sur cette frontière sont déterminées par la nature de l'obstacle. Considérons successivement les conditions classiques de Dirichlet et Neumann. Les conditions aux limites de type Dirichlet s'écrivent pour la pression :

$$p(x) = p_d,\ \forall x \in \partial\Theta \tag{1.34}$$

le cas $p_d = 0$ correspondant à un objet *mou*. Les conditions de type Neumann sont quant à elles définies par :

$$\frac{\partial p}{\partial n}(x) = \phi_d, \ \forall x \in \partial\Theta \tag{1.35}$$

le cas $\phi_d = 0$ correspondand à un objet impénétrable ou *rigide*.

Diffraction par un obstacle rigide en domaine infini [14] : Dans ce cas particulier on considère que l'obstacle Θ est baigné dans un milieu infini. Le domaine de propagation est donc $\Omega = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Theta}$. Pour les problèmes de diffraction, il est d'usage de séparer la pression en une partie qui correspond à l'onde incidente connue, notée p^i, et une seconde à l'onde diffractée recherchée p^d :

$$p = p^i + p^d \tag{1.36}$$

Or, l'onde incidente étant solution de l'équation de Helmholtz dans tout l'espace, elle l'est en particulier dans le domaine Θ d'où :

$$0 = \int_{\partial\Theta} (p^i(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) - G(\underline{y} - \underline{x})\mathbf{grad} p^i(\underline{y})).\underline{n}\, \mathsf{dS}_y, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Theta} \tag{1.37}$$

où $\underline{n}$ est la normale extérieure à Θ, tandis que p^d admet la représentation intégrale

$$p^d(\underline{x}) = \int_{\partial\Theta} (p^d(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}) - G(\underline{y} - \underline{x})\mathbf{grad} p^d(\underline{y})).\underline{n}\, \mathsf{dS}_y, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Theta} \tag{1.38}$$

Donc p admet la représentation intégrale :

$$p(\underline{x}) = p^i(\underline{x}) + \int_{\partial\Theta} p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}).\underline{n}\, \mathsf{dS}_y, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Theta} \tag{1.39}$$

Par un raisonnement analogue, on obtient l'équation intégrale :

$$\frac{1}{2}p(\underline{x}) = p^i(\underline{x}) + \int_{\partial\Theta} p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}).\underline{n}\, \mathsf{dS}_y, \quad \forall \underline{x} \in \partial\Theta \tag{1.40}$$

Dans le cas d'un domaine borné, on devra également spécifier quelles conditions sont vérifiées sur la frontière extérieure. Evidemment on peut imaginer une frontière combinant les différents types de conditions. On notera alors S_D la partie de la frontière où la pression est imposée et S_N celle où sa dérivée normale l'est. Pour que le problème soit bien posé il faut alors qu'elles forment une partition de la frontière (i.e. $\partial\Omega = S_D \cup S_N$ et $S_D \cap S_N = \emptyset$, voir [2] par exemple).

Les fissures

Les obstacles de type fissures en élastodynamique (ou des obstacles infiniment fins en acoustique) ont par leur nature particulière donné lieu à des méthodes de résolutions spécifiques [4, 5, 11, 52]. En effet, l'obstacle en entier n'est alors qu'une frontière et se manifeste dans le milieu par une discontinuité de certaines grandeurs locales. Mathématiquement cela se formule par des équations de saut.

Le cas des hautes fréquences : l'approximation de Kirchhoff [14, 26]

L'approximation de Kirchhoff, ou de l'optique physique, consiste en deux hypothèses simplificatrices valables quand la longueur d'onde est petite devant les autres dimensions caratéristiques, notées a. Autrement dit $ka \gg 1$.

Ces deux hypothèses sont :

- Seule la partie éclairée S^+ de l'obstacle participe à la diffraction (ceci revient à négliger des réflexions multiples) ;
- dans (1.40) le terme intégral est négligeable devant le premier terme.

Sous ces hypothèses on peut résoudre assez simplement le problème de diffraction par un obstacle rigide :

Diffraction par un obstacle rigide en domaine infini, cas des hautes fréquences [14] : En effet, la deuxième hypothèse de Kirchhoff se traduit par $p^d \approx 1/2p$ sur $\partial\Omega$. Autrement dit, l'onde se réfléchit totalement sur l'obstacle : $p^i \approx p^d$ ou encore $p \approx 2p^i$, ce qui reporté dans (1.39) donne explicitement la pression diffractée (il n'est plus nécessaire de résoudre (1.40)) :

$$p^d(\underline{x}) = 2\int_{S^+} p^i(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}).\underline{n}\,\mathsf{dS}_y, \quad \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Theta} \tag{1.41}$$

1.4.2 Propagation en milieu hétérogène

L'autre possibilité de formulation d'un problème de diffraction est de considérer un milieu dont les propriétés varient [26]. Nous avons déjà évoqué cette possibilité lors de la formulation des équations. Nous nous intéresserons dans ce paragraphe à un exemple « homogène par morceaux », et au cas limite à basse fréquence où le contraste entre l'« obstacle » et le milieu est faible.

Reprenons l'équation de Helmholtz pour un milieu hétérogène (1.7), que l'on peut encore écrire :

$$\Delta p + \frac{\omega^2}{c_0^2}p + \left(\frac{\omega^2}{c(x)^2} - \frac{\omega^2}{c_0^2}\right)p = 0 \tag{1.42}$$

On considère par ailleurs qu'il existe un domaine borné Θ en dehors duquel le milieu est homogène de célérité c_0. Autrement dit le support de $q(x) = \omega^2\left(\frac{1}{c_(x)^2} - \frac{1}{c_0^2}\right)$ est

dans Θ, il est donc borné. D'où, d'après (1.22), la représentation intégrale pour p :

$$p(\underline{x}) = -\int_{\partial\Theta} \left(p(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y + \int_{\Theta} q(\underline{y})p(\underline{y})G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{dV}_y, \quad \forall \underline{x}\in\Theta \quad (1.43)$$

Par ailleurs, l'onde incidente vérifie (comme solution du problème intérieur homogène) :

$$p^i(\underline{x}) = -\int_{\partial\Theta} \left(p^i(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p^i(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y, \quad \forall \underline{x}\in\Theta \quad (1.44)$$

et celle diffractée est solution du problème extérieur :

$$0 = \int_{\partial\Theta} \left(p^d(\underline{y})\mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}) - G(\underline{y}-\underline{x})\mathbf{grad}p^d(\underline{y})\right).\underline{n}\,\mathrm{dS}_y, \quad \forall \underline{x}\in\Theta \quad (1.45)$$

En utilisant que $p = p^i + p^d$, on aboutit à l'équation :

$$p(\underline{x}) = p^i(\underline{x}) + \int_{\Theta} q(\underline{y})p(\underline{y})G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{dV}_y, \quad \forall \underline{x}\in\Theta \quad (1.46)$$

Comme le support de q est borné et inclus dans Θ, cette équation est valable sur tout ouvert contenant Θ. On peut même l'étendre à $\mathbb{R}^3$ sans changer le résultat (voir [45]). On obtient alors l'équation de *Lippmann-Schwinger* :

$$p(\underline{x}) = p^i(\underline{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} q(\underline{y})p(\underline{y})G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{dV}_y, \quad \forall \underline{x}\in\mathbb{R}^3 \quad (1.47)$$

Le cas des basses fréquences : l'approximation de Born

La fonction q peut encore s'écrire $q(\underline{x}) = \frac{\omega^2}{c_0^2}(\frac{c_0^2}{c^2(\underline{x})} - 1) = k^2(\frac{c_0^2}{c^2(\underline{x})} - 1)$. L'équation (1.46) , qui est de la forme $u = u^i + Lu$ peut être approchée par $u = u^i + Lu^i$ si $q(\underline{x}) \ll 1$: c'est l'*approximation de Born*[14]. Elle est donc justifiée dans le cas où soit la fréquence soit le contraste est faible.

1.4.3 Méthodes numériques de domaine

Dans les cas où l'on ne se trouve pas dans une plage de fréquences permettant les simplifications vues précédemment et que l'obstacle n'a pas une forme canonique ou que le domaine extérieur n'est pas borné, il n'est pas possible de faire appel à des méthodes analytiques de résolutions. Mais, depuis l'apparition des ordinateurs, il est heureusement possible de faire des calculs numériques avec un nombre d'inconnues assez important. Pour les problèmes de propagations d'ondes, en plus d'une bonne représentation

de la géométrie, il est nécessaire de décrire les variations du phénomène ondulatoire. Il est couramment admis qu'un minimum de dix points de discrétisation par longueur d'onde soit nécessaire (il semblerait qu'en s'approchant des hautes fréquences ce nombre dût augmenter).

Nous ne présenterons pas les méthodes numériques de domaines [7]. Nous rappelons qu'il en existe deux principales : la méthode des différences finies (obtenue directement à partir de l'équation de Helmholtz) et la méthode des éléments finis. Leur principal avantage est de pouvoir prendre en compte simplement les hétérogénéités de comportement à l'intérieur du domaine. Leur principal inconvénient est dans les cas non bornés où il est nécessaire de mailler un domaine important. D'autre part, le domaine de simulation étant inévitablement fini, des conditions aux limites doivent être imposées afin d'essayer de prendre en compte le comportement des ondes sortantes. En particulier, la condition de Sommerfeld n'est jamais exactement vérifiée. Toutefois, des conditions absorbantes peuvent être appliquées aux limites du domaine de calcul et permettent, par exemple, de résoudre des problèmes d'inversion en $3D$ [35].

1.4.4 La méthode des éléments de frontière

La discrétisation de la frontière du domaine et des champs inconnus transforme les équations intégrales vues précédemment en un système linéaire : c'est la *méthode des éléments de frontière* [10]. Nous discuterons de ses propriétés dans l'introduction du chapitre 2. Notons toutefois que ces méthodes sont fort appréciées quand le domaine est non borné pour les raisons que nous avons déjà évoquées. Pour notre part nous retiendrons que cette méthode réduit d'une dimension l'espace maillé et que le remaillage des frontières internes est plus simple que le maillage volumique de tout le domaine. Cependant ces considérations concernent essentiellement une méthode de résolution du problème inverse.

L'équation intégrale conduit à un système linéaire dont la matrice est pleine et complexe, ce qui limite sévèrement (besoin mémoire $O(N^2)$ et temps de calcul $O(N^3)$) la taille numérique (nombre N d'inconnues nodales sur les éléments de frontière) des problèmes si un solveur direct est employé. Pour traiter les calculs de grande taille occasionnés par le contexte 3D, on est ainsi amené à faire appel à un solveur itératif, qui ne demande pas le stockage de la matrice. La rapidité de résolution dépend alors essentiellement de celle du calcul d'un produit matrice-vecteur. Cette opération est *a priori* de complexité $O(N^2)$, rédhibitoire pour les cas de grande taille (domaine grand devant la longueur d'onde). La *méthode multipôle rapide*, ou *Fast Multipole Method* en anglais (FMM), initialement proposée par Greengard et Rohklin vers 1985 et depuis étendue aux formulations intégrales de nombreux problèmes de la physique, permet d'accélérer cette phase cruciale du calcul et réduire la complexité d'un produit matrice-vecteur à $O(N \log N)$ en dynamique. Elle sera étudiée dans ce travail.

1.5 Résolution du problème inverse

Sont habituellement désignés comme *problèmes inverses* des problèmes d'inversion qui sont également *mal posés* au sens d'Hadamard. Ce caractère mathématique a fait que pendant longtemps ils n'ont pas été étudiés. Désormais la situation a changé et les intérêts pratiques déjà évoqués ont suscité de nombreuses études sur les problèmes mal posés en particulier les problèmes inverses [6, 12, 14, 43, 66]. Passons en revue quelques méthodes proposées dans un cadre dynamique.

1.5.1 Méthodes linéaires

Dans des cas limites déjà présentés pour la résolution du problème direct il est possible de formuler le problème inverse sous la forme d'un problème linéaire. C'est le cas par exemple pour la détection d'un obstacle rigide à haute fréquence ou celui d'une région de faible contraste à basse fréquence, si les mesures sont effectuées suffisamment loin de l'obstacle (mesure en champ lointain) (voir [14]).

1.5.2 Écart à la réciprocité

Des méthodes utilisant des fonctionnelles d'écart à la réciprocité sont utilisées pour la détection de fissures. Initialement développées par Andrieux pour la détection de fissures planes dans des solides par des mesures statiques [3, 4, 5] . Des travaux récents de Bui, Constantinescu, Maigre exploite la même idée en dynamique [15, 16]. L'idée principale de la méthode consiste à exploiter le non respect d'une identité de réciprocité (type Maxwell-Betti) entre un champ défini sur un domaine sain et un autre défini sur le domaine réel dans le cas de présence d'une fissure. Ensuite, la méthode repose sur le choix judicieux de familles de champs adjoints définis sur le domaine sain afin d'obtenir des informations successivement sur l'inclinaison du plan de la fissure, sa position et l'étendue de la fissure.

La méthode appliquée à la dynamique exploite les mêmes idées. Notons toutefois que l'obtention des informations est moins explicite et nécessite plus d'expériences numériques. En particulier, c'est l'enveloppe convexe de la fissure qui est obtenue. Par ailleurs, on pourra noter que dans ce cas la détection est de type impulsionnelle et nécessite des envois d'ondes dans un maximum de directions.

1.5.3 Approche par optimisation

Ces méthodes proposent de chercher la solution du problème inverse comme minimum d'une certaine *fonction coût* ou *fonction objectif* J choisie par l'utilisateur [12, 9]. La fonction coût pourra, par exemple, être une distance au sens des moindres carrés entre des données mesurées et des données simulées. Notons que cette démarche peut aussi être reliée à la méthode de régularisation, via la minimisation d'une fonctionnelle stabilisatrice, proposée par Tikhonov et Arsenine [66]. Résoudre notre problème nous porte donc à nous intéresser aux méthodes d'optimisation non-linéaires.

Nous distinguerons deux types d'approches pour la minimisation de la fonction coût, celles faisant appel à l'évaluation du gradient et celles utilisant un algorithme génétique.

Minimisation utilisant le gradient [2, 8, 20] Ces méthodes nécessitent la différentiabilité de la fonction coût puisque le minimum est cherché itérativement en suivant la pente du gradient. Les plus connues sont le gradient conjugué, DFP ou encore BFGS. Le minimum alors trouvé dépend fortement des conditions initiales choisies. Plus précisément ce minimum n'est que local, c'est le point le plus bas de la « cuvette » à laquelle appartient le point initial. En revanche, ce minimum est généralement trouvé en peu d'itérations. La fonction coût est évaluée peu de fois, mais son gradient l'est autant. Pour ne pas perdre le plus gros avantage de ce type de méthodes (le temps de calcul) la méthode d'évaluation du gradient doit être choisie soigneusement. Sans entrer dans les détails d'une discussion par ailleurs déjà menée [9], nous retiendrons que la méthode préconisée, la méthode de l'état adjoint, permet une évaluation du gradient d'un coût faible par rapport à celui de la fonction objectif.

Les algorithmes génétiques [2] Ces méthodes de minimisation itératives reposent sur l'évaluation de la fonction coût pour une *population* (i.e. un N-uplet de valeurs appelées *individus*) tirée aléatoirement. Cette population évolue à l'aide de critères de performances et de tirages aléatoires. Les avantages de telles méthodes sont qu'elles permettent une recherche globale du minimum et qu'elles ne reposent que sur l'évaluation de la fonction coût, en particulier elles ne nécessitent pas l'évaluation du gradient. Elles sont donc applicables à des fonctions non différentiables. Malheureusement chaque évaluation de la fonction coût nécessite la résolution d'un problème direct. Ces méthodes sont alors trop chères en temps de calcul, dans le contexte d'un problème de dynamique, puisque chaque itération nécessite l'évaluation de J pour chaque individu.

Inconvénients de l'approche par optimisation. Si les méthodes utilisant la minimisation d'un fonction coût permettent de resoudre finement le problème inverse, ces approches peuvent poser problème. En effet, chaque évaluation de la fonction coût nécessite la résolution d'un problème direct ce qui, pour la résolution d'un problème dynamique tridimensionnel peut devenir limitatif. En particulier, les algorithmes évolutionnaires nécessitant un très grand nombre de simulations directes sont donc écartés dans ce contexte. De leur coté les algorithmes plus classiques utilisant le gradient dépendent des choix initiaux (position, taille, forme, nombre) sur les obstacles à identifier et peuvent ne pas converger pour des choix inadéquats.

1.5.4 Méthodes d'exploration globale

Des méthodes récentes proposent donc une alternative à l'approche par optimisation. Elles ne nécessitent pas la résolution répétée du problème direct, mais reposent

sur le calcul d'une *fonction indicatrice* dont les valeurs donnent des informations sur la présence ou l'absence d'obstacle. Le principal avantage de ces méthodes est que le calcul de la fonction indicatrice, qui permet une exploration globale du domaine, est peu couteux par rapport à la résolution complète du problème d'optimisation, sans nécessité d'hypothèse physique trop forte. Un *état de l'art* pourra être trouvé dans l'article de synthèse récent [59].

La *linear sampling method* qui consiste à calculer, pour chaque point z, la solution g_z d'une équation intégrale *linéaire* de première espèce (E), permet de localiser un obstacle Θ. En effet, la norme de la fonction g_z est petite si $z \in \Theta$, elle est grande sinon. La construction de (E) repose sur la connaissance, à l'infini, du champ créé par une source ponctuelle placée au point z et de mesures du *champ lointain* dans toutes les directions. La linéarité de (E) est à l'origine du nom de la méthode proposée initialement dans [25] pour des obstacles rigides ou des milieux hétérogènes. Des applications au cas acoustique tridimensionnel pourront être trouvées dans [23], celles pour le cas electromagnétique dans [24]. Notons que cette méthode, qui teste pour chaque point son appartenance à l'obstacle, ne suppose pas la connexité de ce dernier.

La *méthode de la source singulière* [57, 58] repose sur l'utilisation de la méthode de la *source ponctuelle* [55, 56] qui permet de reconstruire une approximation du champ diffracté par un obstacle Θ. Cette reconstruction se fait à partir de la connaissance du champ lointain et l'utilisation, dans la représentation intégrale (1.38), d'une approximation en ondes planes, sur tout ou partie des directions, de la fonction de Green $G(\underline{.} - \underline{x})$ pour tout *point source* $\underline{x}$ extérieur à Θ. Appliquant cette méthode pour une source dont le champ diffracté, calculé au point $\underline{x}$ de la source, diverge proche de l'obstacle, ceci permet d'obtenir des informations sur la frontière de cet obstacle. C'est le cas en particulier, pour un obstacle rigide ou mou, si la source est la fonction de Green $G(\underline{.} - \underline{x})$. Des exemples tridimensionnels en acoustique sont donnés dans [32].

La *probe method* repose sur un principe similaire à celui de la méthode de la source singulière. Elle s'appuie, en effet, sur le calcul d'une fonction indicatrice qui diverge pour des points proches de la frontière de l'obstacle recherché. Cette fonction, dite en « énergie », est la représentation intégrale (1.24) (calculée sur la frontière d'un domaine contenant l'obstacle) de la solution diffractée par l'obstacle d'un champ créé par une source ponctuelle placée en $\underline{x}$. Dans cette intégrale à la fois la fonction de Green et le champ diffracté sont approximés. Cette méthode, antérieure à la précédente, a été proposée dans [41, 42], puis testée numériquement [33].

C'est dans le cadre de ce type de méthode que se situe ce travail. Nous avons choisi comme fonction indicatrice le calcul du *gradient topologique* associée à une fonction coût d'écart aux moindres carrés. Cette approche déjà proposée dans [13, 40, 36], s'appuie sur des travaux antérieurs d'optimisation topologique des structures [64, 37]. C'est une méthode d'exploration globale à caractère qualitatif. En effet, elle exploite une notion de nature asymptotique dont la validité mathématique est restreinte aux obstacles de taille infinitésimale.

1.6 Objectif et contenu

Résolution du problème acoustique direct par la méthode multipôle rapide. Le premier aspect sur lequel ce travail s'est penché porte sur l'accélération du problème direct (calcul du champ acoustique pour une configuration donnée d'obstacle), indispensable pour évaluer la fonction-coût du problème inverse.

La mise en oeuvre de la FMM pour l'acoustique linéaire en 3D est ainsi l'une des composantes importantes de ce travail. Elle s'appuie sur des études récentes (en particulier [65, 30, 29]) effectuées dans le cadre de la résolution numérique des équations de Maxwell. Le code issu de ce travail de thèse vérifie en particulier la complexité $O(N \log N)$ théorique, et a été validé sur des solutions exactes de l'acoustique 3D. Le chapitre 2 abordera l'aspect théorique de la méthode et sera suivi, au chapitre 3, de choix pratiques de programmation ainsi que de résultats de validations numériques.

Méthode d'identification approchée d'obstacles par sensibilité topologique. Le second point étudié porte sur l'initialisation des algorithmes d'inversion utilisant la minimisation de la fonction coût. Des travaux récents [40, 13] ont montré que le calcul du champ de sensibilité topologique associé à la fonction coût du problème inverse (une notion initialement proposée vers 1995 pour l'optimisation topologique des structures) permet d'obtenir de bonnes informations qualitatives sur la localisation d'obstacles à identifier. Le champ de sensibilité topologique, donnant le comportement asymptotique de la fonction-coût sous l'effet de l'apparition d'un obstacle de taille infinitésimale en un point spécifié du milieu, s'exprime comme une combinaison du champ direct et du champ adjoint associé à la fonction-coût, tous deux définis en l'absence d'obstacle. Le calcul de ce champ de sensibilité repose ainsi sur l'évaluation des formules de représentation intégrale donnant les champs direct et adjoint aux points d'une grille d'échantillonnage de la région 3D dans laquelle on cherche à identifier un défaut. Ce calcul, également coûteux a priori ($O(NM)$ pour $O(N)$ DDLs sur la frontière et $O(M)$ points d'échantillonnage), est lui aussi considérablement accéléré par l'emploi de la FMM. La FMM constitue donc au total une approche numérique bien adaptée à cette méthode d'exploration globale approchée reposant sur la sensibilité topologique. Le calcul FMM du champ de sensibilité topologique a été mis en oeuvre, et son intérêt testé sur des exemples synthétiques d'inversion. En particulier, pour une fonction-coût de type moindres carrés, la sensibilité topologique dépend linéairement des erreurs de mesure, et son calcul est donc moins sensible à ces erreurs que d'autres méthodes d'inversion.

Ce travail débouche donc sur une méthode approchée et rapide, utilisant les deux aspects présentés, qui donne des indications sur le nombre d'obstacles et leurs positions dans le domaine. Cette méthode sera l'objet du chapitre 4.

Chapitre 2

Méthode multipôle rapide : partie théorique

2.1 Présentation

L'équation intégrale (1.30) présentée au chapitre 1 conduit, après discrétisation par des éléments finis de frontière, à résoudre un système linéaire dont la matrice est complexe, pleine et non symétrique. Ce type de problème a, évidemment, été très largement étudié et on peut dégager deux grandes familles de méthodes de résolution.

Les méthodes directes, qui consistent à factoriser la matrice, ont des avantages. La résolution est exacte (en fait limitée par la précision machine) et une fois la matrice factorisée on peut résoudre le système pour des seconds membres supplémentaires à un coût réduit par rapport à la factorisation. Les plus connues de ces méthodes reposent sur les factorisations LU (matrices non symétriques) ou $L^T DL$ (matrices symétriques). Malheureusement, elles sont très couteuses en temps de calcul et en espace mémoire pour les matrices générées par la méthode des éléments de frontière, qui sont pleines, dès lors que le nombre d'inconnues nodales devient élevé. Pour un système à N degrés de liberté, le stockage de la matrice est de l'ordre de $O(N^2)$, le temps de résolution croît en $O(N^3)$. Sur les ordinateurs personnels actuels ces conditions nous limitent à des problèmes dont la taille est de l'ordre d'une dizaine de milliers d'inconnues nodales surfaciques, ce qui restreint les applications possibles.

C'est pourquoi dans la pratique les méthodes itératives sont attractives. Le stockage de la matrice n'est alors plus nécessaire, et le processus est accéléré. Chaque itération utilise typiquement un produit matrice-vecteur, ce qui mène *a priori* à un temps de calcul de l'ordre de $O(n_{iter}N^2)$, où n_{iter} est très inférieur au nombre d'inconnues du système. Ces méthodes tentent de s'approcher par approximations successives de la solution du problème. On considère la résolution terminée quand le résidu est inférieur à une limite fixée à l'avance par l'utilisateur. Pour ce faire chaque méthode itérative a

une stratégie spécifique mais elles reposent toutes sur le même principe.

Regardons de plus près ces méthodes itératives. L'étape déterminante de la méthode itérative est l'évaluation, à chaque itération, du résidu :

$$\{b\} - A\{u\} \tag{2.1}$$

nécessitant d'effectuer le produit du vecteur d'essai $\{u\}$ par la matrice A. Dans le cas général où la matrice est pleine le temps de calcul est donc de l'ordre de $O(n_{iter}N^2)$. Le but de la méthode multipôle rapide, décrite dans ce chapitre, est d'accélérer le temps de calcul de ce produit pour certains problèmes dont la matrice est pleine mais possède certaines propriétés. Le coût d'un produit matrice-vecteur devient alors en $O(N)$ pour la résolution des problèmes statiques (équation de Laplace ou élastostatique) et en $O(N \log N)$ pour les problèmes dynamiques (équation de Helmholtz, de Maxwell ou de l'élastodynamique en régime fréquentiel).

La *Fast Multipole Method* (FMM), ou Méthode Multipôle Rapide en français, a été initialement proposée par Greengard et Rokhlin [38] pour la simulation de systèmes à grands nombres de particules en interaction. L'utilisation de la méthode a été ensuite étendue à la résolution de l'équation de Laplace formulée par des équations intégrales de frontière en deux dimensions [61] puis en trois dimensions [39, 31]. Depuis, elle conquiert tous les domaines de la physique, elle est particulièrement utilisée en électromagnétisme [22, 29, 30, 65] et apparaît désormais en mécanique [48, 53, 68].

Formulation initiale : calcul de champs électrostatiques

La *Fast Multipole Method* est apparue au début des années quatre-vingt pour résoudre des problèmes d'électrostatique avec $O(N)$ charges et $O(N)$ points d'observations.



Sources Points d'observations

Regardons les équations de ce problème : en chaque point d'observation $\underline{x}_i$ le potentiel électrostatique créé par les n charges q_j placées aux sites $\underline{y}_j$ vaut :

$$\phi(\underline{x}_i) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{j=1}^{n} \frac{q_j}{|\underline{y}_j - \underline{x}_i|} \tag{2.2}$$

Ainsi, en notant par Φ le vecteur $4\pi\varepsilon_0(\phi(\underline{x}_1), \phi(\underline{x}_2), ..., \phi(\underline{x}_m))$, par A la matrice de composantes $A_{ij} = \frac{1}{|\underline{y}_j - \underline{x}_i|}$ et par Q le vecteur $(q_1, q_2, ..., q_n)$, le calcul des potentiels peut être mis sous la forme d'un produit matrice-vecteur :

$$\Phi = AQ$$

La matrice A étant pleine et non-symétrique ce produit a un coût en temps de calcul qui est a priori de l'ordre de $O(N^2)$. L'idée de la méthode proposée par Greengard et Rokhlin est d'accélerer ce calcul en faisant des calculs « par paquets ». Plus précisément, elle exploite le fait que l'effet d'un ensemble de charges en des points d'observation suffisamment éloignés est approximativement égal à celui d'un ensemble de sources multipolaires fictives placées au centre de l'ensemble de charges considéré. En pratique, ceci se traduit par deux éléments essentiels :

1 **Une formule d'addition** qui dépend de la physique du problème considéré, et qui exprime l'effet lointain d'une source ponctuelle comme somme de contributions multipôlaires.

2 **Un algorithme**, qui est le coeur de la méthode. Il est valable pour tous les problèmes, à quelques variantes près, et consiste à utiliser la formule d'addition le plus efficacement possible.

Cet exemple historique met bien en avant le fait que le but essentiel de la méthode est d'accélerer un produit matrice vecteur, la matrice étant définie à partir d'une fonction d'influence (traduisant dans cet exemple les effets électrostatiques). Nous l'utilisons pour notre part dans une méthode itérative de résolution d'un système linéaire résultant de la discrétisation d'équations intégrales de frontières.

La partie algorithmique est dans son principe commune à toutes les applications, nous la présenterons d'abord, en section 2. La formulation de la FMM pour l'équation de Helmholtz nécessite une attention particulière, et la section 3 lui sera consacrée. Enfin, au chapitre 3, des détails de mise en œuvre accompageront des résultats numériques de validation.

2.2 Algorithme

A la vue de ce qui vient d'être dit, il parait évident qu'il suffit de présenter la méthode pour le calcul d'un produit matrice-vecteur afin d'en comprendre le mécanisme. Mieux, dans le cas des équations intégrales de frontières on a tout intérêt à exposer ces principes avant discrétisation (i.e. sur le calcul d'une intégrale) ce que nous ferons avec le terme représentatif

$$\int_\Gamma G(\underline{y}-\underline{x})p(\underline{y})\,\mathrm{d}S_y, \tag{2.3}$$

(où le point $\underline{x}$ parcourt typiquement tous les nœuds du maillage éléments de frontière) à partir duquel on pourra déduire tous les autres cas.

Les méthodes de calcul classiques de cette contribution demandent un temps de calcul d'ordre $O(N^2)$ car pour chaque nouveau choix de $\underline{x}$ toutes les intégrales élémentaires doivent être recalculées.

L'algorithme de la Fast Multipole Method nécessite l'utilisation d'une formule, dite d'addition, propre à chaque solution fondamentale. Pour fixer les idées, on peut l'imaginer comme un développement en série de Taylor autour d'un point de la solution fondamentale, ce sera parfois le cas. Nous supposerons dans cette section que l'on dispose d'une telle formule, sans se soucier de la façon dont elle a été obtenue. Aussi, nous présenterons une formule d'addition générique, représentante abstraite de ce qu'on obtiendrait pour chaque problème, qui nous permettra d'exposer et de discuter la partie commune à tous les problèmes : l'algorithme multipôle.

2.2.1 La formule d'addition

La formule d'addition, développement en série de la fonction de Green autour d'une origine $\underline{x}_0$ choisie arbitrairement, se présentera sous la forme générique

$$G(\underline{y}-\underline{x}) = G(\underline{y}-\underline{x}_0+\underline{x}_0-\underline{x}) = G(\underline{r}'+\underline{r}) = \sum_n \sum_{m=-n}^{n} I_n^m(\underline{r})O_n^m(\underline{r}') \tag{2.4}$$

en $3D$, et sous la forme générique

$$G(\underline{y}-\underline{x}) = G(\underline{y}-\underline{x}_0+\underline{x}_0-\underline{x}) = G(\underline{r}'+\underline{r}) = \sum_n I_n(\underline{r})O_n(\underline{r}') \tag{2.5}$$

en $2D$, les facteurs $I_n(\underline{r})$, $O_n(\underline{r}')$ ou $I_n^m(\underline{r})$, $O_n^m(\underline{r}')$ étant connus analytiquement et dépendant de la solution fondamentale utilisée.

Usuellement ces formules sont valides sous certaines conditions, une condition typique est $|\underline{r}'| > |\underline{r}|$. On note dès maintenant que l'apparition de (sommes de) produits de fonctions de $\underline{x}$ et $\underline{y}$ dans (2.4) ou (2.5) va permettre la réutilisation d'intégrales

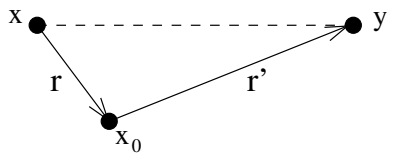


Figure 2.1: *Développement autour du point* $\underline{x}_0$

élémentaires pour tous les points $\underline{x}$, ce qui fournira l'un des facteurs de l'accélération réalisée par la FMM.

Accompagnons ces formules de trois remarques :

remarque 1 : Dans la suite de cette section introductive, on emploiera la forme (2.5) (valable en $2D$) pour des raisons de commodité de présentation et pour ne pas alourdir les formules. Les relations équivalentes pour le cas $3D$ s'obtiennent en remplaçant toutes les sommations simples (sur n) par des sommations doubles (sur n, m). Cet artifice de présentation ne sera plus employé à partir de la section 2.3.

remarque 2 : Pour les calculs numériques la série doit être tronquée à un nombre de termes t

$$G(\underline{r}' + \underline{r}) = \sum_{n=1}^{t} I_n(\underline{r}) O_n(\underline{r}') + \varepsilon(t, \frac{|r'|}{|r|}) \tag{2.6}$$

l'erreur alors commise ε peut être controlée et est une fonction décroissante de t et du rapport $|r'|/|r|$.

remarque 3 : Cette formule d'addition (2.5) s'accompagne de formules de « changement d'origine »qui sont de la forme

$$O_n(\underline{y} - \underline{x}) = \sum_{n'} I_{n'}(\underline{r}) O_{n+n'}(\underline{r}') \tag{2.7}$$

$$I_n(\underline{y} - \underline{x}) = \sum_{n'} I_{n'}(\underline{r}) I_{n-n'}(\underline{r}') \tag{2.8}$$

on notera qu'elles apparaissent aussi généralement sous la forme d'une convolution discrète pour les cas tridimensionnels.

Exemple de l'équation de Laplace en 3D : Pour l'équation de Laplace en 3D, la fonction de Green d'un domaine infini est

$$G(\underline{y} - \underline{x}) = \frac{1}{4\pi|\underline{y} - \underline{x}|} \tag{2.9}$$

cette fonction admet un développement en série de la forme (2.4) (sous la condition $|\underline{r}| < |\underline{r}'|$) avec

$$I_n^m(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi(n+m)!} P_n^m(\cos\theta) e^{im\phi} r^n \tag{2.10}$$

où le vecteur $\underline{r}$ est représenté par ses coordonnées sphériques (r, θ, ϕ), et

$$\overline{O}_n^m(\underline{r}') = \frac{(n-m)!}{4\pi} P_n^m(\cos\theta') e^{im\phi'} \frac{1}{r'^{n+1}} \tag{2.11}$$

où P_n^m est une fonction de Legendre associée et où $\overline{a}$ est le complexe conjugué de a. En tronquant la série sur n à un nombre de termes t, l'erreur commise est alors majorée par

$$\left| G(\underline{r}' + \underline{r}) - \sum_{n}^{t} \sum_{m=-n}^{n} I_n^m(\underline{r}) O_n^m(\underline{r}') \right| \leq \alpha \left(\frac{r}{r'} \right)^{t+1} \tag{2.12}$$

On remarque que l'utilisation de la formule (2.7) nous permet de symétriser la formule d'addition, en faisant apparaitre un développement en série autour de deux points $\underline{x}_0$ et $\underline{y}_0$:

$$\begin{aligned} G(\underline{y} - \underline{x}) &= G(\underline{y} - \underline{y}_0 + \underline{y}_0 - \underline{x}_0 + \underline{x}_0 - \underline{x}) \\ &= \sum_n I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) O_n(\underline{y} - \underline{y}_0 + \underline{y}_0 - \underline{x}_0) \\ &= \sum_{n,n'} I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) O_{n+n'}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) I_{n'}(\underline{y} - \underline{y}_0) \end{aligned} \tag{2.13}$$

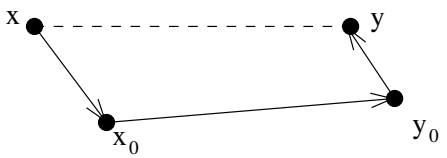
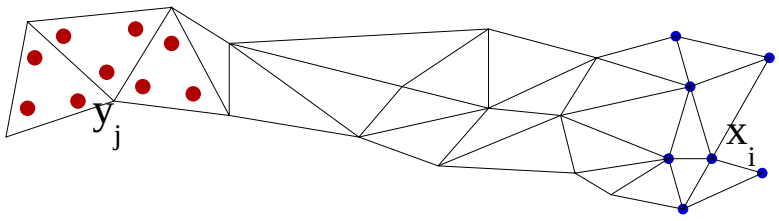


Figure 2.2: *Développement autour des deux points $\underline{x}_0$ et $\underline{y}_0$*

A partir de cette formule l'idée principale de l'algorithme va être de faire les calculs par « paquets ». Prenons, pour un instant, le calcul d'une intégrale de frontière de type (2.3) après discrétisation. Par le biais de la solution fondamentale chaque point de collocation est « relié » à chaque point de Gauss. On peut prendre l'analogie de sources (charges électrostatiques) pour les points de Gauss et de points d'observation pour les points de collocation.



Points de Gauss = « Sources » Points de collocations = « Points d'observations »

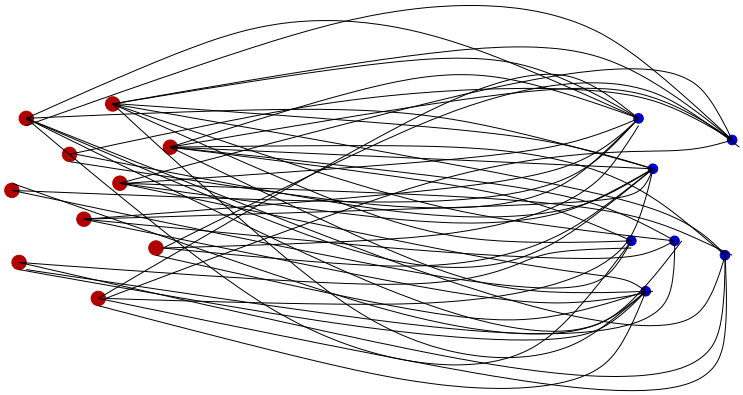
L'intégration numérique du terme (2.3) calculé pour chaque point de collocation $\underline{x}_i$ se met en effet sous la forme :

$$\phi(\underline{x}_i) = \sum_{\underline{y}_j \in \text{Gauss}(\Gamma)} \omega_j G(\underline{y}_j - \underline{x}_i) p(\underline{y}_j) \tag{2.14}$$

Gauss(Γ) étant (en laissant de coté le fait que certaines intégrales élémentaires sont singulières) l'ensemble des points de Gauss de la surface Γ et ω_j le poids de Gauss associé au point $\underline{y}_j$. En particulier pour l'équation de Laplace en $3D$, pour laquelle

$$G(\underline{y} - \underline{x}) = \frac{1}{4\pi|\underline{y} - \underline{x}|}, \tag{2.15}$$

on retrouve, à une constante près, l'équation (2.2). Le calcul de l'intégrale revient alors à calculer en chaque point d'observation le potentiel créé par un ensemble de charges. Un tel calcul par une méthode classique peut se visualiser sous la forme :



Sources Points d'observations

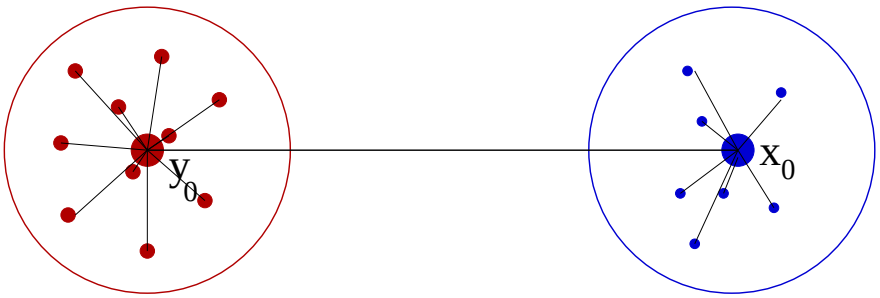
car la fonction $G(\underline{y} - \underline{x})$ établit un lien entre tous les points « sources » et tous les points d'« observation ».

La méthode multipôle se propose alors de réduire le nombre d'opérations à effectuer par deux idées. La première va être de créer des « paquets » de sources, i.e. une source équivalente (le *moment multipôle*) aux sources quand elles sont vues de suffisamment loin.



Source équivalente Points d'observations

La seconde idée est de créer un point d'observation $\underline{x}_0$ représentatif d'un groupe de points d'observation suffisamment éloigné du « paquet » de points sources considéré.



Source équivalente Point d'observation équivalent

Reste à choisir la façon dont on va construire ces « paquets ». L'idée qui a été retenue par tous les algorithmes multipôles est de découper l'espace en boîtes cubiques (dans le cas tridimensionnel). Mais comment choisir les tailles des paquets et leurs dispositions dans l'espace ? On distinguera deux approches pour répondre à cette question : l'une

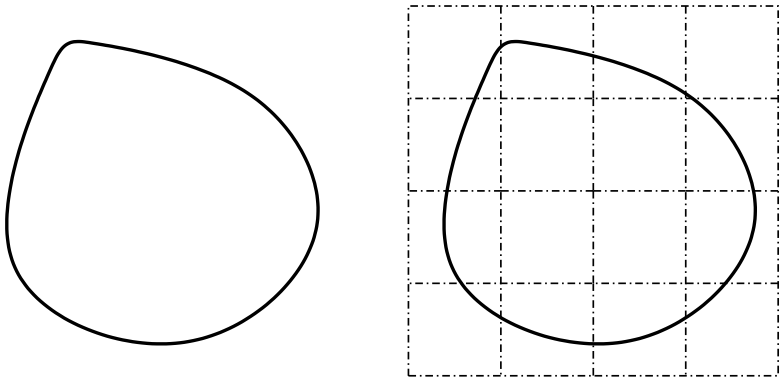
plus simple et plus ancienne, appelée méthode mono-niveau ; l'autre plus efficace : la méthode multi-niveau.

2.2.2 La méthode mono-niveau

Dans cette version de l'algorithme, toutes les boîtes cubiques (i.e. tous les « paquets »), que l'on appellera cellules, ont la même taille.

On considérera, dans un premier temps, que cette dimension est imposée puis l'on discutera de la taille optimale à choisir afin d'obtenir l'efficacité maximale.

L'espace est donc découpé en boîtes cubiques d'arêtes constantes. L'ensemble des centres de ces cubes forme ainsi une grille uniforme autour desquels seront effectués les développements en série. En d'autres termes, on prendra pour points $\underline{x}_0$ ou $\underline{y}_0$ dans les expressions telles que (2.13) les centres des cellules cubiques.



frontière seule frontière et cellules

Une fois le découpage effectué, l'algorithme se décompose en trois étapes :

1. Initialisation ou calcul des moments multipôles
2. Transfert
3. Fin ou calcul local

Détaillons chacune de ces étapes :

1. Initialisation Pour chaque cellule nous allons calculer le « moment multipôle » , c'est à dire la quantité :

$$M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{n'}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y, \ \forall n' \tag{2.16}$$

où $\underline{y}_0$ est un point de la cellule cubique C_y, on prendra son centre pour des raisons pratiques. Ce moment multipôle sera le représentant des sources de la cellule pour les cellules non adjacentes à C_y.

2. Transfert Cette étape ne concerne que des paires de cellules qui sont suffisament éloignées. Dans cette version de l'algorithme nous considèrerons que cela n'arrive que si les cellules ne se touchent pas (si elles n'ont aucun point en commun) sinon nous dirons qu'elles sont *voisines*. Pour chaque cellule C nous noterons $V(C)$ l'ensemble de ses cellules voisines (nous conviendrons que $C \in V(C)$). La phase de transfert consiste alors à calculer l'influence, sur une cellule C_x, de l'ensemble de ses cellules non voisines ce qu'on peut exprimer ainsi :

$$L_n(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \notin V(C_x)} \sum_{n'} O_{n+n'}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{n'}(C_y, \underline{y}_0), \ \forall n \tag{2.17}$$

où $\underline{x}_0$ est le centre de la cellule C_x. Certains auteurs appellent $L_n(C_x, \underline{x}_0)$ le « moment local », et la phase de transert le « multipole-to-local »(M2L en abrégé).

3. Fin Enfin, il reste à redistribuer l'information aux points de collocations appartenant à chaque cellule pour finaliser le calcul auquel il ne faudra pas oublier de rajouter des termes d'interactions proches (i.e. des voisins) qui n'ont pas été pris en compte par les étapes précédentes de l'algorithme et que l'on calculera par intégration numérique classique.

$$\int_\Gamma G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y = \sum_n I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) L_n(C_x, \underline{x}_0) \ + \ \int_{S \cap V(C_x)} G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \tag{2.18}$$

où C_x est la cellule contenant le point de collocation $\underline{x}$.

Pour effectuer l'évaluation de (2.3) sur l'ensemble des points de collocation $\underline{x}$ du maillage, il faut donc répéter ces trois étapes pour toutes les cellules C_x d'intersection non vide avec Γ.

Complexité Bien que nous ayons présenté la méthode pour le calcul d'une intégrale, nous allons compter le nombre d'opérations qu'un tel algorithme nécessite sur l'équation discrétisée. On suppose que la frontière comporte N degrés de liberté et que chaque cellule non vide en contient M. Le nombre de cellules non vides est donc $O(N/M)$. En outre chaque cellule possède moins de n_n voisins.

L'étape 1 de l'algorithme nécessite $O(pN)$ opérations pour l'ensemble des cellules où, si l'on tronque les sommations sur n dans (2.4) ou (2.5) au rang t, $p = O(t)$ en 2D et $p = O(t^2)$ en $3D$ d'après (2.4).

L'étape 2 est calculée par $O(p^2(N/M)^2)$ opérations.

L'étape 3, enfin, nécessite $O(pN)$ opérations pour l'expansion du moment local et $O(n_n(N/M)M^2)$ pour le calcul direct avec les cellules voisines.

Si p est constant, le coût total de l'algorithme est alors de l'ordre de $O(N) + O((N/M)^2) + O(NM)$. Le choix optimum de $M = O(N^{1/3})$, nous permet d'obtenir

une complexité totale de l'algorithme en $O(N^{4/3})$ au lieu de $O(N^2)$ par la méthode traditionnelle.

PRINCIPE DE L'ALGORITHME MONO-NIVEAU

Etape 1 : Initialisation (pour toute cellule non vide C_y de centre $\underline{y}_0$) :

$$M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{n'}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y, \ \forall n'$$

Etape 2 : Transfert (pour toute cellule non vide C_x de centre $\underline{x}_0$) :

$$L_n(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \notin V(C_x)} \sum_{n'} O_{n+n'}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{n'}(C_y, \underline{y}_0), \ \forall n$$

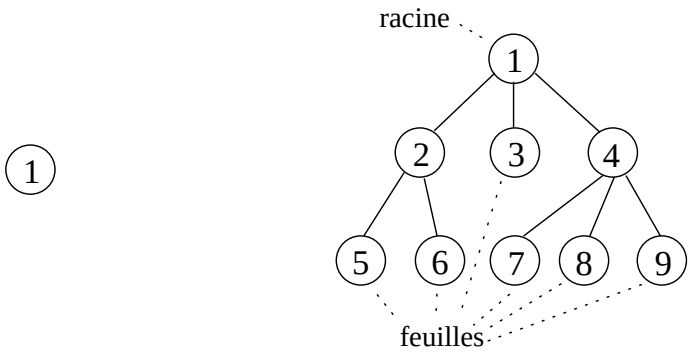
Etape 3 : Fin (pour toute cellule non vide C_x) :

$$\int_\Gamma G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y = \sum_n I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) L_n(C_x, \underline{x}_0) + \int_{S \cap V(C_x)} G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y, \ \underline{x} \in C_x$$

2.2.3 La méthode multi-niveau

La méthode multi-niveau est une amélioration de la méthode mono-niveau. En effet, plusieurs remarques se dégagent de la section précédente. La première est que la précision globale que l'on peut espérer au mieux pour calculer l'intégrale (2.18) est celle des cas les plus défavorables. Nous avons vu que la précision du calcul de la partie multipôle dépend, à nombre de termes fixé dans la sommation, du rapport r/r_0. Or ce rapport est plus favorable aux paquets éloignés, ainsi une grande partie des calculs sont faits à une précision « inutile » dans le sens où d'autres termes sont calculés à une précision moindre. Plusieurs alternatives ont été proposées dans la littérature pour répondre à ces attentes. La plus efficace, que nous présentons ici, est la méthode multi-niveau. Elle repose sur la possiblité d'un découpage récursif en cellules emboîtées et organisées dans une structure d'arbre, ce que nous allons préciser maintenant.

L'arbre La structure de données équivalente à la notion de fonction récursive est celle d'*arbre*. Elle sera donc naturellement utilisée ici. Un arbre est constitué soit d'un seul noeud (arbre atomique) soit d'un noeud et d'un ensemble de sous-arbres. Ce que l'on représente classiquement par le graphe :



arbre atomique arbre

Si une branche (ou arête) relie un noeud n_i à un noeud n_j situé un étage plus bas, on dira que n_i est le père de n_j (et n_j le fils de n_i). Le seul noeud n'ayant pas de père est la racine de l'arbre. Tous les noeuds n'ayant aucun fils sont appelés *feuilles*. On nomme niveau d'un noeud sa « génération » par rapport à la racine (la racine est de niveau 0, ses fils de niveau 1, etc...).

Chaque noeud sera pour nous associé à une cellule. Il y aura donc une correspondance entre la structure abstraite de l'arbre et le découpage géométrique en cellules.

Mais comment construit-on l'arbre ? On prend pour commencer une boîte cubique qui contient tout le maillage, cette cellule est la racine de l'arbre. On découpe cette cellule en huit cellules cubiques de côté moitié, chacune de ces cellules étant donc un fils de la racine. Puis on recommence la procédure pour chacune des cellules jusqu'à un critère d'arrêt, par exemple un nombre maximum, choisi à l'avance, de points de discrétisation contenus dans les cellules feuilles. On remarque qu'à un niveau donné toutes les cellules ont la même taille. Dans la littérature ce type d'arbre est appelé *oct-tree*, en raison du nombre maximum de 8 fils pour un noeud. A chaque niveau, on ne conserve dans l'arbre que les cellules non vides (c'est à dire contenant une portion du maillage).

On peut représenter schématiquement les différentes étapes de découpage sur un équivalent en deux dimensions (les cellules sont alors découpées en quatre et organisées dans un *quad-tree*).

On considère la frontière de notre domaine bidimensionnel (figure 2.3), que l'on enferme dans un carré, celui-ci correspond à la racine de l'arbre (figure 2.4). Puis l'on découpe ce premier en quatre carrés égaux, les fils de la racine (figure **??**). On continue le découpage récursivement, où seules les cellules contenant une partie de la frontière nous intéressent (figure 2.6). Enfin, on arrête la procédure quand est atteint un critère fixé d'avance par l'utilisateur, par exemple le diamètre caractéristique des cellules feuilles ou le nombre maximum de nœuds ou d'éléments qu'elles doivent contenir (figure 2.7).

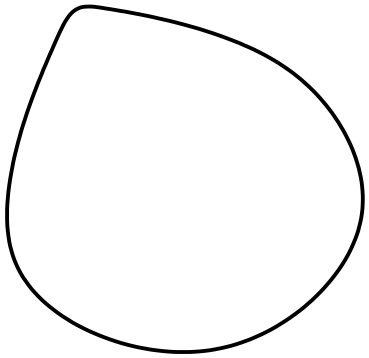


Figure 2.3: *Frontière du domaine.*

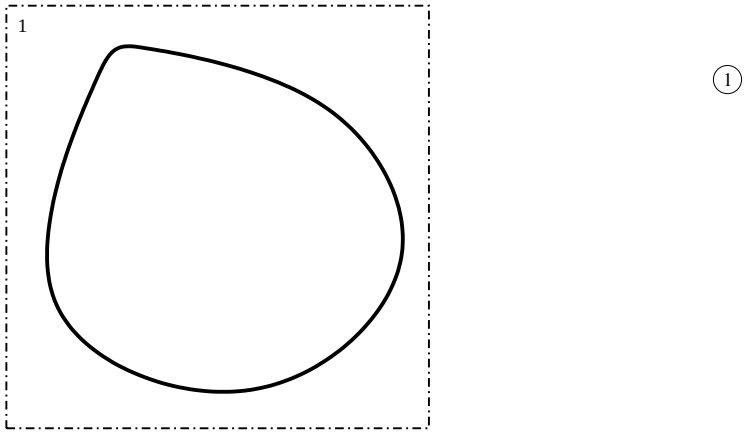


Figure 2.4: *Découpage au niveau* 0 *et racine de l'arbre.*

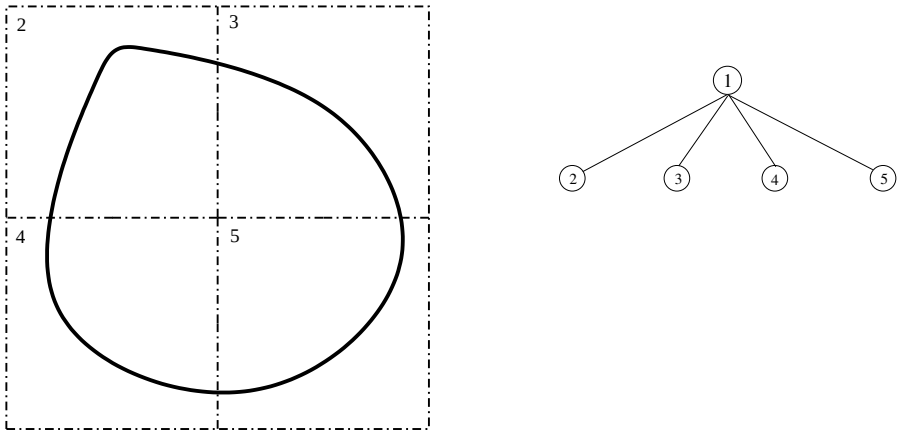


Figure 2.5: *Découpage au niveau* 1 *et arbre.*

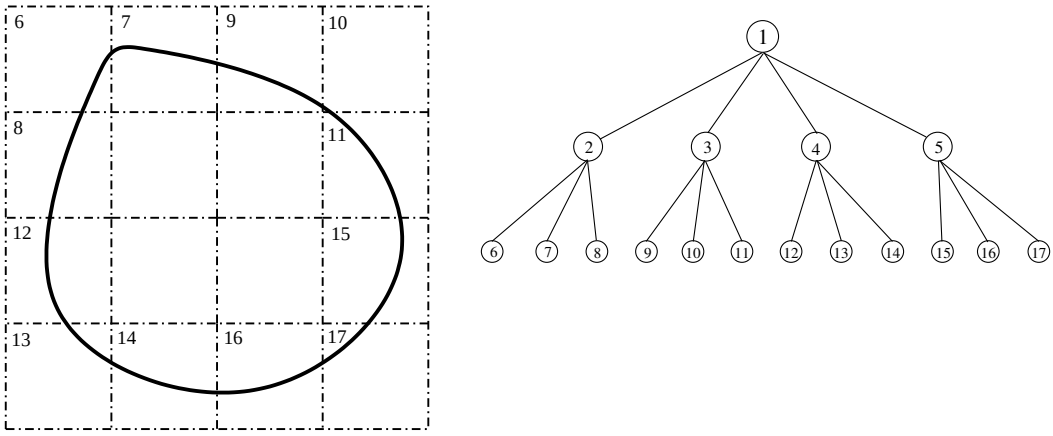


Figure 2.6: *Découpage au niveau* 2 *et arbre.*

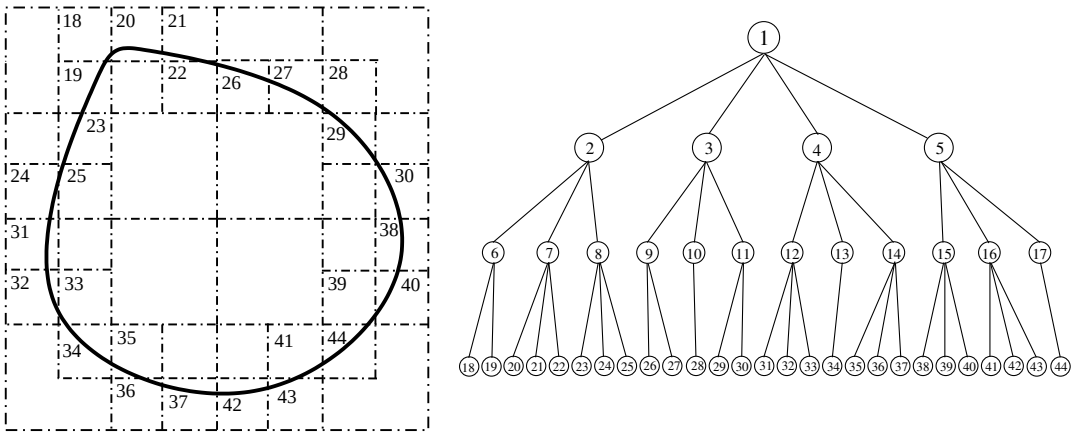


Figure 2.7: *Découpage au niveau* 3 *et arbre.*

Vocabulaire et notations L'algorithme multi-niveau est plus complexe que le mono-niveau. Sa description est facilitée par l'introduction d'un nouveau vocabulaire. Rappelons la notion de *voisin* d'une cellule que nous précisons dans le cadre multi-niveau :

Les cellules voisines d'une cellule C sont l'ensemble constitué de C et des cellules de même niveau adjacentes à C par un coin, une arête ou une face.

Comme précédemment, l'ensemble des cellules voisines de C sera noté $V(C)$.
Une nouvelle notion, cruciale, est celle de *banlieue* :

La banlieue d'une cellule C est l'ensemble des cellules de même niveau que C qui ne sont pas voisines de C mais dont les pères sont voisins du père de C

On notera $B(C)$ l'ensemble des cellules appartenant à la banlieue de C. Une représentation graphique rend cette notion plus facile à comprendre (voir figure 2.8).

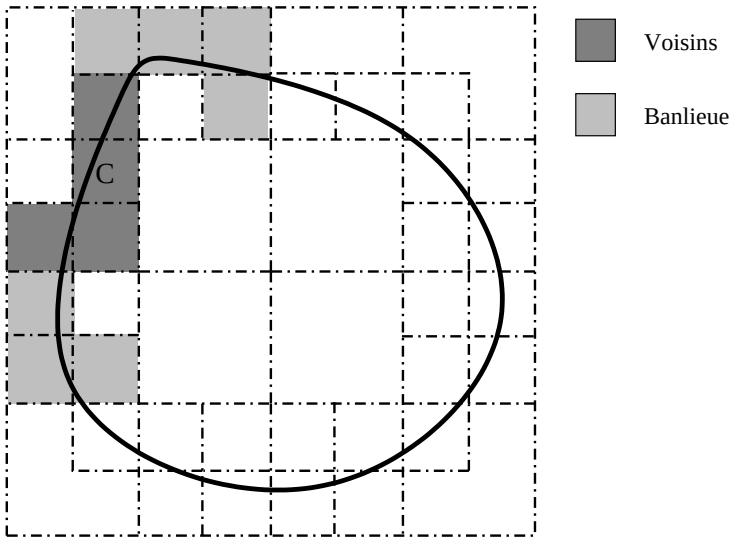


Figure 2.8: *Voisinage et banlieue d'une cellule C.*

On notera $\mathcal{F}$ l'ensemble des feuilles de l'arbre, L le nombre total de niveaux, $\mathcal{C}(\ell)$ l'ensemble des cellules de niveau ℓ et pour chaque cellule C : $P(C)$ son père et $F(C)$ l'ensembles de ses fils.

Algorithme multi-niveau Une fois la structure en cellules construite l'algorithme multi-niveau se décompose en quatre étapes :

1. Initialisation
2. Montée
3. Descente

4. Fin

1. Initialisation Cette phase est la même que pour son homologue de la méthode mono-niveau à cette différence près que les moments multipôles sont calculés uniquement pour les cellules feuilles.

Pour tout $C_y \in \mathcal{F}$

$$M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{n'}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y, \ \forall n' \tag{2.19}$$

2. Montée La deuxième étape de l'algorithme utilise la formule de changement d'origine (2.8) afin de calculer les moments multipôles associés à chaque cellule de l'arbre dont le niveau est supérieur ou égal à deux. Ce calcul se fait en considérant qu'une cellule de niveau ℓ est un paquet de cellules de niveau $\ell + 1$ (puisque toute cellule est incluse dans son père). La portion de maillage incluse dans une cellule C est donc aussi dans $P(C)$. Le moment multipôle associé à une cellule C (et défini par rapport au centre de C) est ainsi l'une des contributions au moment multipôle associé à $P(C)$. Ce dernier devant *in fine* être défini par rapport au centre de $P(C)$, la contribution de C à $P(C)$ doit être ramenée au centre de $P(C)$ à l'aide de la formule de changement d'origine. Nous appelerons cette phase la montée, selon l'usage dans la littérature sur la FMM.

Pour tout niveau ℓ de $L - 1$ à 2

Pour tout $C_y \in \mathcal{C}(\ell)$

$$M_n(C_y, \underline{y}_0) = \sum_{C \in F(C_y)} \sum_{n'} M_{n'}(C, \underline{y}_1) I_{n-n'}(\underline{y}_1 - \underline{y}_0), \ \forall n \tag{2.20}$$

où pour chaque cellule le moment multipôle est donné en son centre, noté $\underline{y}_0$ pour la cellule C_y et $\underline{y}_1$ pour ses fils.

Le changement de centre entre moments multipôles s'appelle aussi phase *multipole-to-multipole* (M2M).

3. Descente Cette étape est sans doute la plus délicate de l'algorithme. Le but est d'une part de transférer l'information à distance entre les cellules (étape de *transfert* de la méthode mono-niveau) et d'autre part de récupérer l'information du niveau immédiatement supérieur.

On commence cette étape par les cellules de niveau 2 et on procède ainsi : Le moment local de chaque cellule C sera la somme des moments multipôles des cellules de

$B(C)$ après transfert et du moment local de $P(C)$ après changement d'origine (appelé aussi *local-to-local* ou L2L en abrégé).

Pour tout niveau ℓ de 3 à L

Pour tout $C_x \in \mathcal{C}(\ell)$

$$L_n(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \in B(C_x)} \sum_{n'} O_{n+n'}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) + \sum_{n'} L_{n'}(P(C_x), \underline{x}_1) I_{n-n'}(\underline{x}_1 - \underline{x}_0), \ \forall n \tag{2.21}$$

où pour chaque cellule le moment local est donné en son centre, noté $\underline{x}_0$ pour la cellule C_x et $\underline{x}_1$ pour son père.

4. Fin Comme pour l'algorithme mono-niveau on finit l'évaluation par la méthode multipôle auquel on ajoute les termes d'interactions proches, mais cette opération est effectuée uniquement pour les cellules feuilles.

Pour tout $C_x \in \mathcal{F}$

$$\int_\Gamma G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y = \sum_n I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) L_n(C_x, \underline{x}_0) + \int_{S \cap V(C_x)} G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \ \underline{x} \in C_x \tag{2.22}$$

Complexité Pour calculer la complexité, comme pour la méthode mono-niveau, on découpe la frontière en N degrés de liberté répartis régulièrement (n_0 par unité de longueur) et on suppose que le nombre maximum de DDL dans une cellule feuille est M. Par ailleurs, on suppose que le nombre t de termes auquel les séries sont tronquées est indépendant du niveau. Cette hypothèse est correcte pour les calculs statiques (équation de Laplace par exemple) car la formule d'estimation de l'erreur commise par le développement multipôle ne fait pas dans ce cas intervenir d'échelle de longueur absolue (taille de cellule). Comme on le verra en section 2.3, cela cesse d'être vrai pour les calculs dynamiques. Cette difficulté supplémentaire sera prise en compte à partir de la prochaine section pour l'équation de Helmholtz.

Dans les hypothèses qui viennent d'être exposées le critère d'arrêt du découpage récursif s'appuie sur le nombre de DDL dans une cellule. On aurait pu tout aussi bien imposer une taille $R(L)$ aux cellules feuilles. Montrons que cela donne un résultat équivalent.

Soit D le diamètre du domaine et $R(\ell)$ la taille d'une cellule de niveau ℓ. L étant le nombre total de niveaux, $R(L)$ est la taille des cellules feuilles qui est choisie constante et indépendante de N et D.

La répartition des éléments du maillage étant supposée régulière le nombre d'éléments dans une cellule de niveau ℓ est, en $3D$, proportionnel à $(n_0 R(\ell))^2$. En particulier, on notera les relations vérifiées par le nombre total de DDL

$$N \propto (n_0 D)^2 \tag{2.23}$$

et par le nombre de DDL inclus dans une cellule feuille

$$M \propto (n_0 R(L))^2 \tag{2.24}$$

Ce qui prouve que choisir M ou $R(L)$ est équivalent.
Par ailleurs, le nombre de cellules non vides à un niveau ℓ donné peut être estimé proportionnel à $(D/R(\ell))^2$, ainsi le nombre de feuille est un $O(N/M)$. De plus, le nombre de niveaux L vérifie

$$2^L = \frac{D}{R(L)} \tag{2.25}$$

et est donc en $O(\log_2(N/M))$. Aussi, la taille des cellules doublant d'un niveau à l'autre en partant des feuilles et le nombre de cellules du niveau ℓ étant estimé à $(D/R(\ell))^2$, le niveau $\ell+1$ possède en moyenne 4 fois plus de cellules non vides que le niveau ℓ. Le nombre total de cellules non vides (sans compter les feuilles) est donc approché par

$$\frac{1}{4}\left(\sum_{i=0}^{\log_2(N/M)-1} \frac{1}{4^i}\right) O\left(\frac{N}{M}\right) \leq \frac{1}{3} O\left(\frac{N}{M}\right) = O\left(\frac{N}{M}\right) \tag{2.26}$$

On rappelle, par référence aux développements (2.5) et (2.4), que $p = O(t)$ en $2D$ et que $p = O(t^2)$ en $3D$. La complexité des différentes étapes est alors :

Initialisation : $O(pN)$

Montée : Pour chaque cellule on exécute au plus 8 fois (en moyenne 4 fois) l'opération de changement de centre : $O(p^2(N/M))$

Descente : Pour chaque cellule l'opération de transfert (M2L) coûte $O(p^2)$, celle de L2L $O(p^2)$ donc le coût total de l'opération est $O(p^2(N/M))$

Fin : L'évaluation finale en chaque point de collocation coûte $O(pN)$ à laquelle on ajoute le calcul des interactions proches $O((N/M)M^2) = O(NM)$

Donc, comme M et p sont indépendants de N, la complexité totale de l'algorithme est $O(N)$. Insistons ici encore que cette estimation repose sur l'hypothèse d'un paramètre de troncature t (ou p) indépendant du niveau.

PRINCIPE DE L'ALGORITHME MULTI-NIVEAU

Etape 1 : Initialisation

Pour tout $C_y \in \mathcal{F}$

$$M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{n'}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathbf{d}S_y, \ \ \forall n'$$

Etape 2 : Montée

Pour tout niveau ℓ de $L-1$ à 2

Pour tout $C_y \in \mathcal{C}(\ell)$

$$M_n(C_y, \underline{y}_0) = \sum_{C \in F(C_y)} \sum_{n'} M_{n'}(C, \underline{y}_1) I_{n-n'}(\underline{y}_1 - \underline{y}_0), \ \forall n$$

Etape 3 : Descente

Pour tout niveau ℓ de 3 à L

Pour tout $C_x \in \mathcal{C}(\ell)$

$$L_n(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \in B(C_x)} \sum_{n'} O_{n+n'}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{n'}(C_y, \underline{y}_0) + \sum_{n'} L_{n'}(P(C_x), \underline{x}_1) I_{n-n'}(\underline{x}_1 - \underline{x}_0), \ \forall n$$

Etape 4 : Fin

Pour tout $C_x \in \mathcal{F}$, pour tout $\underline{x} \in C_x$

$$\int_\Gamma G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathbf{d}S_y = \sum_n I_n(\underline{x}_0 - \underline{x}) L_n(C_x, \underline{x}_0) \ + \ \int_{S \cap V(C_x)} G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathbf{d}S_y$$

2.3 Equation de Helmholtz

Maintenant que la structure générique de l'algorithme multipôle a été présentée, nous allons étudier son application à l'équation de Helmholtz dans un domaine tridimensionnel, associée à beaucoup de modèles physiques de propagation d'ondes en régime fréquentiel, et en particulier à l'acoustique linéaire. Nous allons voir que l'on rencontre, par rapport aux modèles quasistatiques couverts par la présentation de la section 2, des difficultés supplémentaires, qui nous obligeront à introduire des compléments à l'algorithme multipôle « de base ».

La formule d'addition La fonction de Green de l'équation de Helmholtz pour un domaine tridimensionnel infini est, à un coefficient près, la fonction de Hankel sphérique de première espèce et d'ordre zéro :

$$G(\underline{y}-\underline{x}) = \frac{e^{\mathrm{i}k|\underline{y}-\underline{x}|}}{4\pi\left|\underline{y}-\underline{x}\right|} = \frac{\mathrm{i}k}{4\pi} h_0^{(1)}(k\left|\underline{y}-\underline{x}\right|)$$

Une formule d'addition découle alors d'une version du théorème d'addition de Gegenbauer [1] :

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\left|\underline{r}+\underline{r}_o\right|} = \frac{ik}{4\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n(2n+1)j_n(k\left|\underline{r}\right|)h_n^{(1)}(k\left|\underline{r}_o\right|)P_n(\cos(\underline{r},\underline{r}_o)) \tag{2.27}$$

où j_n est une fonction sphérique de Bessel de première espèce, $h_n^{(1)}$ est une fonction sphérique de Hankel de première espèce et P_n est un polynôme de Legendre. Cette formule peut encore s'écrire (en utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques, voir la section 5.2 du chapitre 3 où sont rappelées certaines propriétés de ces fonctions)

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\left|\underline{r}+\underline{r}_o\right|} = ik\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=-n}^{n}(-1)^n j_n(k\left|\underline{r}\right|)h_n^{(1)}(k\left|\underline{r}_o\right|)\overline{Y}_n^m(\underline{r})Y_n^m(\underline{r}_o) \tag{2.28}$$

où $\overline{a}$ désigne le complexe conjugué de a. Le développement (2.28) peut ainsi être mis sous la forme (2.4), c'est à dire

$$G(\underline{r}+\underline{r}') = \sum_n\sum_{m=-n}^{n} I_n^m(\underline{r})O_n^m(\underline{r}') \tag{2.29}$$

avec

$$I_n^m(\underline{r}) = j_n(k\left|r\right|)\overline{Y}_n^m(\underline{r}),$$

régulière à l'origine et

$$O_n^m(\underline{r}) = ik(-1)^n h_n^{(1)}(k\,|r|)Y_n^m(\underline{r}),$$

singulière en $r = 0$.

Mais avant de continuer dans cette voie, revenons sur une hypothèse faite dans la section précédente. Dans les calculs de complexité nous avons supposé que le nombre de termes p utilisés pour le calcul des séries était au choix de l'utilisateur et indépendant du niveau dans la méthode multi-niveaux. Pour l'équation de Laplace (ou celle de l'élasticité linéaire) la précision du développement multipôle ne dépend que du rapport entre la taille des cellules et la distance entre deux centres lors du transfert. Ces rapports étant, par construction, indépendants du niveau, il est donc légitime de choisir p indépendamment du niveau, la précision obtenue du développement multipôle étant la même à tous les niveaux et ne dépendant que du choix de p. En revanche, l'équation de Helmholtz contient une échelle de longueur fixe qui est la longueur d'onde. Ainsi pour assurer une précision choisie aux développement multipôles, le nombre de termes p dépendra du rapport entre la taille de la cellule et la longueur d'onde. Ainsi plus la cellule sera grande (en longueurs d'onde) plus le nombre de termes p nécessaire pour une précision donnée sera grand. Regardons l'influence de ce fait sur le calcul des complexités.

Une autre remarque, bien connue mais essentielle, est que la finesse de discrétisation devra être ajustée à la longueur d'onde, un ordre de grandeur usuel étant 10 inconnues ou plus par longueur d'onde.

Complexité de la méthode mono-niveau On suppose que le nombre d'éléments par longueur d'onde n_0 est constant. En l'absence d'estimateur d'erreur connu sous forme analytique pour le développement (2.27) la troncature t est choisie, selon les heuristiques proposées dans la littérature [29, 47], proportionnel au rapport entre la taille d'une cellule, notée R, et la longueur d'onde $t \propto kR = 2\pi R/\lambda$. Ainsi dans le cas tridimensionnel $t = O(\sqrt{M})$ d'où $p \propto k^2R^2 = O(M)$ (le nombre de degrés de liberté par cellule). En notant à nouveau N le nombre total de DDL, la complexité de l'algorithme mono-niveau pour l'équation de Helmholtz résulte des décomptes par étapes suivants :
L'étape 1 nécessite $O(pN)$ opérations soit une complexité totale d'ordre $O(NM)$
L'étape 2, qui était calculée en $O(p^2(N/M)^2)$ opérations coûte donc $O(M^2(N/M)^2) = O(N^2)$.
L'étape 3 est en $O(pN) + O(n_n(N/M)M^2) = O(NM)$, où n_n désigne le nombre de voisins d'une cellule.

En raison de l'étape 2, la complexité de l'algorithme est a priori de $O(N^2)$, donc identique à celle de la forme traditionnelle de la méthode des éléments de frontières.

L'algorithme mono-niveau semble alors inutile. Mais qu'en est-il de la méthode multi-niveaux ?

Complexité de la méthode multi-niveaux Sans rentrer dans tous les détails du calcul de complexité regardons juste le coût de l'étape de montée. Le nombre d'opérations nécessaires, pour la montée du niveau $\ell+1$ au niveau ℓ, est de l'ordre de :

$\forall C \in \mathcal{C}(\ell)$		$p(\ell)$ calculs		pour chacun de ses fils		$p(\ell+1)$ opérations
$\left(\frac{D}{R(\ell)}\right)^2$	$\times$	$k^2R^2(\ell)$	$\times$	4	$\times$	$k^2R^2(\ell)$

Soit un nombre d'opérations de l'ordre de $O(k^4D^2R^2(\ell))$ pour le niveau ℓ. En particulier, pour le niveau 2 où $R(2) = D/4$ ce nombre devient $O(k^4D^4) = O(N^2)$. Ainsi la complexité totale de l'algorithme est encore en $O(N^2)$.

Ainsi pour que la méthode multipôle rapide procure un avantage dans le cas dynamique, une alternative à la méthode dite « convolutionnelle », caractérisée par la forme (2.29) de la formule d'addition, est nécessaire. Celle que nous avons choisi d'utiliser, souvent appelée « forme diagonale », a été proposée par plusieurs auteurs [47, 62]. Nous garderons ce nom, car il est désormais d'usage, bien que la présentation, plus physique que mathématique, de la méthode que nous avons adoptée met moins nettement en évidence cette dénomination.

2.3.1 Une alternative pour l'équation de Helmholtz : la forme diagonale

Le point de départ est encore le théorème d'addition de Gegenbauer (2.27). Nous le complétons cette fois ci par une deuxième équation fondamentale, le développement en ondes planes du produit j_nP_n (où $\mathscr{S}$ désigne la sphère unité) :

$$j_n(k\,|\underline{r}|)P_n(\cos(\underline{r},\underline{r}_o)) = \frac{(-i)^n}{4\pi}\int_{\mathscr{S}} e^{ik\langle\underline{s},\underline{r}\rangle}P_n(\cos(\underline{s},\underline{r}_o))\mathrm{d}s \tag{2.30}$$

La formule (2.27) devient alors :

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\,|\underline{r}+\underline{r}_o|} = \frac{ik}{16\pi^2}\sum_{n=0}^{\infty} i^n(2n+1)h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}_o|)\int_{\mathscr{S}} e^{ik\langle\underline{s},\underline{r}\rangle}P_n(\cos(\underline{s},\underline{r}_o))\mathrm{d}s \tag{2.31}$$

Si on suppose que l'intégrale et la sommation peuvent être interverties, on obtient :

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\,|\underline{r}+\underline{r}_o|} = \frac{ik}{16\pi^2}\int_{\mathscr{S}} e^{ik\langle\underline{s},\underline{r}\rangle}\sum_{n=0}^{\infty} i^n(2n+1)h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}_o|)P_n(\cos(\underline{s},\underline{r}_o))\mathrm{d}s \tag{2.32}$$

Remarque Cette interversion n'est en fait pas correcte, car la série

$$\sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}_o|) P_n(\cos(\underline{s},\underline{r}_o)) \tag{2.33}$$

est divergente. En effet, le comportement asymptotique de $h_n^{(1)}$ pour n grand est (d'après [1]) :

$$h_n^{(1)} \sim \frac{\sqrt{2}(2n+1)^n}{z^{n+1} e^{n+\frac{1}{2}}} \tag{2.34}$$

Dans la pratique la série est tronquée, et l'inversion entre l'intégration et la sommation tronquée est légitime. Mais comme nous le verrons au chapitre 3 cette inversion nécessite un ajustement soigneux du niveau t de troncature.

Ainsi en posant :

$$O_{\underline{s}}(\underline{r}) = \frac{ik}{16\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}|) P_n(\cos(\underline{s},\underline{r})) \tag{2.35}$$

et

$$I_{\underline{s}}(\underline{r}) = e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}\rangle} \tag{2.36}$$

On retombe sur une équation qui ressemble à (2.5) :

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\,|\underline{r}+\underline{r}_o|} = \int_{\mathscr{S}} I_{\underline{s}}(\underline{r}) O_{\underline{s}}(\underline{r}_o)\,\mathrm{d}s \tag{2.37}$$

L'apparition du produit $I_{\underline{s}}(\underline{r})O_{\underline{s}}(\underline{r}_o)$ étant la justification de la dénomination « forme diagonale ».

De plus on peut remarquer dès à présent que le calcul numérique de l'intégrale sur la sphère unité sera en pratique effectué par une formule de quadrature à points $\mathbf{s}_q$ et poids w_q.

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\,|\underline{r}+\underline{r}_o|} = \sum_q w_q I_{\underline{s}_q}(\underline{r}) O_{\underline{s}_q}(\underline{r}_o) \tag{2.38}$$

Dans ce cadre la symétrisation de la formule (2.38) est plus simple, il suffit de considérer $\underline{y}-\underline{x} = \underline{r}+\underline{r}_0 = \underline{r}_1+\underline{r}_2+\underline{r}_0$ (figure 2.9) et comme

$$I_{\underline{s}}(\underline{r}) = e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}\rangle} = e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}_1+\underline{r}_2\rangle} = e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}_1\rangle} e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}_2\rangle} = I_{\underline{s}}(\underline{r}_1) I_{\underline{s}}(\underline{r}_2) \tag{2.39}$$

la formule finale symétrisée s'écrit

$$\frac{e^{ik|\underline{r}+\underline{r}_o|}}{4\pi\,|\underline{r}+\underline{r}_o|} = \sum_q w_q I_{\underline{s}_q}(\underline{r}_1) O_{\underline{s}_q}(\underline{r}_o) I_{\underline{s}_q}(\underline{r}_2) \tag{2.40}$$

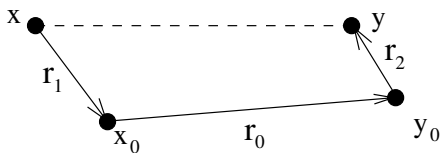


Figure 2.9: *Décomposition pour la formule symétrisée.*

Formules de changements d'origine On s'aperçoit en regardant l'algorithme que les seules formules de changement d'origine nécessaires sont celles associées aux relations entre moments multipôles et moments locaux (appelées M2L) auxquels s'ajoutent pour la version multi-niveaux les relations M2M et L2L. Regardons ce que deviennent ces transformations pour la forme diagonale du développement multipôle :

Moment multipôle

$$M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{\underline{s}}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \tag{2.41}$$

Ainsi en s'appuyant sur le calcul (2.39) le changement de centre du moment multipôle s'obtient par :

$$\begin{aligned} M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_1) &= \int_{S \cap C_y} I_{\underline{s}}(\underline{y} - \underline{y}_1) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \\ &= \int_{S \cap C_y} I_{\underline{s}}(\underline{y} - \underline{y}_0 + \underline{y}_0 - \underline{y}_1) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \\ &= \int_{S \cap C_y} I_{\underline{s}}(\underline{y} - \underline{y}_0) I_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{y}_1) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \\ &= M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) I_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{y}_1) \end{aligned} \tag{2.42}$$

Moment local On définit le moment local à partir du moment multipôle par l'étape de transfert (ou M2L) comme nous l'avons présenté dans la section 2.

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) \tag{2.43}$$

De là on peut déduire la formule de changement de centre pour le moment local (L2L) :

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_1) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_1 - \underline{x}_1) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_1)$$

Soit en posant $\underline{y}_1 = \underline{x}_1 - \underline{x}_0 + \underline{y}_0$

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_1) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{x}_1 - \underline{x}_0 + \underline{y}_0)$$

D'où en utilisant la formule de changement de centre du moment multipôle (2.42) puis (2.43),

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_1) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) I_{\underline{s}}(\underline{x}_0 - \underline{x}_1) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) = I_{\underline{s}}(\underline{x}_0 - \underline{x}_1) L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_0) \quad (2.44)$$

On a desormais en main tous les éléments dont on a besoin pour mettre en œuvre l'algorithme tel que nous l'avons décrit dans la section précédente. Reste un point à élucider, le problème du nombre de termes utilisés en pratique pour calculer les différentes quantités en fonction de la longueur d'onde.

De plus nous n'avons pas montré en quoi la forme diagonale réduit la complexité du calcul.

Vers le calcul pratique... Deux approximations vont être nécessaires pour l'évaluation numérique de notre calcul. La première va être de tronquer la série qui intervient dans O, la seconde va être la discrétisation sur la sphère unité induite par le calcul numérique de l'intégrale. Pour ces deux paramètres, la condition imposée par la longueur d'onde va s'appliquer (à savoir que le nombre de termes ou de points de discrétisations nécessaire va augmenter avec la taille des cellules).

On remarque de suite que pour la première approximation ceci n'entraine pas de modification de l'algorithme. En effet, ce calcul n'intervient qu'entre cellules de même niveaux lors de la phase de transfert (ou M2L) de l'algorithme, de plus les moments multipôles et locaux ne dépendent pas de ce paramètre. Nous avons déjà mentionné lors des calculs de complexité que $t(\ell) = O(kR(\ell))$ et nous détaillerons dans le chapitre 3 le nombre exact de termes retenus.

Il n'en n'est pas de même de la discrétisation de l'intégration sur la sphère unité. Les moments multipôles et locaux dépendent, comme l'indique les formules (2.41) et (2.43) du nombre de directions utilisées pour la décomposition en onde plane (égal au nombre de points de quadrature sur la sphère unité), donc du niveau. Or les phases de montée et de descente de l'algorithme comprennent des transferts de moments multipôles ou de moments locaux entre cellules de niveaux différents. On est donc obligé de « convertir » la valeur de ces moments sur des discrétisations différentes. Nous avons pour cela utilisé des méthodes d'« interpolation » et d'« extrapolation » sur la sphère unité initialement proposées par [29], que nous détaillerons au chapitre 3. Le résultat retenu, en notant

$S(\ell)$ le nombre de points de discrétisation sur la sphère unité au niveau ℓ, est que $S(\ell) = O(t(\ell)^2)$. Aussi nous sommes maintenant en mesure de présenter le nouvel algorithme adapté au calcul en dynamique avec ses nouvelles étapes d'extrapolation et d'interpolation, et d'en calculer la complexité.

Complexité de la méthode diagonale Comme pour tous les calculs de complexité, on suppose la frontière découpée en N degrés de liberté (leur nombre par longueur d'onde est choisi constant et noté n_0). Le critère d'arrêt est choisi tel que la taille $R(L)$ des cellules feuilles soit une portion β de la longueur d'onde λ.

On rappelle que nous avions évalué, pour un objet de diamètre D, le nombre de cellules de niveau ℓ proportionnel à $(D/R(\ell))^2$. Les longueurs ayant désormais pour référence la longueur d'onde λ le nombre de DDLs dans une cellule de niveau ℓ est de l'ordre de $(n_0 R(\ell)/\lambda)^2$. En particulier, pour une feuille ce nombre est $O((n_0 R(L)/\lambda)^2) = O((n_0\beta\lambda/\lambda)^2) = O(n_0^2\beta^2)$ donc indépendant de N et de λ. Ainsi le nombre de niveaux ne change pas et est toujours de l'ordre $O(\log_2(N))$.

Comme nous venons de l'indiquer, au niveau ℓ, le nombre de pôles utilisé est $t(\ell) = O(kR(\ell))$ et le nombre de directions retenues sur la sphère unité $S(\ell) = O(k^2R^2(\ell))$. Ceci nous permet d'évaluer la complexité de chaque étape :

Étape 1 :

Pour chaque feuille		pour chaque DDL de la feuille		$S(L)$ opérations
N	$\times$	$n_0^2\beta^2$	$\times$	$n_0^2\beta^2$

Soit $O(N)$ opérations pour l'étape d'initialisation.

Étape 2 :
A chaque niveau :

Pour chaque cellule du niveau ℓ		pour chaque fils		$S(\ell)$ opérations
$\left(\frac{D}{R(\ell)}\right)^2$	$\times$	4	$\times$	$k^2R^2(\ell)$

D'où pour chaque niveau $O(k^2D^2) = O(N)$ opérations. Ainsi ce coût, indépendant du niveau, entraine une complexité totale pour l'étape de montée en $O(N \log_2 N)$.

Il n'est pas difficile de se convaincre, à la vue de l'algorithme, que l'étape 3 à la même complexité que l'étape 2 et que l'étape 4, le nombre de voisins d'une cellule feuille étant majoré par 27, à la même complexité que l'étape 1.

Ainsi la complexité totale de l'algorithme est a priori de $O(N \log_2 N)$. Toutefois il manque dans cette évaluation le coût des étapes d'interpolation et d'extrapolation. Celui-ci sera étudié au chapitre 3 lorsque nous étudierons le détail de ces étapes et nous verrons qu'il est nécessaire de les traiter avec attention afin de ne pas affecter l'efficacité de la méthode multipôle rapide.

2.3.2 Le calcul complet

Comme nous l'avons vu lors de la présentation notre but est de résoudre l'équation intégrale (1.30). La résolution étant réalisée par une méthode itérative (nous avons choisi GMRES) un produit matrice-vecteur accéléré par la FMM est effectué à chaque itération. En complément de tous les développements donnés dans ce chapitre, nous noterons que

$$\begin{aligned} H(\underline{y}-\underline{x}) = \mathbf{grad}_y G(\underline{y}-\underline{x}).\underline{n}(\underline{y}) &= -\frac{e^{ikr}}{4\pi r^3}(1-ikr)(\underline{y}-\underline{x}).\underline{n}(\underline{y}) \\ &\approx ik\sum_q \omega_q e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{x}_0-\underline{x}\rangle} O_{\underline{s}_q}(\underline{y}_0-\underline{x}_0) e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{y}-\underline{y}_0\rangle} \underline{s}_q.\underline{n}(\underline{y}) \quad (2.45) \end{aligned}$$

où $r = |\underline{y}-\underline{x}|$.

La méthode multipôle rapide peut aussi être utilisée afin de calculer le produit matrice-vecteur nécessaire à l'évaluation de la pression à l'intérieur du domaine via la représentation intégrale (1.24). De même, le gradient de la pression, étant donné par la représentation intégrale :

$$\mathbf{grad}p(\underline{x}) = \int_{\partial\Omega} \mathbf{grad}_x G(\underline{y}-\underline{x})(\mathbf{grad}p(\underline{y}).\underline{n}(\underline{y})) - p(\underline{y})\mathbf{grad}_x H(\underline{x},\underline{y})\,\mathrm{d}S_y \;\forall \underline{x}\in\Omega \quad (2.46)$$

peut être calculé en utilisant la FMM, en remarquant que :

$$\begin{aligned} \mathbf{grad}_x G(\underline{y}-\underline{x}) &= -\frac{e^{ikr}}{4\pi r^3}(1-ikr)(\underline{x}-\underline{y}) \\ &\approx -ik\sum_q \omega_q e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{x}_0-\underline{x}\rangle} O_{\underline{s}_q}(\underline{y}_0-\underline{x}_0) e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{y}-\underline{y}_0\rangle} \underline{s}_q \quad (2.47) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{grad}_x H(\underline{y}-\underline{x}) &= \frac{e^{ikr}}{4\pi r^3}\left((\frac{3}{r^2}-\frac{3ik}{r}-k^2)(\underline{x}-\underline{y})\otimes(\underline{y}-\underline{x}).\underline{n}(\underline{y}) + (1-ikr)\underline{n}(\underline{y})\right) \\ &\approx k^2\sum_q \omega_q e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{x}_0-\underline{x}\rangle} O_{\underline{s}_q}(\underline{y}_0-\underline{x}_0) e^{ik\langle \underline{s}_q, \underline{y}-\underline{y}_0\rangle} \underline{s}_q\otimes\underline{s}_q.\underline{n}(\underline{y}) \quad (2.48) \end{aligned}$$

ALGORITHME MULTI-NIVEAU EN DYNAMIQUE

Etape 1 : Initialisation

Pour tout $C_y \in \mathcal{F}$

$$M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) = \int_{S \cap C_y} I_{\underline{s}}(\underline{y} - \underline{y}_0) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y, \ \forall \underline{s} \in \underline{S}_L$$

Etape 2 : Montée

Pour tout niveau ℓ de $L-1$ à 2

Pour tout $C \in \mathcal{C}(\ell)$

$$M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) = \sum_{C \in F(C_y)} M_{\underline{s}}(C, \underline{y}_1) I_{\underline{s}}(\underline{y}_1 - \underline{y}_0), \ \forall \underline{s} \in \underline{S}_{\ell+1}$$

puis EXTRAPOLATION de $\underline{S}_{\ell+1}$ à $\underline{S}_\ell$

Etape 3 : Descente

Pour tout niveau ℓ de 3 à L

Pour tout $C_x \in \mathcal{C}(\ell)$

Pour $C_y \in P(C_x)$ INTERPOLATION de $\underline{S}_{\ell-1}$ à $\underline{S}_\ell$

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) + I_{\underline{s}}(\underline{x}_1 - \underline{x}_0) L_{\underline{s}}(P(C_x), \underline{x}_1), \ \forall \underline{s} \in \underline{S}_\ell$$

Etape 4 : Fin

Pour tout $C_x \in \mathcal{F}$, pour tout $\underline{x} \in C_x$

$$\int_\Gamma G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y = \sum_q \omega_q I_{\underline{s}_q}(\underline{x}_0 - \underline{x}) L_{\underline{s}_q}(C_x, \underline{x}_0) + \int_{S \cap V(C_x)} G(\underline{y} - \underline{x}) p(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y$$

Chapitre 3

Méthode multipôle rapide : mise en œuvre et résultats numériques

3.1 Présentation

Dans ce chapitre nous allons présenter les aspects pratiques de la mise en œuvre de la *fast multipole method*. Nous y discutons les choix stratégiques qui nous ont paru les plus opportuns pour une programmation optimale de la méthode. A chaque fois qu'une illustration numérique se révelait nécessaire pour sous-tendre notre propos, nous avons utilisé un cas test dont la solution exacte est connue : la fonction de Green pour un domaine infini observée sur la surface d'une sphère (voir figure 3.1).

3.1.1 Le cas test

La source étant ponctuelle on connaît sa solution dans tout l'espace, c'est la solution de Green pour l'espace infini. On rappelle que la pression et son gradient vérifie :

$$p^{\text{ana}}(\underline{y}) = \frac{e^{ikr}}{4\pi r} \quad \text{et} \quad p^{\text{ana}}_{,i}(\underline{y}) = -\frac{r_{,i}}{4\pi r^2}(1-ikr)e^{ikr} \tag{3.1}$$

pour tout point $\underline{y}$ situé à la distance r de la source $\underline{z}$, où

$$r_{,i} = \frac{y_i - z_i}{r} \tag{3.2}$$

En particulier, cette solution est vérifiée sur toute la surface d'une sphère quelconque (et en fait d'un domaine quelconque ne contenant pas la source). On choisit donc une sphère S_{obs}, dite sphère d'observation, à l'intérieur de laquelle nous allons résoudre le problème aux limites suivant :

$$\begin{cases} (\Delta + k^2)p = 0 & \text{à l'intérieur de } S_{\text{obs}} \\ p_{,n} = p^{\text{ana}}_{,i} n_i & \text{sur } S_{\text{obs}} \end{cases} \tag{3.3}$$

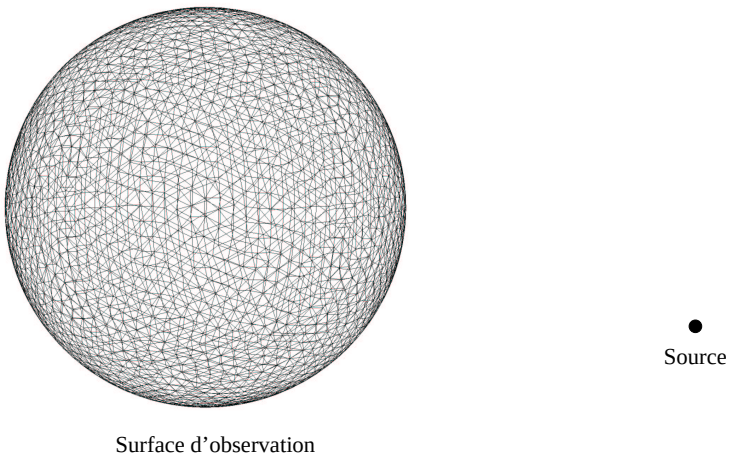


Figure 3.1: *Cas test pour la comparaison à une solution analytique.*

Ce problème est résolu par équations intégrales de frontière accélérée par la FMM. La pression p obtenue sur la frontière S_{obs} est ensuite comparée à la solution analytique p^{ana} donnée par (3.1), ce qui permet de valider le calcul numérique.

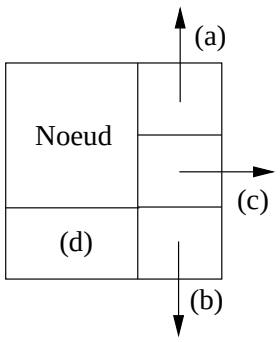
3.2 Les structures de données et l'algorithme

Dans le chapitre 2 nous avons décrit les principes de l'algorithme multipôle. Nous allons voir à présent comment, à partir d'une structure d'arbre effective, les différentes étapes de l'algorithme peuvent être programmées simplement.

3.2.1 Un arbre autour du nœud

Dans une approche orientée objet de la programmation, l'élément essentiel de la structure d'arbre est le nœud. Définissons cette classe telle que nous l'utiliserons :

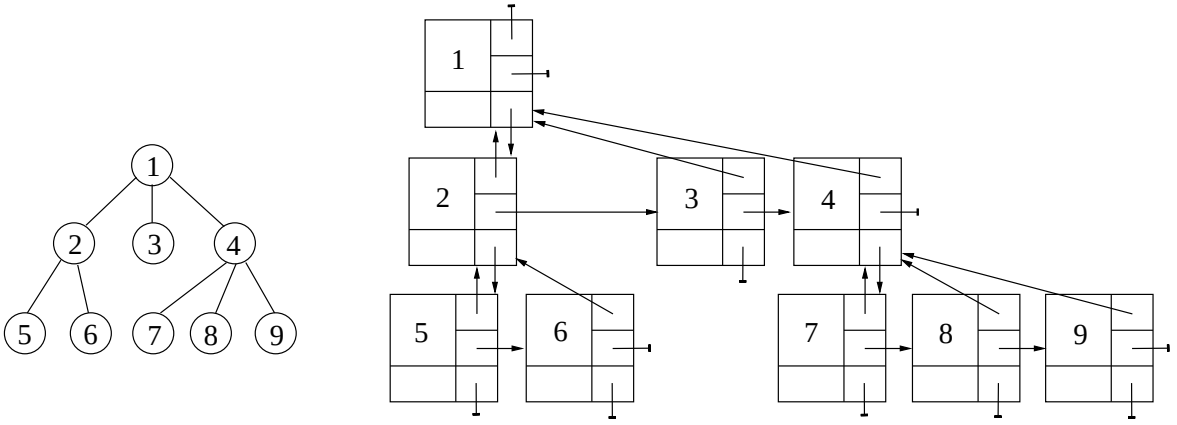
Le nœud :
1 pointeur vers père (a)
1 pointeur vers fils (b)
1 pointeur vers frère (c)
stockage de l'information utile (d)



Explications : un nœud connaît son père (sauf la racine, qui n'en a pas), un de ses fils (sauf si le nœud est une feuille) et éventuellement un de ses frères. De plus chaque nœud contient un certain nombre d'informations utiles pour le calcul, par exemple le numéro de la cellule à laquelle il correspond ou encore la position de son centre.

Et l'arbre alors ? Informatiquement, l'arbre est simplement représenté par un pointeur vers un nœud particulier : la racine.

Revenons à la représentation de l'arbre définie au chapitre précédent et comparons-la à celle qu'engendre une telle implémentation afin de comprendre les choix pratiques adoptés.



Nous avons opté pour une structure dynamique, au sens où les allocations de mémoire se font uniquement au moment où on en a besoin. En effet, chaque nœud est créé uniquement si la cellule correspondante doit être effectivement définie. Ce qui évite, entre autres, de devoir allouer des tableaux de tailles estimées a priori et élevées.

Discutons désormais les liens (pointeurs) entre les nœuds, et en particulier l'apparition du lien vers un nœud frère, qui n'a pas d'équivalent dans la structure de la partie théorique. En effet, on pourrait s'attendre à ce qu'un pointeur parte d'un noeud vers chacun des ses fils. Notons que ce lien vers un nœud frère ne change en rien l'esprit de la stucture d'arbre, mais est un artifice d'économie qui permet à chaque cellule de connaître l'ensemble de ces fils lors d'un *parcours* (opération fondamentale que l'on décrit dans la prochaine section) de l'arbre tout en en ignorant le nombre. La théorie prévoit que chaque nœud peut avoir jusqu'à huit fils. Le cas le plus pénalisant serait donc à prévoir dans la mise en œuvre (i.e. huit pointeurs vers ses fils pour chaque cellule). Or que remarque-t-on dans la pratique ? Il est rare qu'un nœud ait effectivement huit fils et c'est naturel vu qu'on enferme une surface dans des boîtes tridimensionelles. Ces surfaces, étant suffisamment régulières, ne remplissent pas tout le volume qu'elles délimitent, de sorte qu'un nœud ait en moyenne quatre fils (voir section 2.2). Aussi, en

n'imposant pas a priori le nombre de fils cette structure gagne en souplesse et en espace mémoire. Le lien fils-père étant quant à lui unique pour chaque cellule, sauf pour la racine (ce qui la caractérise), autant pointer directement vers la cellule utile pour les calculs, à savoir le père.

3.2.2 Construire l'arbre

La construction de l'arbre est l'une des premières étapes de l'algorithme multipôle. Elle suit de très près le découpage géométrique de l'espace en cellules que nous avons décrit dans le précédent chapitre. C'est dans l'arbre que sont stockées toutes les informations de ces opérations de découpage. Comme on vient de le voir cette procédure est dynamique : à chaque fois qu'une cellule utile (i.e. non vide) est construite, le nœud correspondant est ajouté à la structure.

Comme on l'a expliqué au chapitre précédent, la notion d'arbre est bien adaptée à la nature récursive des programmes. Ainsi, l'organisation des différentes étapes du calcul suit au plus près la structure d'arbre construite, ce qui se traduit par l'utilisation d'un algorithme clef : le *parcours* de l'arbre.

3.2.3 Parcourir un arbre

On appelle parcourir un arbre l'action qui consiste à passer par tous les nœuds de l'arbre et éventuellement y accomplir des actions. Nous avons nommé cette procédure récursive parcours (parcourir l'arbre consistera à appeler parcours(racine)). Elle peut s'écrire ainsi :

```
parcours(nœud)
   Action 1
   SI(nœud a un frère)
         appelle parcours(frère de nœud)
   SINON
         rien.(je suis le dernier fils)
   FIN SI
   SI(nœud a un fils)
         appelle parcours(fils de nœud)
   SINON
         Action 2. (je suis une feuille)
   FIN SI
   Action 3
FIN parcours
```

Ce type de parcours peut s'appliquer aussi bien à une descente qu'à une montée dans l'arbre tout dépend si on met l'accent sur l'Action 1 ou l'Action 3. En effet, lors d'une descente, dans chaque branche de l'arbre, les actions doivent s'effectuer de la racine vers les feuilles ; ce qui dans la procédure parcours est assuré pour l'Action 1 puisqu'elle est exécutée pour le père avant ses fils. De plus, « par effet de bord » une fois l'Action 3 effectuée l'exécution continue dans la cellule qui a appelé le nœud courant ce qui permet de remonter dans l'arbre car alors les actions sont effectuées des feuilles vers la racine.

Autrement dit, lors du parcours, on passe deux fois dans chaque nœud, sauf pour certaines feuilles : une fois pour une descente, une autre pour une montée.

L'initialisation... et la montée

Le premier parcours utilisé par l'algorithme est une montée, il a pour but de calculer le moment multipôle pour toutes les cellules en partant des feuilles (étapes 1 et 2 de l'algorithme). Ceci s'écrit simplement :

Action 1 = rien

Action 2 = Initialisation dans la cellule nœud

Action 3 = Transition du moment multipôle de la cellule nœud vers son père (si nœud n'est pas la racine).

On remarque que le cumul des deux étapes est possible car aucune action n'est effectuée dans une branche tant que l'on n'en a pas atteint les feuilles. Aussi, on reconnaît dans l'Action 2 l'étape 1 de l'algorithme et l'étape 2 dans l'Action 3.

La descente... et la fin

Le deuxième parcours est cette fois-ci une descente dans l'arbre. Il permet d'effectuer les actions des étapes 3 et 4 de l'algorithme.

Action 1 = Transfert de la banlieue de nœud vers nœud et transition du moment local du pere de noeud vers noeud (si je ne suis pas la racine)

Action 2 = Calcul de Fin dans la cellule nœud

Action 3 = rien.

Encore une fois on peut effectuer deux étapes de l'algorithme dans un seul parcours de l'arbre car arrivé aux feuilles toutes les contributions du moment local ont été calculées.

Dans cette section nous venons de montrer qu'à partir d'une structure de données adéquate les différentes étapes de l'algorithme multipôle peuvent être programmées simplement. Mais gardons à l'esprit que le but de cette méthode est de s'attaquer à des problèmes dont la taille et le temps de calcul nécessaires sont importants. Notre méthode se doit d'être la plus efficace possible. Alors peut-on mieux faire ?

3.3 Les listes de tâches

3.3.1 Principe

L'algorithme présenté à la section précédente, qui s'appuie fortement sur la structure d'arbre, est récursif. Or pour des problèmes de grande taille le nombre d'opérations élémentaires à effectuer devient vite très élevé. Par ailleurs, il est bien connu que même s'il est élégant un algorithme récursif est très gourmand notamment en place mémoire utilisée. En effet, des sous-programmes s'appellent à la suite, ce qui occupe la mémoire et les ressources en calcul de l'ordinateur. Le but de cette section est de construire une alternative à la programmation initiale afin de gagner en efficacité aussi bien en temps de calcul qu'en place mémoire.

L'idée maîtresse est de découpler la phase algorithmique récursive et les opérations de calcul proprement dites. Ceci va se faire à l'aide de ce qu'on appelera les *listes de tâches*.

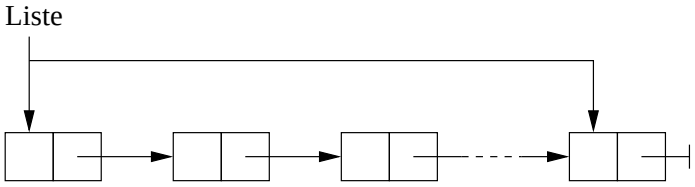
Le principe, assez simple, consiste à exécuter l'algorithme initial, mais au lieu d'effectuer les opérations de calcul au moment où elles apparaissent naturellement, on les programme dans une liste ordonnée, dite « liste de tâches », afin de pouvoir les exécuter plus tard. Cette approche, a priori coûteuse puisqu'il faut stocker les listes d'opérations à effectuer, a en fait plusieurs avantages.

Le premier se situe d'un point de vue purement algorithmique. En effet, une fois les listes construites l'exécution de la procédure multipôle consiste seulement à parcourir des listes d'opérations, ce qui réduit la procédure à une simple boucle. De plus, la construction des listes étant indépendante de la formule d'addition utilisée par la suite, cela permet de programmer un algorithme multipôle générique utilisable pour tous les types de problèmes.

Le deuxième avantage de cette méthode est la réorganisation des opérations. En effet, les listes obtenues par la montée et la descente telles qu'elles sont décrites précédemment sont ordonnées. Aussi, il n'est pas possible d'effectuer les opérations de calculs dans n'importe quel ordre sous peine de perdre la cohérence des résultats. Pour prendre un exemple concret, le moment multipôle d'une cellule ne peut être calculé qu'après celui de chacun de ses fils. Mais un ordre compatible avec la justesse des calculs n'est pas unique, et comme on le verra l'ordre qui résulte du parcours récursif n'est pas le plus efficace tant du point de vue de l'espace mémoire utilisé que du temps de calcul.

3.3.2 Les listes

Les listes sont des structures de données « unidimensionnelles » et ordonnées. On peut les voir comme un arbre dont chaque nœud n'aurait qu'un seul fils et que l'on ne pourrait parcourir que dans un seul sens. Du fait qu'une liste soit ordonnée, on a tout à gagner à la programmer dynamiquement (comme la structure d'arbre que l'on vient d'examiner). En effet, l'espace mémoire utilisé correspond alors exactement aux besoins et le parcours nécessairement séquentiel des données est déjà imposé par l'utilisation. Une liste dynamique peut être représentée par le schéma suivant :



où chaque maillon pointe vers le suivant, la liste ne repérant que le premier et le dernier maillon. Le parcours de la liste, qui comme pour l'arbre consiste à parcourir tous les maillons, est ici évident.

3.3.3 Un algorithme général

Afin de construire l'algorithme indépendant de la formule d'addition utilisée, on doit disposer de listes de tâches. Plus précisément, on a besoin d'une liste des initialisations et d'une liste de fin et pour chaque niveau d'une liste des montées, d'une liste des descentes et d'une liste des transferts. Reprenons rapidement l'algorithme présenté à la section précédente et regardons les modifications, mineures, à lui apporter afin de construire les listes de tâches.

la montée

Action 1 = rien

Action 2 = Ajout d'une tâche dans la liste des initialisations (numéro de la cellule nœud)

Action 3 = Ajout d'une tâche dans la liste des montées du niveau de nœud (numéro de la cellule nœud et celui de son père) (si nœud n'est pas la racine).

la descente

Action 1 = Ajout d'une tâche dans la liste des transferts du niveau de nœud pour chaque cellule de la banlieue de nœud (numéro de la cellule nœud et celui de la cellule banlieue) et ajout d'une tâche dans la liste des descentes du niveau de nœud (numéro de la cellule nœud et celui de son père)(si je ne suis pas la racine)

Action 2 = Ajout d'une tâche dans la liste de Fin (numéro de la cellule nœud)

Action 3 = rien.

3.3.4 Une réorganisation du calcul

Lors de la présentation de la méthode multipôle rapide certains auteurs [29, 65] argumentent sur la réorganisation des opérations afin de minimiser l'espace mémoire utilisé. En effet, lors du calcul, l'espace mémoire est essentiellement occupé par les moments multipôles et les moments locaux, et une mise en œuvre « naïve » nécessite le stockage de tous ces moments. L'idée alors exposée consiste à éliminer le plus rapidement possible les moments dont on n'a plus besoin.

L'ordre des calculs tel qu'il apparaît dans les algorithmes récursifs de parcours ne permet pas de libérer cette mémoire. En effet, le parcours s'effectue de branche en branche et rien dans la structure de l'arbre ne prend en compte la proximité des cellules. Pour être plus précis, lors du parcours de descente, jusqu'au parcours de la dernière branche tous les moments multipôles des autres branches peuvent s'avérer nécessaires et doivent donc être conservés en mémoire ; dans le même temps les moments locaux sont calculés et ce pour tous les niveaux. Lors de ce parcours tous les moments sont donc conservés en mémoire.

En revanche l'algorithme générique accompagné des listes de tâches restructure naturellement l'ordre des opérations. En effet, les listes de tâches trient les opérations élémentaires par type (initialisation, montée ...) et par niveau. On peut donc s'assurer d'effectuer les opérations dans un ordre plus structuré. Mieux, quel que soit l'ordre (s'il est compatible avec la justesse des calculs) dans lequel on parcourt les listes les unes après les autres la place mémoire nécessaire est minimale. La réorganisation optimale des calculs est donc liée aux listes, on économise ainsi 40% de l'espace mémoire utilisé par rapport à la méthode récursive. Nous n'avons pas ici à fournir d'effort supplémentaire, la seule obligation à remplir est donc de parcourir les listes dans un ordre juste. On propose par exemple l'ordre défini ci-après.

On doit commencer par calculer le moment multipôle de chaque feuille de l'arbre. La première liste parcourue est donc celle des initialisations.

Ensuite, selon l'ordre naturel que nous avons présenté jusqu'ici, nous allons calculer

le moment multipôle pour toutes les cellules non-feuilles de l'arbre et donc parcourir les listes des montées pour chaque niveau en partant du niveau le plus profond, celui des feuilles.

Puis, on transforme tous ces moments multipôles en moments locaux par l'étape des transferts. On parcourt donc toutes les listes de transferts, l'ordre n'ayant pas d'importance. C'est lors de cette étape que l'économie de mémoire peut être effectuée, en effet les moments multipôles d'un niveau deviennent inutiles après avoir fini les transferts du même niveau. L'espace mémoire utilisé par les moments multipôles d'un niveau est donc à présent utilisé par les moments locaux correspondants. Une fois cette étape effectuée, nous avons calculé, pour toute cellule C, les contributions au moment local des cellules de même niveau que C.

Restent à calculer les contributions les plus lointaines pour chaque cellule, c'est à dire celles qui proviennent des niveaux de son père et de ses ancêtres. Le parcours des listes des descentes, pour tous les niveaux en commençant au niveau des petits-fils de la racine, permet d'effectuer ces calculs.

Enfin, on termine le calcul par la « redistribution » des moments locaux vers les points de collocation et par le calcul des interactions proches. Cette étape est assurée en parcourant la liste de fin.

L'étape des transferts qui a été séparée, dans notre proposition, de l'étape de montée et de l'étape de descente, pourrait se trouver imbriquée aussi bien dans l'une que dans l'autre. Mais il n'y a rien à gagner en agissant ainsi, car le gain en espace mémoire est dû uniquement au fait que l'on puisse remplacer des moments multipôles par des moments locaux dans la mémoire. Cette possibilité est offerte dès que l'on effectue les opérations par niveau, ce qui arrive dans les trois cas. Celui que nous avons choisi à l'avantage de paraître plus systématique (nous parcourons chaque type de liste l'un après l'autre).

Si, comme on vient de le voir, l'ordre dans lequel on parcourt l'ensemble des listes a peu d'influence sur l'efficacité du calcul en revanche l'ordre à l'intérieur des listes des transferts peut avoir une importance non négligeable.

3.3.5 Le tri de la liste des transferts

Regardons quelques temps de calcul de l'étape de transfert sur l'exemple suivant où on fait le calcul d'un produit matrice vecteur sur le maillage d'une sphère dont on exprime la taille en fonction de la longueur d'onde (λ).

Rayon (en λ)	Transfert (en s)	Total (en s)	Pourcentage transfert
1	4.1	5.1	80.2
2	21.1	23.7	89.1
3	43.6	52.6	82.9
4	98.3	109.2	90.0
5	153.9	176.0	87.4
6	194.0	231.6	83.8

On remarque sur ces calculs que l'étape de transfert est la plus chère, et de loin, de toutes. C'est celle sur laquelle nous allons concentrer nos efforts. Une première amélioration va consister à trier la liste de tâches des transferts. Pourquoi cette opération est-elle intéressante ? Revenons sur le calcul des opérations de transfert :

$$L_{\underline{s}}(C_x, \underline{x}_0) = \sum_{C_y \in B(C_x)} O_{\underline{s}}(\underline{y}_0 - \underline{x}_0) M_{\underline{s}}(C_y, \underline{y}_0) \tag{3.4}$$

avec

$$O_{\underline{s}}(\underline{r}) = \frac{ik}{16\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}|) P_n(\cos(\underline{s}, \underline{r})) \tag{3.5}$$

Après discrétisation sur la sphère unité, les valeurs de O peuvent être organisées dans une matrice, la *matrice des transferts*. La matrice calculée pour le transfert entre les cellules C_x et C_y ne dépend que du vecteur $\underline{y}_0 - \underline{x}_0$. Or les positions et les tailles des cellules assurent qu'à chaque niveau le nombre de tels vecteurs possibles est limité. Ainsi le nombre de matrices différentes nécessaire à chaque niveau est bien inférieur au nombre de transferts effectivement calculés. Par ailleurs, si l'on compare le temps de calcul de la matrice au temps de calcul du transfert on remarque que cette opération est la plus coûteuse. Le but du tri va donc être de grouper les calculs par vecteur $\underline{y}_0 - \underline{x}_0$ afin d'économiser le nombre de calculs de matrices des transferts.

Après mise en œuvre du tri de la liste de transferts comparons les nouveaux temps de calculs aux anciens :

Rayon (en λ)	Transfert (en s)	Total (en s)	Pourcentage transfert	Tri (en s)
1	0.4	1.1	36.6	0.8
2	2.1	4.7	45.8	4.4
3	6.6	15.5	43.0	5.4
4	9.2	19.8	46.3	20.5
5	8.8	30.7	28.6	21.8
6	24.6	61.8	39.9	23.0

On s'aperçoit sur cet exemple que même en tenant compte du temps de tri le gain en temps de calcul pour un produit matrice vecteur est assez important. Dans l'utilisation que nous allons faire de la méthode ce gain est encore plus important. En effet, la construction de la liste des transferts et son tri sont effectués une seule fois, alors que l'opération de transfert est appelée n_{iter} fois lors de la procédure itérative. Ainsi le temps de tri devient négligeable devant le temps total de l'exécution.

Nous venons d'expliciter l'algorithme multipôle tel qu'il peut être organisé dans une implémentation pratique. Et nous avons vu qu'il est avantageux de séparer l'algorithme récursif du calcul proprement dit, la récursivité intervenant dans la phase préparatoire de la détermination des listes de tâches. Cependant, les phases de calcul présentent des difficultés spécifiques, que nous allons examiner et essayer de résoudre le plus efficacement possible.

3.4 Interpolation et extrapolation

Comme on a pu le remarquer dans le chapitre précédent il est nécessaire qu'à chaque niveau de l'algorithme le nombre de pôles (i.e. le nombre de points de discrétisation sur la sphère unité dans notre formulation) des moments multipôles et locaux se fassent sur un ensemble de points de discrétisations différent.

Ainsi deux nouvelles étapes sont apparues dans l'algorithme : l'interpolation et l'extrapolation. Ces étapes doivent être traitées avec soin, car comme on le verra l'approche « naïve » conduirait à augmenter la complexité totale de l'algorithme jusqu'à $O(N^2)$, et donc à ne rien gagner par rapport à l'approche « traditionnelle ».

L'approche que nous présentons suit les développements de Darve [29] et Sylvand [65].

3.4.1 Notion de largeur de bande

Soit f une fonction définie sur la sphère unité $\mathscr{S}$ et notons $\underline{s} = (\theta, \phi)$ un point de $\mathscr{S}$, (θ, ϕ) étant les coordonnées sphériques angulaires. On considère les fonctions du type :

$$f(\theta, \phi) = \sum_{n=0}^{t} \sum_{m=-n}^{n} f_{nm} Y_n^m(\theta, \phi) \tag{3.6}$$

dites « à bande limitée de degré t ». Or, au niveau ℓ, la série $O_{\underline{s}}(\underline{r}_0)$ est tronquée à $t(\ell)$ termes et s'écrit

$$O_{\underline{s}}(\underline{r}_0) = \frac{ik}{16\pi^2} \sum_{n=0}^{t(\ell)} i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}_0|) P_n(\cos(\underline{s}, \underline{r}_0)) \tag{3.7}$$

ou encore, en utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques (3.54) :

$$O_{\underline{s}}(\underline{r}_0) = \sum_{n=0}^{t(\ell)} \sum_{m=-n}^{n} \left[\frac{i^{n+1}k}{4\pi} h_n^{(1)}(k\,|\underline{r}_0|) Y_n^m(\underline{r}_0/|\underline{r}_0|) \right] \overline{Y}_n^m(\underline{s}) \tag{3.8}$$

c'est donc une fonction de largeur de bande $t(\ell)$. Par ailleurs, la fonction $I_{\underline{s}}(\underline{r}) = e^{ik\langle \underline{s},\underline{r}\rangle}$ admet le développement en série

$$I_{\underline{s}}(\underline{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n^{(1)}(k\,|\underline{r}|) P_n(\cos(\underline{s},\underline{r})) \tag{3.9}$$

Une approche empirique due à [28] montre qu'il suffit de garder les $t(\ell)$ premiers termes de cette série afin de conserver la précision de l'algorithme. $I_{\underline{s}}(\underline{r})$ est donc aussi à bande limitée de degré $t(\ell)$ et l'évaluation de la fonction de Green par la formule (2.37) nécessite, au niveau ℓ, l'intégration exacte sur la sphère unité des fonctions à bande limitée de degré $2t(\ell)$.

3.4.2 Discrétisation de la sphère unité

Considérons le cas générique de l'intégration des fonctions de largeur de bande $2t$. Il faut donc déterminer les ensembles de points $(\underline{s}_k)_{1<k<K}$ de la sphère unité $\mathscr{S}$ et des poids associés $(\omega_k)_{1<k<K}$, dont la taille K est minimale pour des raisons évidentes d'efficacité, vérifiant :

$$\sum_{1<k<K} \omega_k Y_n^m(\underline{s}_k) = \int_{\underline{s}\in\mathscr{S}} Y_n^m(\underline{s})\, ds, \quad \text{pour } |m| \le n \text{ et } n \le 2t \tag{3.10}$$

Sachant que $Y_0^0 = \sqrt{4\pi}$, (3.10) doit donner

$$\sum_{1<k<K} \omega_k = 4\pi \qquad si\,(m,n) = (0,0) \tag{3.11}$$

De plus, l'orthogonalité entre Y_0^0 (constant) et les autres Y_n^m, exprimée à l'aide de (3.10), montre que les points $\underline{s}_k$ et poids ω_k doivent vérifier

$$\sum_{1<k<K} \omega_k Y_n^m(\underline{s}_k) = 0 \qquad si\,(m,n) \neq (0,0) \tag{3.12}$$

En mettant chaque point de la sphère unité sous la forme $\underline{s}_k = (\theta_i, \phi_j)$ et les poids associés sous la forme $\omega_k = \omega_i^\theta \omega_j^\phi$, la deuxième équation (3.12) s'écrit :

$$\begin{aligned} \sum_{1<k<K} \omega_k Y_n^m(\underline{s}_k) &= \sum_{i,j} \omega_i^\theta \omega_j^\phi P_n^m(\cos\theta_i) e^{im\phi_j} \\ &= \left(\sum_i \omega_i^\theta P_n^m(\cos\theta_i) \right) \left(\sum_j \omega_j^\phi e^{im\phi_j} \right) = 0 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Le deuxième facteur ne dépendant que de m il est plus facile de commencer par essayer de l'annuler. Ceci n'est possible que pour $m \neq 0$, le choix des poids de somme nulle étant interdit par (3.11). De plus, sachant que m prend ses valeurs entre $-2t$ et $2t$, le choix de la discrétisation régulière à $2t+1$ points et de poids constants :

$$\begin{cases} \phi_j = \frac{2\pi j}{2t+1} & 0 < j < 2t, \\ \omega_j^\phi = \frac{2\pi}{2t+1} \end{cases} \tag{3.14}$$

nous assure la nullité du facteur pour $m \neq 0$. Pour $m = 0$ on a $\sum_j \omega_j^\phi = 2\pi$.

Reste à annuler le premier facteur dans le cas où $m = 0$ et $n \neq 0$ (dans le cas où $n = 0$ ce facteur devra valoir 2 afin de satisfaire (3.11)). La discrétisation la plus simple que l'on puisse imaginer pour intégrer les polynômes en θ de degré inférieur ou égal à $2t$ est celle qui consiste à prendre une répartition régulière de $2t+1$ points sur $]0, \pi[$:

$$\theta_i = \frac{\pi(i+1/2)}{2t+1} \quad 0 < i < 2t \tag{3.15}$$

car on veut éviter les pôles $\theta = 0$ et $\theta = \pi$. Les poids ω_i^θ peuvent alors être déterminés à partir du critère d'intégration exacte.

Cette solution à $2t+1$ points n'est pas optimale. En effet, il est bien connu que l'intégration exacte de tout polynôme en $\cos\theta$ de degré inférieur à $2t+1$ est réalisée au moyen de la formule de quadrature de Gauss-Legendre à $t+1$ abscisses $\cos\theta_i$.

La méthode que nous avons utilisée pour déterminer les $(\theta_i, \omega_i^\theta)$ (décrite dans [67]) se résume à calculer les vecteurs propres V_i et les valeurs propres associées λ_i de la matrice tridiagonale T de $(t+1) \times (t+1)$ définie par :

$$\begin{cases} T_{i,i} = 0 & 1 < i < p+1, \\ T_{i,i+1} = T_{i+1,i} = \frac{i}{\sqrt{4i^2-1}} & 1 < i < p+1 \end{cases} \tag{3.16}$$

Les points de quadrature s'en déduisent alors par :

$$\begin{cases} \cos(\theta_i) = \lambda_i \\ \omega_i^\theta = 2V_{i1}^2 \end{cases} \tag{3.17}$$

où V_{i1} désigne la première composante du vecteur V_i.

D'autres quadratures possibles sont décrites dans la littérature. Elles peuvent améliorer sensiblement le nombre de points nécessaires. Cependant, la grille n'est alors pas uniforme en ϕ ce qui empêche l'utilisation de la transformée de Fourier discrète que nous allons présenter dans le prochain paragraphe, et ainsi ne permet pas l'utilisation de la technique proposée d'accélération du calcul de (3.19).

3.4.3 Schéma d'interpolation

Soit f une fonction à bande limitée de degré t. On note $\underline{s}_k, 1 \leq k \leq K$ et $\underline{s}_{k'}, 1 \leq k' \leq K'$ des points de discrétisations sur S et w_k, $w'_{k'}$ les poids associés à ces points permettant une intégration exacte de toutes les harmoniques sphériques de degré inférieur ou égal à $2t$ et $2t'$, respectivement. Comme nous venons de le voir $K = O(t^2)$ et $K' = O(t'^2)$ pour la discrétisation sur la sphère unité retenu. On note f_k et $f_{k'}$, les valeurs $f(\underline{s}_k)$ et $f(\underline{s}_{k'})$ de la fonction f en ces points. On suppose de plus que t' est proportionnel à t, ce qui convient à nos besoins, $t' = t/2$ pour l'interpolation ($t' = 2t$ pour l'extrapolation).
Le schéma d'interpolation consiste alors à effectuer la transformation linéaire suivante :

$$f_{k'} = \sum_{n=0}^{t} \sum_{m=-n}^{n} Y_n^m(\underline{s}_{k'}) \sum_k \overline{Y}_n^m(\underline{s}_k) w_k f_k, \text{ pour tout } k' \tag{3.18}$$

Cette relation peut être mise sous la forme d'un produit matrice-vecteur :

$$f_{k'} = \sum_k A_{k'k} f_k \tag{3.19}$$

en définissant la matrice A, de taille $K' \times K$, par :

$$A_{k'k} = \sum_{n=0}^{t} \sum_{m=-n}^{n} Y_n^m(\underline{s}_{k'}) \overline{Y}_n^m(\underline{s}_k) w_k \tag{3.20}$$

Cette approche nécessite $O(t^6)$ opérations pour construire la matrice A et $O(t^4)$ opérations pour le produit matrice vecteur. Ainsi à chaque niveau ℓ le coût est $O(k^6 R^6(\ell)) + O(k^4 R^4(\ell)) \times O(D^2/R^2(\ell))$. Pour le niveau 2, où $R(2) = O(D)$, on aurait $O(k^6 D^6) = O(N^3)$. Effectuer ce produit matrice-vecteur tel quel conduirait alors à une complexité totale de l'algorithme multipôle en $O(N^3)$, ce qui est clairement inacceptable. C'est pourquoi plusieurs alternatives ont été proposées dans la littérature.

Approcher A par une matrice creuse. En regardant les valeurs des termes de la matrice il parait évident que le rôle de certains est prépondérant. L'idée de la méthode est alors de réduire le nombre de coefficients non nuls, en mettant à zéro tous ceux inférieur à un seuil choisi à l'avance. Cette méthode, notamment étudiée par Darve [29], semble efficace seulement pour des problèmes de taille très importante. Elle a de plus l'inconvénient d'introduire une nouvelle approximation. Nous n'avons ainsi pas retenu cette méthode, lui préférant ce que certains appellent la matrice condensée.

Accélerer le calcul des $f_{k'}$. Une autre possibilité est donc de faire un calcul exact, mais réorganisé de telle façon à ce que le coût soit moindre. Ce calcul s'appuie sur l'écriture des harmoniques sphériques :

$$Y_n^m(\theta,\phi) = C_{n,m} P_n^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{3.21}$$

avec

$$C_{n,m} = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \tag{3.22}$$

qui entraîne que (3.18) se met sous la forme :

$$f_{k'} = \sum_{n=0}^{t}\sum_{m=-n}^{n} C_{n,m} P_n^m(\cos\theta'_{k'}) e^{im\phi'_{k'}} \sum_k C_{n,m} P_n^m(\cos\theta_k) e^{-im\phi_k} w_k f_k \tag{3.23}$$

ou encore

$$\begin{aligned} f_{i'j'} &= \sum_{n=0}^{t}\sum_{m=-n}^{n} C_{n,m} P_n^m(\cos\theta'_{i'}) e^{im\phi'_{j'}} \sum_{i,j} C_{n,m} P_n^m(\cos\theta_i) e^{-im\phi_j} w_{ij} f_{ij} \\ &= \sum_{-t\le m\le t} e^{im\phi'_{j'}} \\ &\quad \left[\sum_i \sum_{|m|\le n\le t} C_{n,m} P_n^m(\cos\theta'_{i'}) C_{n,m} P_n^m(\cos\theta_i) \left(\sum_j e^{-im\phi_j} w_{ij} f_{ij}\right)\right] \end{aligned} \tag{3.24}$$

Ainsi réorganisé, le calcul des coefficients $f_{i'j'}$ procède selon trois étapes :

(a) Transformée de Fourier directe La première opération consiste à faire une transformée de Fourier directe sur chaque ligne de f.

$$\tilde{f}_{im} = \sum_j e^{-im\phi_j} w_{ij} f_{ij} \tag{3.25}$$

Ce qui nécessite $O(t \log_2 t)$ opérations pour chaque ligne, soit un coût total de $O(t^2 \log_2 t)$.

(b) Produit matrice-vecteur On définit la matrice B^m par

$$B^m_{i'i} = \sum_{|m|\le n\le t} C_{n,m} P_n^m(\cos\theta'_{i'}) C_{n,m} P_n^m(\cos\theta_i) \tag{3.26}$$

La construction de cette matrice, a priori en $O(t^4)$, peut-être accélérée en utilisant la formule de sommation de Christoffel-Darboux :

$$B^m_{i'i} = \sqrt{\frac{(t+1)^2-m^2}{4(t+1)^2-1}}\left(\frac{C_{t+1,m}P^m_{t+1}(\cos\theta'_{i'})C_{t,m}P^m_t(\cos\theta_i)}{\cos\theta_i-\cos\theta'_{i'}} - \frac{C_{t+1,m}P^m_{t+1}(\cos\theta_i)C_{t,m}P^m_t(\cos\theta'_{i'})}{\cos\theta_i-\cos\theta'_{i'}}\right) \quad (3.27)$$

La deuxième étape du calcul consiste alors à évaluer les produits matrice-vecteur :

$$\tilde{f}_{i'm} = \sum_i B^m_{i'i}\tilde{f}_{im} \quad (3.28)$$

pour tout m, soit une complexité de $O(t^3)$. Cette étape (b), encore trop coûteuse, peut être améliorée selon une approche proposée par [44] en utilisant (3.27) pour réécrire (3.28) :

$$\tilde{f}_{i'm} = \sqrt{\frac{(t+1)^2-m^2}{4(t+1)^2-1}}C_{t+1,m}P^m_{t+1}(\cos\theta'_{i'})\sum_i \frac{C_{t,m}P^m_t(\cos\theta_i)\tilde{f}_{im}}{\cos\theta_i-\cos\theta'_{i'}} - C_{t,m}P^m_t(\cos\theta'_{i'})\sum_i \frac{C_{t,m}P^m_{t+1}(\cos\theta_i)\tilde{f}_{im}}{\cos\theta_i-\cos\theta'_{i'}} \quad (3.29)$$

Ces deux produits matrices vecteurs peuvent alors être acccélérés par une FMM 1D et ainsi obtenir une complexité totale de l'étape (b) de $O(t^2)$.

(c) Transformée de Fourier inverse Enfin une transformée de Fourier inverse sur les lignes de $\tilde{f}$ est effectuée :

$$f_{i'j'} = \sum_{-t(\ell)\le m\le t(\ell)} e^{im\phi'_{j'}}\tilde{f}_{i'm} \quad (3.30)$$

Comme pour l'étape (a), l'étape (c) nécessite $O(t^2\log_2 t)$ opérations.

A chaque niveau ℓ la complexité de l'interpolation est donc de

Pour toute cellule du niveau ℓ		pour chaque opération
$\left(\frac{D}{R(\ell)}\right)^2$	$\times$	$k^2R^2(\ell)\log_2(kR(\ell))$

soit $O(N \log_2(kR(\ell))$. En particulier au niveau 3 cette complexité est en $O(N \log N)$. La complexité totale, notée C_{inter}, peut-être évaluée par

$$C_{\text{inter}} = N \left(\sum_{i=0}^{L-3} \log_2(2^i kR(L)) \right) \tag{3.31}$$

L étant le nombre total de niveaux, d'où

$$C_{\text{inter}} = N \left(\sum_{i=0}^{L-3} \log_2(2^i) + \sum_{i=0}^{L-3} \log_2(kR(L)) \right) \tag{3.32}$$

$$= N \left(\frac{(L-3)(L-2)}{2} + (L-2) \log_2(kR(L)) \right) \tag{3.33}$$

Or $kR(L)$ est constant et $L = O(\log_2 N)$, d'où une complexité totale pour les étapes d'interpolation et d'extrapolation en $O(N \log_2^2 N)$. Ce résultat semble donc dégrader les performances en $O(N \log_2 N)$ de la méthode multipôle rapide en dynamique calculée en section 2.3.1. Toutefois, cette dégradation est faible et dans les cas que nous avons testés cette étape ne semble pas déterminante pour le temps de calcul (cela est sûrement dû au coefficient, que nous n'avons pas évalué, multipliant le comportement asymptotique).

3.5 Les fonctions spéciales

Dans les différentes étapes des calculs que nous avons décrits précedemment interviennent des fonctions, connues dans la littérature sous le nom de *fonctions spéciales*. Leurs applications étant nombreuses, ces fonctions ont été très largement étudiées des points de vue tant théorique que numérique [1]. Le calcul de ces fonctions est un point important de l'algorithme, dont la précision détermine celle de la méthode multipôle rapide.

Le but de cette section est de donner quelques rappels concernant les définitions des fonctions qui apparaissent dans le calcul multipôle et surtout de guider le lecteur vers les stratégies de calcul pratiques qui se sont avérées les plus efficaces lors de nos essais.

3.5.1 Polynômes de Legendre et fonctions de Legendre associées

Polynômes de Legendre

La fonction polynômiale solution de l'équation différentielle :

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{d}{dx} P \right] + n(n+1)P = 0 \tag{3.34}$$

où le paramètre n est un entier, est un polynôme de degré n noté P_n. Les P_n sont appelés *polynômes de Legendre* quand ils sont de plus normalisés par la condition $P_n(1) = 1$. Les premiers polynômes sont donnés par

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)\ ... \tag{3.35}$$

Les P_n sont orthogonaux pour le produit scalaire L^2 (de poids constant).

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{nm} \tag{3.36}$$

Les polynômes de Legendre vérifient certaines relations de récurrences telles que :

$$\begin{aligned} (n+1)P_{n+1}(x) - (2n+1)xP_n(x) + nP_{n-1}(x) &= 0 \\ \frac{dP_{n+1}}{dx} - x\frac{dP_n}{dx} - (n+1)P_n &= 0 \\ (x^2-1)\frac{dP_n}{dx} - nxP_n + nP_{n-1} &= 0 \end{aligned} \tag{3.37}$$

En pratique : Le calcul des polynômes de Legendre ne pose pas de problème numérique particulier, c'est la formule (3.37), initialisée par P_0 et P_1 connus, qui permet de les calculer de proche en proche.

Fonctions de Legendre associées

On peut associer à tout polynôme de Legendre la fonction P_n^m, définie sur l'intervalle $[-1, 1]$ et pour tout entier m dans l'intervalle $[-n, n]$ par

$$P_n^m(x) = (-1)^m(1-x^2)^{m/2}\frac{d}{dx^m}P_n(x) \tag{3.38}$$

On peut vérifier que ces fonctions sont solutions de l'équation différentielle :

$$\frac{d}{dx}[(1-x^2)\frac{dP}{dx}] + [n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}]P = 0 \tag{3.39}$$

A m fixé cette famille est orthogonale pour le produit scalaire L^2 :

$$\int_{-1}^{1} P_n^m(x)P_{n'}^m(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\frac{(n+m)!}{(n-m)!}\delta_{nn'} \tag{3.40}$$

A n fixé elle est aussi orthogonale

$$\int_{-1}^{1} \frac{P_n^m(x)P_{n'}^m(x)}{1-x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{(n+m)!}{m!(n-m)!}\delta_{mm'} \tag{3.41}$$

De plus, P_n^{-m} et P_n^m sont reliés par

$$P_n^{-m}(x) = (-1)^m\frac{(n-m)!}{(n+m)!}P_n^m(x) \qquad (0 \le m \le n) \tag{3.42}$$

En pratique : Le calcul numérique des fonctions de Legendre associées est plus délicat que celui des polynômes, notamment à cause de la divergence en -1 et 1. L'algorithme utilisé s'appuie sur une relation de récurrence sur 3 termes proposée dans [1] :

$$(n-m)P_n^m(x) - (2n-1)xP_{n-1}^m(x) + (n+m-1)P_{n-2}^m(x) = 0, \quad 0 \leq m \leq n \tag{3.43}$$

initialisée par

$$P_m^m(x) = (-1)^m(1-x^2)^{m/2}\frac{(2m)!}{2^m m!}$$
$$P_{m+1}^m(x) = (2m+1)xP_m^m(x)$$

Or comme dans la pratique on doit évaluer le produit $C_{n,m}P_n^m$ voir (3.26) ou (3.29) et que pour les grands indices $C_{n,m}$ devient petit et P_n^m devient grand il est préférable d'écrire (3.43) :

$$\sqrt{n^2-m^2}C_{n,m}P_n^m(x) - (2n-1)xC_{n-1,m}P_{n-1}^m(x) + \sqrt{(n-1)^2-m^2}C_{n-2,m}P_{n-2}^m(x) = 0, \quad 0 \leq m \leq n$$

et d'initialiser la récurrence par :

$$C_{m,m}P_m^m(x) = (-1)^m(1-x^2)^{m/2}\frac{\sqrt{(2m)!}}{2^m m!}$$
$$C_{m+1,m}P_{m+1}^m(x) = \sqrt{2m+1}xC_{m,m}P_m^m(x)$$

3.5.2 Les harmoniques sphériques

La résolution du Laplacien en coordonnées sphériques par la méthode de séparation des variables fait intervenir les fonctions de Legendre associées. Plus précisément, les solutions de

$$\Delta\psi(x) = 0 \tag{3.44}$$

sont des combinaisons linéaires de fonctions de la forme

$$\psi_{m,n}(r,\theta,\phi) = g_m(r)(Ae^{im\phi} + Be^{-im\phi})P_n^m(\cos\theta) \tag{3.45}$$

où $g_m(r) = r^m$ ou r^{-m-1}. On introduit alors naturellement les fonctions :

$$Y_n^m(\theta,\phi) = Ce^{im\phi}P_n^m(\cos\theta) \tag{3.46}$$

obtenues à partir des deux familles de fonctions orthogonales

$$\{e^{im\phi},\ 0 \leq \phi < 2\pi\} \text{ et } \{P_n^m(\cos\theta),\ 0 \leq \theta \leq \pi\} \tag{3.47}$$

elles forment donc une famille de fonctions orthogonales sur la sphère unité, et sont appelées harmoniques sphériques. Le coefficient C est choisi afin qu'elles constituent un système orthonormé de fonctions, au sens où elles vérifient

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta \overline{Y}_n^m(\theta,\phi) Y_{n'}^{m'}(\theta,\phi)\, d\theta = \delta_{nn'}\delta_{mm'} \tag{3.48}$$

On doit donc avoir

$$C^2 \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\phi}\, d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta P_n^m(\cos\theta) P_{n'}^{m'}(\cos\theta)\, d\theta = \delta_{nn'}\delta_{mm'} \tag{3.49}$$

ce qui compte tenu de (3.40) donne

$$|C| = \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \tag{3.50}$$

On prendra C positif. De même que pour les fonctions de Legendre associées il existe une formule reliant Y_n^{-m} à Y_n^m :

$$Y_n^{-m}(\theta,\phi) = (-1)^m \overline{Y}_n^m(\theta,\phi) \tag{3.51}$$

On notera que toute fonction f de $L^2(S)$ peut être développée sur la base des harmoniques sphériques :

$$f(\theta,\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=-n}^{n} A_n^m Y_n^m(\theta,\phi) \tag{3.52}$$

où

$$A_n^m = \int \overline{Y}_n^m(\theta,\phi) f(\theta,\phi) \tag{3.53}$$

Enfin, on utilisera par la suite le théorème d'addition des harmoniques sphériques entre deux vecteurs faisant un angle γ :

$$P_n(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2n+1} \sum_{m=-n}^{n} \overline{Y}_n^m(\theta',\phi') Y_n^m(\theta,\phi) \tag{3.54}$$

où $\cos\gamma = \cos\theta\cos\theta' + \sin\theta\sin\theta'\cos(\phi-\phi')$

En pratique : Bien qu'elles interviennent dans beaucoup de développements théoriques de la méthode multipôle rapide, les harmoniques sphériques n'ont en pratique pas besoin d'être calculées.

3.5.3 Les fonctions de Bessel et Hankel

Les solutions de l'équation de Helmholtz

$$(\Delta + \lambda^2)\psi(x) = 0 \tag{3.55}$$

peuvent se mettre sous la forme

$$\psi(x) = \sum_{n,m} f_{nm}(r) Y_n^m(\theta, \phi) \tag{3.56}$$

où les fonctions f sont solutions de l'équation (indépendante de m) :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \kappa^2 - \frac{n(n+1)}{r^2}\right] f_n(r) = 0 \tag{3.57}$$

Les paires de solutions linéairement indépendantes de cette équation sont les fonctions de Bessel sphériques (j_n, y_n) et les fonctions de Hankel sphériques $(h_n^{(1)}, h_n^{(2)})$. On peut les exprimer en termes des fonctions de Bessel d'indices demi-entier :

$$\begin{aligned}
j_n(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{n+1/2}(x) \\
y_n(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} Y_{n+1/2}(x) \\
h_n^{(1)}(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(1)}(x) \\
h_n^{(2)}(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2x}} H_{n+1/2}^{(2)}(x)
\end{aligned}$$

Les fonctions j_n et y_n sont à valeurs réelles et vérifient :

$$\begin{aligned}
j_n(x) &= (-x)^n - (\frac{1}{x}\frac{d}{dx})^n (\frac{\sin x}{x})^n \\
y_n(x) &= (-x)^{n+1} - (\frac{1}{x}\frac{d}{dx})^n (\frac{\cos x}{x})^n
\end{aligned}$$

alors que $h_n^{(1)}$ et $h_n^{(2)}$ prennent des valeurs complexes et sont reliées aux précédentes par

$$\begin{aligned}
h_n^{(1)}(x) &= j_n(x) + i y_n(x) \\
h_n^{(2)}(x) &= j_n(x) - i y_n(x)
\end{aligned} \tag{3.58}$$

En pratique : comme on l'a vu en section 2.3 c'est l'évaluation de la fonction de Hankel sphérique de première espèce $h_n^{(1)}$ qui nous importe. Tirant profit de la relation (3.58), le calcul pratique de $h_n^{(1)}$ s'appuie sur les fonctions de Bessel sphériques j_n et y_n. Pour ce faire nous avons utilisé des relations de récurrence données dans [1].

Le calcul de y_n repose sur la relation de récurrence

$$y_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{x} y_n(x) - y_{n-1}(x) \tag{3.59}$$

initialisée par

$$\begin{aligned} y_0(x) &= -\frac{\cos x}{x} \\ y_1(x) &= -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x} \end{aligned} \tag{3.60}$$

La récurrence (3.59) est en effet stable si elle est exploitée pour les n croissants (« récurrence avant »).

Le calcul de j_n repose également sur la relation de récurrence (3.59). En revanche, cette dernière n'est dans ce cas stable que si elle est parcourue selon les indices n décroissants. Cette « récurrence arrière » est exploitée selon une méthode proposée par Miller (donnée dans [1]) : démarrant la récurrence à un ordre N élevé, on pose $j_N = 0$ et $j_{N-1} = 1$ puis on calcule :

$$j_{n-1}(x) = \frac{2n+1}{x} j_n(x) - j_{n+1}(x) \tag{3.61}$$

En pratique on a utilisé $N = t(L) + 100$.

3.6 Le nombre de pôles

Dans la pratique la formule de développement en série doit être tronquée à partir d'un certain rang t. Nous avons déjà vu que dans le cas dynamique ce nombre de termes dépend du niveau. De plus on s'attend, a priori, à ce que plus le nombre de termes retenus est grand meilleure est la précision de ce calcul. Mais cela ne se vérifie pas en pratique. En effet, la série (2.35) est divergente et cela conduit à l'observation d'un phénomène appelé dans la littérature *sub-wavelength breakdown*.

Puisque l'on observe sur des résultats numériques une plage de valeurs pour lequel la précision est bonne. Des approches euristiques pour déterminer le nombre de pôles optimum à utiliser pour le calcul ont été proposées par plusieurs auteurs. Ceci conduit à plusieurs formules, mais qui sont assez proches les unes des autres. Nous mentionnerons ici celles proposées par Chew [47] et Darve [29]. Dans les deux cas le nombre de pôles retenus est égal au diamètre de la cellule auquel est ajouté un terme de correction ajusté par un paramètre, noté C, et choisi par l'utilisateur.

Approche de Chew Dans l'approche proposé par Chew, à chaque niveau ℓ, le nombre de pôle est défini par la formule :

$$t(\ell) = \sqrt{3}kR(\ell) + C(\sqrt{3}kR(\ell))^{1/3} \tag{3.62}$$

Nous avons testé cette formule pour une sphère de diamètre 2λ dont le nombre de points de discrétisations par longueur d'onde n_0 varie :

n_0	Nombre de DDLs
10	1102
15	2686
20	4894
25	7750

Pour chacune de ces discrétisations et pour plusieurs valeurs du paramètre C nous avons calculé (figure 3.2) l'écart quadratique relatif moyen e entre la solution p, calculée par la méthode des équations intégrales de frontières accélérée par la méthode multipôle rapide, et la solution analytique p^{ana} définie par (3.1) :

$$e = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N} |p(\underline{x}_i) - p^{ana}(\underline{x}_i)|^2}{\sum_{i=1}^{N} |p^{ana}(\underline{x}_i)|^2}} \tag{3.63}$$

Dans chacun de ces cas le coté des cellules feuilles à été choisi à un quart de longueur d'onde.

Approche de Darve La formule proposée par Darve est, quant à elle :

$$t(\ell) = \sqrt{3}kR(\ell) + C\log(\sqrt{3}kR(\ell) + \pi) \tag{3.64}$$

Cette formule a été testée pour les mêmes maillages que ceux utilisés pour tester la formule de Chew. Les résultats obtenus sont compilés dans la figure 3.3.

Le bilan que l'on peut en dresser de ces résultats est que la formule de Chew est valable pour $1 \leq C \leq 6$, celle de Darve pour $2 \leq C \leq 8$. Ceci dit, l'approche de Chew donne un nombre de pôles sensiblement supérieur et un contrôle moins fin sur le calcul car la plage de valeurs de C donnant des résultats corrects est plus large chez Darve que chez Chew. Nous conseillons donc la formule de Darve bien que les résultats donnés par les deux formules soient assez proches. De plus le cas où $C = 4$ et où le maillage comporte 15 points par longueur d'onde semble un bon compromis entre la précision et le temps de calcul envisagé.

Nous noterons toutefois que des articles récents de Carayol et Collino [18, 19] tentent de justifier complétement le nombre de pôles optimum pour une précision donnée. Il pourrait donc être intéressant d'exploiter les résultats de ces articles pour optimiser les performances de la méthode multipôle rapide.

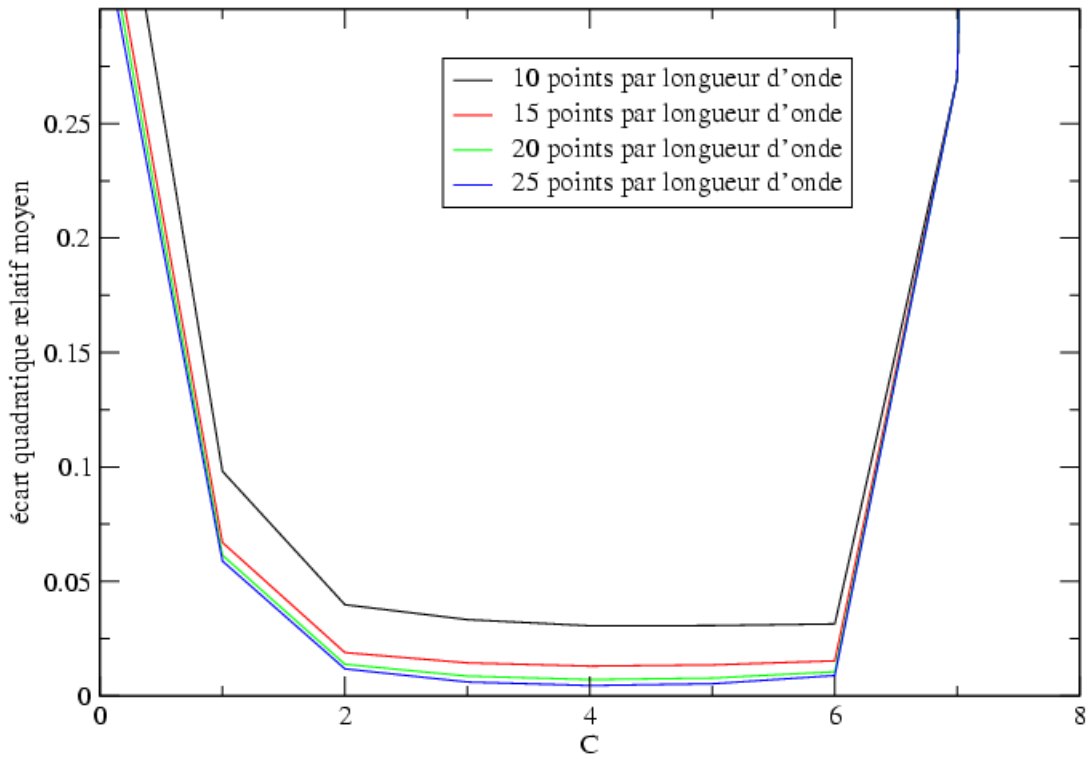


Figure 3.2: *Evolution de la précision pour différentes finesses de maillage en fonction du paramètre C de la formule (3.62) proposée par Chew.*

3.7 Calcul global : complexité et précision

Fort de tous les développements que nous venons de présenter, nous allons analyser un calcul multipôle complet pour plusieurs tailles du problème exposé à la section 1.1. Nos deux critères pour évaluer notre méthode seront la précision du calcul en comparaison de la solution analytique et le temps de calcul nécessaire en fonction du nombre de degrés de liberté du cas traité.

Notons qu'aucune précaution n'a été prise, dans les calculs numériques présentés, pour détecter et éviter les fréquences propres (réelles ou fictives). D'autres formulations du problème permettraient d'éviter cet écueil [60, 17].

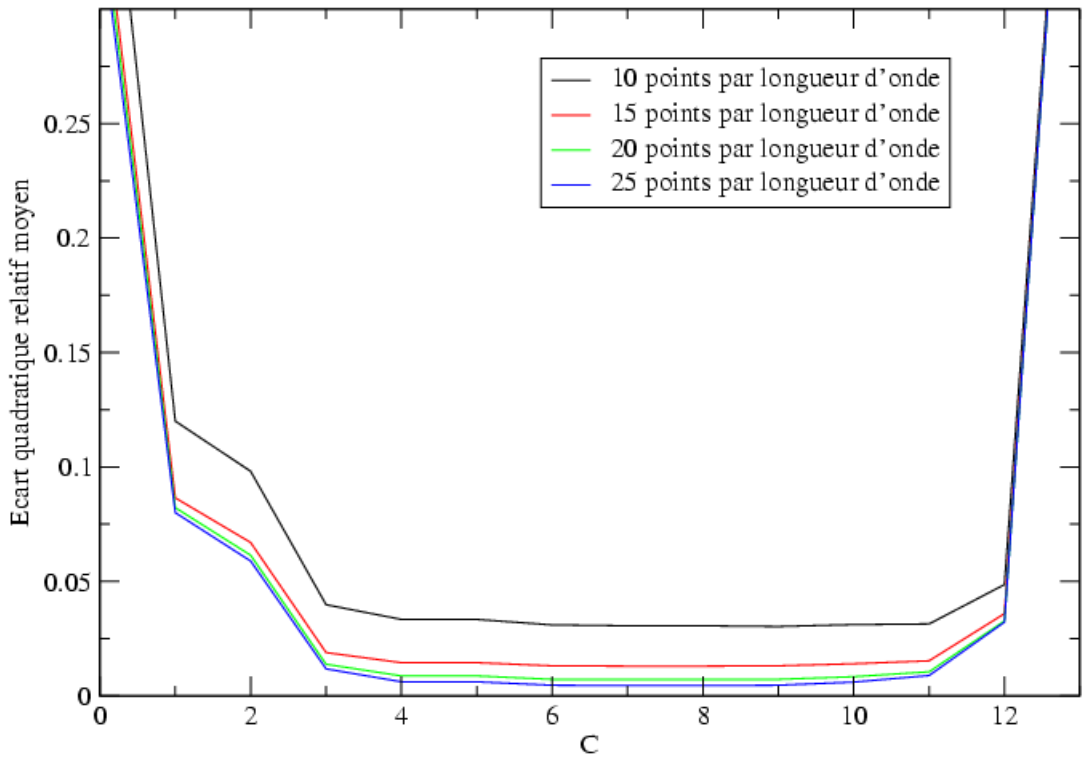


Figure 3.3: *Evolution de la précision pour différentes finesses de maillage en fonction du paramètre C de la formule (3.64)proposée par Darve.*

3.7.1 Temps de calcul d'une itération

Les calculs théoriques de complexité présentés au chapitre 2 section 3.1 et complétés à la section 3.4 prévoient une évolution du temps de calcul en $O(N \log N)$ pour une itération du calcul accéléré par la méthode multipôle rapide alors qu'il évolue en $O(N^2)$ pour l'approche traditionnelle. Nous comparons ce résultat théorique à des calculs numériques dans la figure 3.4, pour une sphère dont le diamètre varie de 2 à 40 longueurs d'ondes, la densité des maillages étant fixée à 10 points par longueur d'onde et le nombre de pôles étant calculé par la formule (3.64) avec $C = 2$.

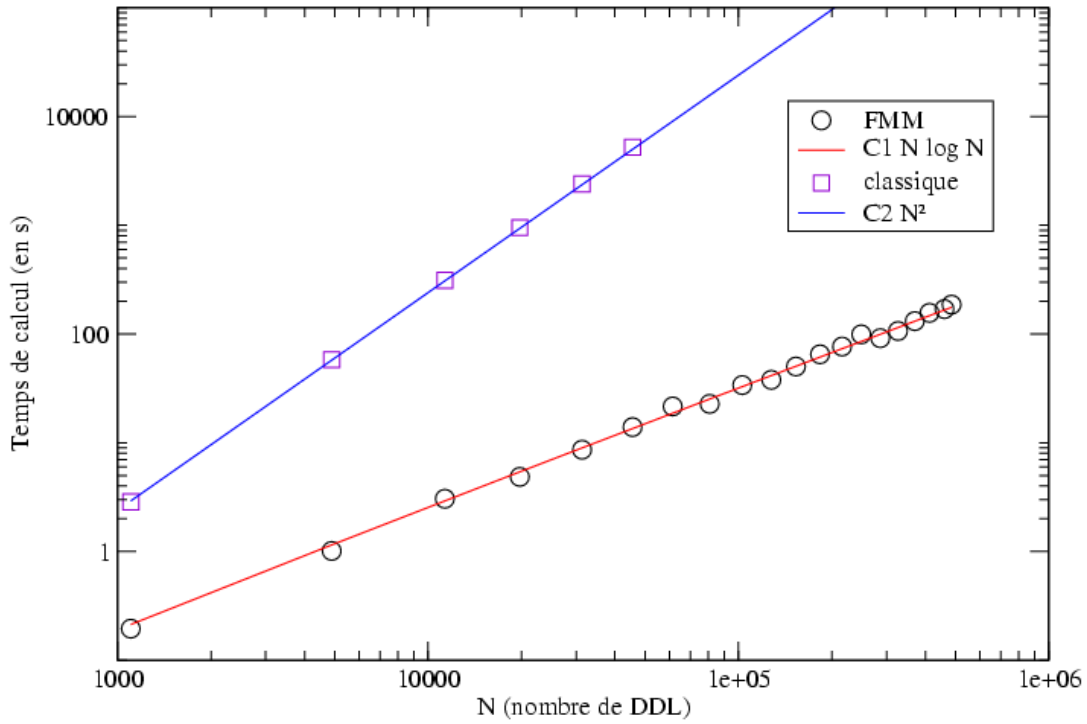


Figure 3.4: *Evolution du temps de calcul pour un produit matrice-vecteur en fonction de la taille du maillage pour une sphère.*

Ceci nous permet de vérifier que non seulement les temps de calculs évoluent bien selon les lois annoncées mais qu'en plus le calcul accéléré par FMM est plus rapide que l'approche traditionnelle même pour des petits maillages.

3.7.2 Evolution de la précision et du nombre d'itérations

Nous allons à présent étudier le comportement du calcul complet pour plusieurs cas. Nous pr/'esenterons essentiellement deux résultats : l'écart quadratique relatif moyen e (3.63) et le nombre d'itérations nécessaire à la convergence. Ces résultats seront présentés pour plusieurs géométries dont une dimension caractéristique varie de 2 à 10 longueurs d'onde. Contrairement à la section précédente nous ne disposons pas ici de résultat théorique sur les temps de calculs auxquels comparer les résultats numériques, nous les donnons donc à titre informatif.

La sphère

Trois exemples successifs seront présentés pour une sphère centrée sur l'origine et une source placée en $(400\lambda, 500\lambda, 600\lambda)$. Les deux variables qui varient d'un cas à l'autre sont la paramètre C de la formule (3.64) et le nombre de degrés de liberté par longueur d'onde n_0. Le premier, pour lequel $C = 2$ et $n_0 = 10$, est le calcul dit *rapide*. Le second sera qualifié d'*intermédiaire* et aura pour variables $C = 2$, $n_0 = 15$. Enfin le troisième, dit *optimum* en référence aux conclusions de la section 3.6, sera pour $C = 4$ et $n_0 = 15$.

Calcul rapide

Diamètre (en λ)	N	e	temps (en s)
2	1102	$9.8\,10^{-2}$	6
4	4894	$1.5\,10^{-1}$	40
6	11326	$6.2\,10^{-2}$	132
8	19754	$1.1\,10^{-1}$	290
10	31354	$9.3\,10^{-2}$	669

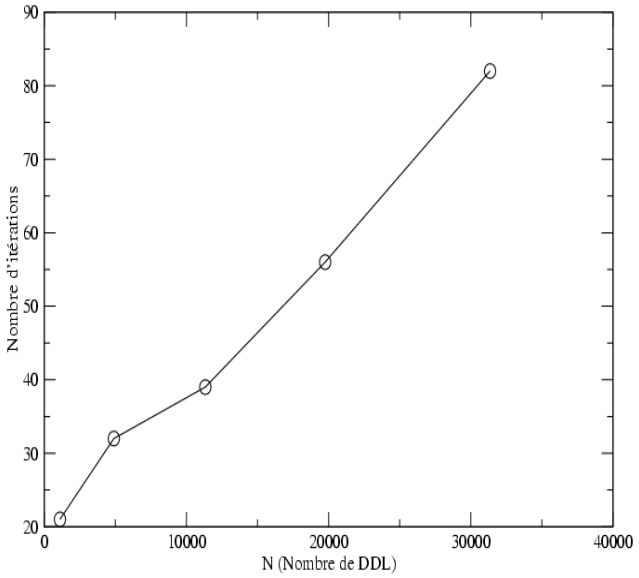


Figure 3.5: *Nombre d'itérations du calcul rapide pour la sphère*

Calcul intermédiaire

Diamètre (en λ)	N	e	temps (en s)
2	2686	$6.7\,10^{-2}$	10
4	11326	$7.6\,10^{-2}$	60
6	25162	$4.7\,10^{-2}$	271
8	45594	$8.2\,10^{-2}$	495
10	70726	$6.4\,10^{-2}$	1351

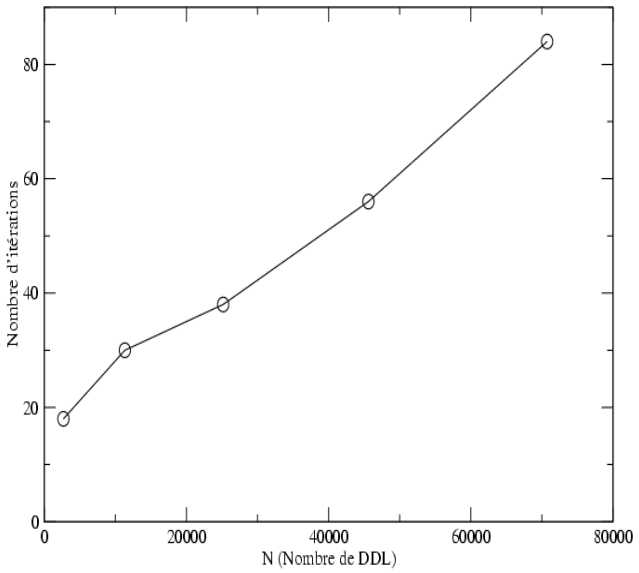


Figure 3.6: *Nombre d'itérations du calcul intermédiaire pour la sphère*

Calcul optimum

Diamètre (en λ)	N	e	temps (en s)
2	2686	$1.4\,10^{-2}$	13
4	11326	$1.6\,10^{-2}$	87
6	25162	$1.6\,10^{-2}$	306
8	45594	$1.7\,10^{-2}$	642
10	70726	$2.1\,10^{-2}$	1621

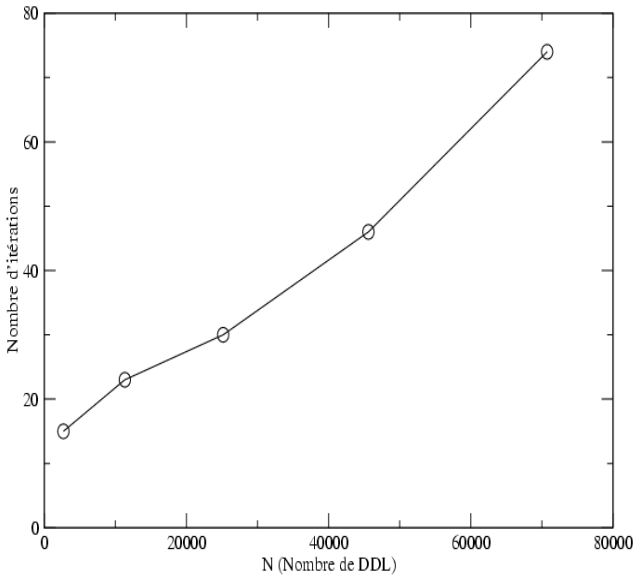


Figure 3.7: *Nombre d'itérations du calcul optimum pour la sphère*

L'ellipsoïde

Le même type de résultats que ceux présentés pour la sphère sont maintenant donnés pour des ellipsoïdes. Le premier a un grand axe a, orienté suivant l'axe $(1, 0, 0)$, double d'un des petits axes b (pour le dernier axe on prendra $c = b$) ; le second a des dimensions dans le rapport $a/b = 3$. Pour ces deux ellipsoïdes nous présentons le calcul rapide et le calcul optimum, la source étant toujours placée en $(400\lambda, 500\lambda, 600\lambda)$.

Ellipsoïde de rapport $a/b = 2$

Calcul rapide

Grand axe (en λ)	N	e	temps (en s)
2	502	$3.0\,10^{-1}$	3
4	2214	$1.2\,10^{-1}$	25
6	5230	$1.1\,10^{-1}$	124
8	9390	$3.5\,10^{-1}$	372
10	14998	$1.9\,10^{-1}$	773

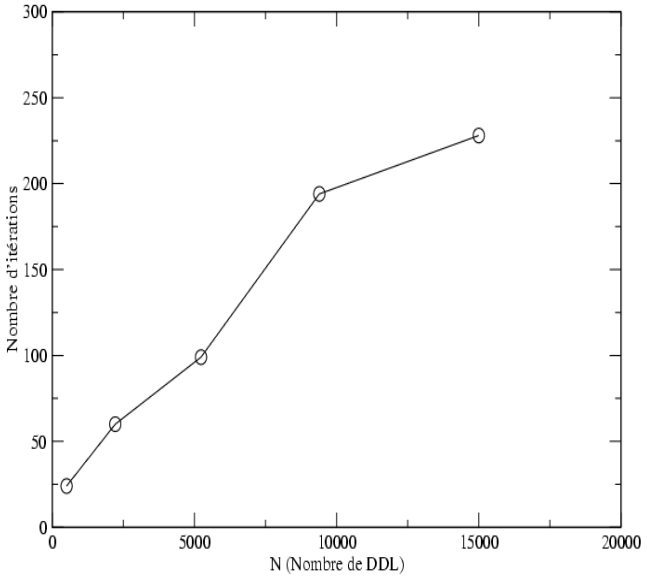


Figure 3.8: *Nombre d'itérations du calcul rapide pour l'ellipsoïde de rapport $a/b = 2$*

Calcul optimum

Grand axe (en λ)	N	e	temps (en s)
2	1222	$8.2\,10^{-2}$	7
4	5230	$2.4\,10^{-2}$	79
6	11894	$4.7\,10^{-2}$	463
8	21558	$6.8\,10^{-2}$	1332
10	33650	$8.8\,10^{-2}$	3296

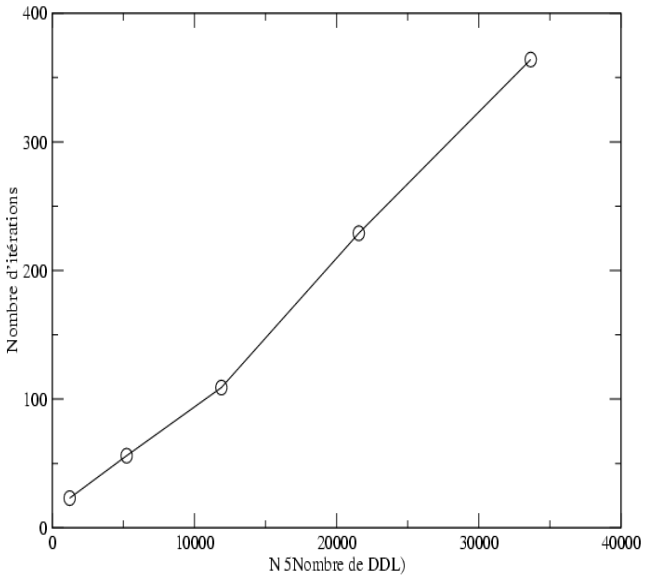


Figure 3.9: *Nombre d'itérations du calcul optimum pour l'ellipsoïde de rapport $a/b = 2$*

Ellipsoïde de rapport $a/b = 3$

Calcul rapide

Grand axe (en λ)	N	e	temps (en s)
2	374	$1.8\,10^{-1}$	2
4	1586	$1.6\,10^{-1}$	13
6	3638	$2.2\,10^{-1}$	75
8	6362	$4.0\,10^{-1}$	169
10	10426	$1.8\,10^{-1}$	483

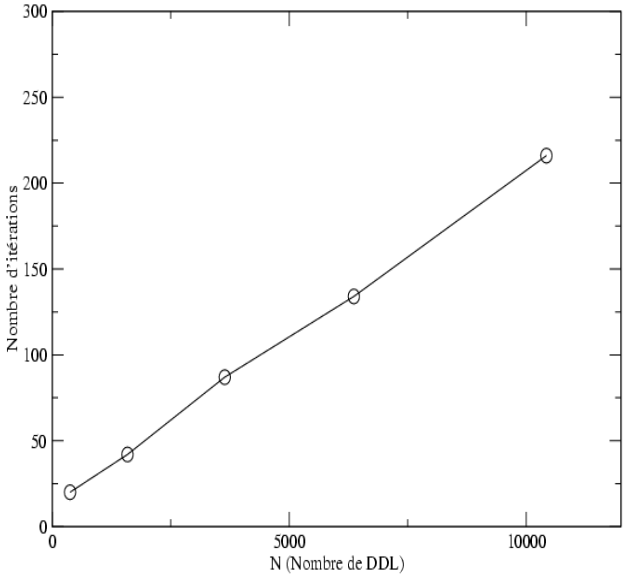


Figure 3.10: *Nombre d'itérations du calcul rapide pour l'ellipsoïde de rapport* $a/b = 3$

Calcul optimum

Grand axe (en λ)	N	e	temps (en s)
2	838	$5.4\,10^{-2}$	4
4	3638	$4.1\,10^{-2}$	39
6	8246	$5.6\,10^{-2}$	257
8	15014	$9.8\,10^{-2}$	718
10	23528	$9.3\,10^{-2}$	1752

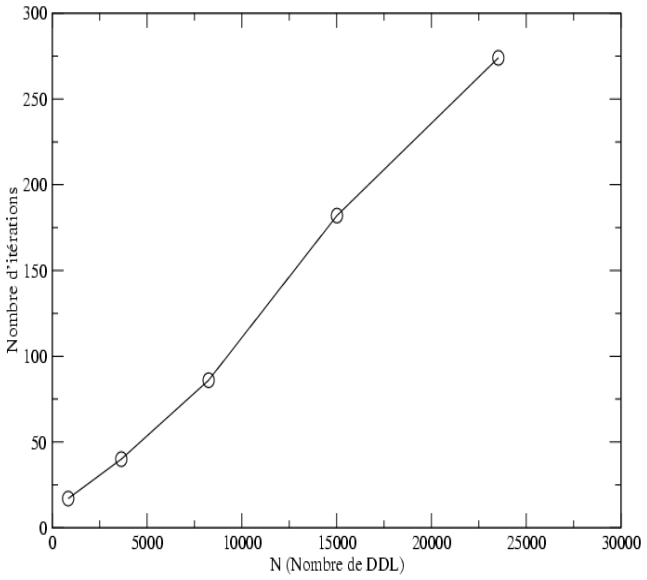


Figure 3.11: *Nombre d'itérations du calcul optimum pour l'ellipsoïde de rapport $a/b = 3$*

Le cube

Des résultats du calcul rapide et du calcul optimum sont désormais présentés pour un cube. En plus de l'écart quadratique relatif moyen pour la pression calculée sur la frontière par équation intégrale cet écart est donné pour la représentation intégrale de la pression et de son gradient sur une grille régulière de points disposée à l'intérieur du cube, de densité identique à celle du maillage de la frontière.

Calcul rapide

coté (en λ)	N	e	N intérieur	écart intérieur	écart gradient	temps (en s)
2	2402	$1.7\,10^{-1}$	8000	$1.6\,10^{-1}$	$1.7\,10^{-1}$	21
4	9602	$2.0\,10^{-1}$	64000	$2.0\,10^{-1}$	$1.6\,10^{-1}$	165
6	21602	$1.5\,10^{-1}$	216000	$1.5\,10^{-1}$	$1.2\,10^{-1}$	710
8	38402	$1.5\,10^{-1}$	512000	$1.2\,10^{-1}$	$1.5\,10^{-1}$	883
10	60002	$1.7\,10^{-1}$	1000000	$1.9\,10^{-1}$	$1.9\,10^{-1}$	1976

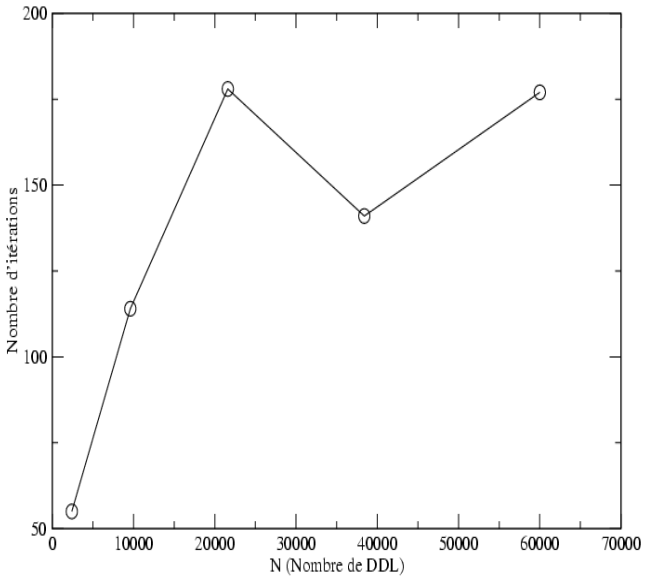


Figure 3.12: *Nombre d'itérations du calcul rapide pour le cube*

Calcul optimum

coté (en λ)	N	e	N intérieur	écart intérieur	écart gradient	temps (en s)
2	5402	$2.9\,10^{-2}$	27000	$1.9\,10^{-2}$	$3.5\,10^{-2}$	48
4	21602	$2.6\,10^{-2}$	216000	$2.8\,10^{-2}$	$2.7\,10^{-2}$	400
6	48602	$6.4\,10^{-2}$	729000	$6.1\,10^{-2}$	$4.3\,10^{-2}$	1891
8	86602	$2.4\,10^{-2}$	1728000	$8.8\,10^{-2}$	$1.8\,10^{-2}$	2948
10	135002	$5.8\,10^{-2}$	3375000	$9.4\,10^{-2}$	$5.8\,10^{-2}$	6486

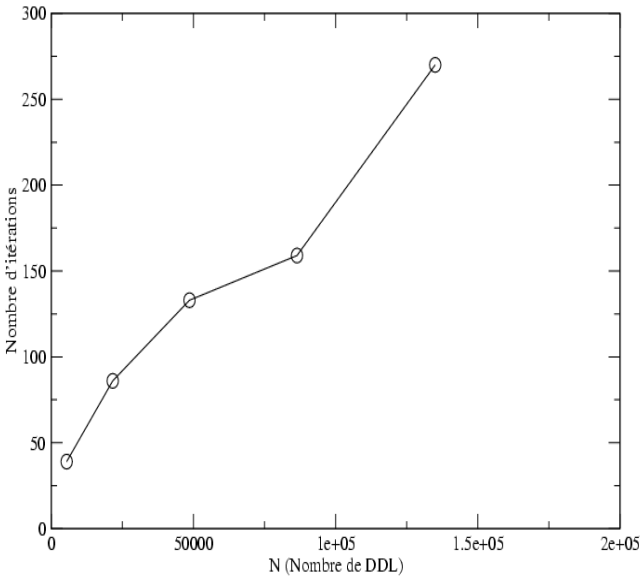


Figure 3.13: *Nombre d'itérations du calcul optimum pour le cube*

Conclusion des tests numériques

A la vue de ces résultats, nous pouvons conclure que quelle que soit la géométrie (forme et taille) l'ordre de grandeur de la précision ne dépend que du paramètre C et de la densité du maillage, la tolérance de GMRES (fixée à 10^{-4} pour nos calculs) n'ayant que peu d'influence. Le calcul rapide, pris pour les paramètres minima, nous semble d'une précision trop grossière. En revanche, le calcul optimum donne une précision pour les calculs de la pression sur la frontière mais aussi à l'intérieur du domaine suffisante pour l'application que nous envisageons dans le chapitre 4. Notons, encore une fois, que pour les calculs présentés dans ce chapitre (et pour ceux du chapitre 4) aucune précaution n'a été prise afin d'éviter les fréquences propres (rélles ou fictives).

Chapitre 4

Identification approchée d'obstacles par gradient topologique

Notations

Dans ce chapitre, pour toute fonction f, nous noterons $f_{,i}$ la i-ème coordonnée de son gradient (i.e. $(\mathbf{grad} f)_i$). Notons toutefois une exception importante, pour les fonctions de Green G et G^0 :

$$G_{,i}(\underline{y} - \underline{x}) = (\mathbf{grad}_y G(\underline{y} - \underline{x}))_i$$

Par ailleurs, nous utiliserons la convention de sommation sur les indices répétés. Enfin, en un point de la frontière, $f_{,n}$ désignera la dérivée normale : $f_{,n} = f_{,i} n_i$.

4.1 Le contexte

Passons désormais à l'étude du problème inverse et rappelons brièvement le contexte de notre étude. On considère un milieu acoustique occupant le domaine borné Ω^{vrai}, satisfaisant aux équations de l'acoustique linéaire. Un obstacle rigide inconnu B^{vrai}, de frontière Γ^{vrai} (ou un ensemble de tels obstacles) est immergé dans Ω^{vrai}. On définit aussi le domaine sain (i.e. sans obstacle) Ω tel que $\Omega^{\text{vrai}} = \Omega \setminus B^{\text{vrai}}$. Le déplacement normal u_n est imposé sur une partie S_N de la frontière S de Ω. Le champ de pression acoustique p à l'intérieur de Ω^{vrai} vérifie alors les équations :

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\Delta + k^2) p^{\text{vrai}} = 0 & \text{dans } \Omega^{\text{vrai}} \\ p^{\text{vrai}}_{,n} = \rho \omega^2 u_n & \text{sur } S_N \\ p^{\text{vrai}}_{,n} = 0 & \text{sur } \Gamma^{\text{vrai}} \\ p^{\text{vrai}} = 0 & \text{sur } S_D = S \setminus S_N \end{array} \right. \tag{4.1}$$

où $k = \omega/c$ est le nombre d'onde et ρ la masse volumique. Selon l'usage, le facteur temporel $e^{-i\omega t}$ est omis dans l'écriture de toutes les grandeurs acoustiques.

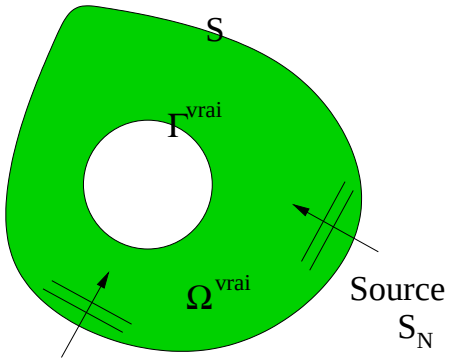


Figure 4.1: *Problème direct*

Le problème inverse consiste à identifier l'emplacement et la forme de B^{vrai} (ou ceux de Γ^{vrai}). Pour cela on suppose que l'on dispose de données aux limites surabondantes : les valeurs, notées p^{obs}, prises par p^{vrai} sur une partie $S^{\text{obs}} \subseteq S_N$ de la frontière externe sont supposées connues. Pour une configuration donnée B^c d'obstacle rigide (simple ou multiple), c'est-à-dire une hypothèse sur cet obstacle, on note p^c le champ de pression solution du *problème direct*, défini par les équations (4.1) dans lesquelles Ω^{vrai}, Γ^{vrai} et p^{vrai} sont remplacés par $\Omega^c = \Omega \backslash B^c$, Γ et p^c.

$$\begin{cases} (\Delta + k^2)p^c = 0 & \text{dans } \Omega^c \\ p^c_{,n} = \rho\omega^2 u_n & \text{sur } S_N \\ p^c_{,n} = 0 & \text{sur } \Gamma \\ p^c = 0 & \text{sur } S_D = S \setminus S_N \end{cases} \tag{4.2}$$

L'obstacle B^{vrai} est alors recherché à travers la minimisation d'une fonction coût $\mathcal{J}$ définie ici par :

$$\mathcal{J}(\Omega^c, u_n) = \frac{1}{2} \int_{S^{\text{obs}}} \mid p^c - p^{\text{obs}} \mid^2 \mathrm{d}\Gamma \tag{4.3}$$

4.2 Le gradient topologique

4.2.1 Présentation

La résolution du problème inverse par minimisation de $\mathcal{J}$ fait habituellement appel à une procédure itérative, dont le résultat est susceptible de dépendre fortement du

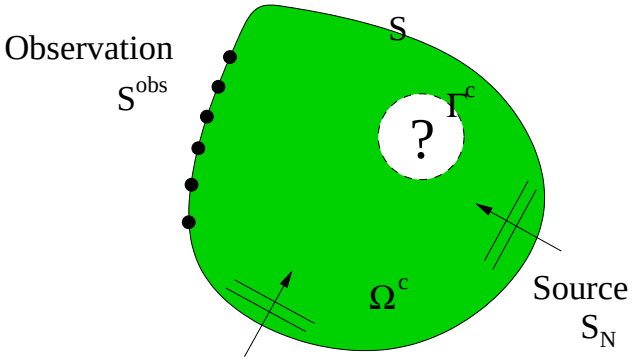


Figure 4.2: *Problème inverse : approche par optimisation*

choix des conditions initiales (nombre d'obstacles, emplacements et formes initiales). Ce choix va être facilité par le calcul du gradient topologique de la fonction $\mathcal{J}$, un concept initialement introduit dans le contexte de l'optimisation topologique de structures [34, 37, 49, 63, 64].

Soit $B^\varepsilon(\underline{x}^o) = \underline{x}^o + \varepsilon\mathscr{B}$ un petit obstacle de taille $\varepsilon > 0$, de frontière Γ^ε et contenant le point $\underline{x}^o \in \Omega$ ($\mathscr{B} \subset \mathbb{R}^3$ désignant un ouvert borné de frontière $\mathscr{S}$ et de volume $|\mathscr{B}|$ contenant l'origine). Pour le domaine $\Omega^\varepsilon = \Omega \backslash B^\varepsilon$, on cherche à évaluer le comportement asymptotique de $\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n)$ pour une valeur infinitésimale de ε. le gradient topologique de $\mathcal{J}(\Omega, u_n)$ est la fonction $\mathcal{T}(\underline{x}^o)$ telle que :

$$\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n) = \mathcal{J}(\Omega, u_n) + \delta(\varepsilon) \mid \mathcal{B} \mid \mathcal{T}(\underline{x}^o) + o(\delta(\varepsilon)) \tag{4.4}$$

où la fonction δ, vérifiant $\lim_{\varepsilon \to 0} \delta(\varepsilon) = 0$, caractérise le comportement asymptotique de $\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n)$. Ce comportement que l'on va déterminer est un des résultats importants de cette analyse. On notera qu'en général la valeur de $\mathcal{T}$ dépend de la forme de $\mathcal{B}$. Afin d'évaluer $\mathcal{T}(\underline{x}^o)$, il est nécessaire de calculer $\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n)$ et donc de résoudre le problème (4.1) dans lequel B^{vrai} est remplacé par $B^\varepsilon(\underline{x}^o)$, dont la solution est notée p^ε.

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\Delta + k^2)p^\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega^\varepsilon \\ p^\varepsilon_{,n} = \rho\omega^2 u_n & \text{sur } S_N \\ p^\varepsilon_{,n} = 0 & \text{sur } \Gamma^\varepsilon \\ p^\varepsilon = 0 & \text{sur } S_D = S \setminus S_N \end{array} \right. \tag{4.5}$$

Il est utile d'introduire la décomposition $p^\varepsilon = \tilde{p}^\varepsilon + p$ en une partie diffractée $\tilde{p}^\varepsilon$ et une partie incidente p solution du problème acoustique associé au domaine sain :

$$\left\{ \begin{array}{ll} (\Delta + k^2)p = 0 & \text{dans } \Omega \\ p_{,n} = \rho\omega^2 u_n & \text{sur } S_N \\ p = 0 & \text{sur } S_D \end{array} \right. \tag{4.6}$$

Il est alors naturel de supposer que le champ $\tilde{p}^\varepsilon$ s'annule lorsque ε tend vers zéro :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \mid \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}) \mid = 0 \tag{4.7}$$

ce qui permet de développer $\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n)$ selon $\tilde{p}^\varepsilon$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n) &= \frac{1}{2} \int_{S^{\text{obs}}} \mid p^\varepsilon - p^{\text{obs}} \mid^2 \, \mathrm{d}\Gamma \\
&= \frac{1}{2} \int_{S^{\text{obs}}} [\mid p - p^{\text{obs}} \mid^2 + 2\mathrm{Re}((\overline{p - p^{\text{obs}}})\tilde{p}^\varepsilon) + o(\mid \tilde{p}^\varepsilon(\mathbf{x}) \mid)] \, \mathrm{d}\Gamma \\
&= \mathcal{J}(\Omega, u_n) + \int_{S^{\text{obs}}} \mathrm{Re}((\overline{p - p^{\text{obs}}})\tilde{p}^\varepsilon)\mathrm{d}\Gamma + o(\parallel \tilde{p}^\varepsilon \parallel)
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Une méthode élégante et efficace pour calculer le terme $\int_{S^{\text{obs}}} \mathrm{Re}((\overline{p - p^{\text{obs}}})\tilde{p}^\varepsilon)\mathrm{d}\Gamma$ repose sur l'utilisation d'un champ adjoint.

4.2.2 Calcul par un champ adjoint.

La deuxième formule de Green (1.18) nous assure que pour tous champs p^1 et p^2 satisfaisant à l'équation de Helmholtz, sans source volumique, dans le domaine générique Θ (de frontière $\partial\Theta$)

$$\int_{\partial\Theta} \left(p^1 p^2_{,n} - p^2 p^1_{,n}\right) \, \mathrm{d}\Gamma = 0 \tag{4.9}$$

Dans notre cas nous choisissons :

1. $p^1 = \hat{p}$, champ solution sur Ω soumis à $\hat{p}_{,n} = \rho\omega^2 \hat{u}_n$ sur S_N (pour une donnée $\hat{u}_n$ à préciser) et $\hat{p} = 0$ sur S_D, ce champ est dit adjoint.

2. $\Theta = \Omega^\varepsilon$

3. $p^2 = \tilde{p}^\varepsilon$, champ diffracté ($p_{,n} = -\tilde{p}^\varepsilon_{,n}$ sur Γ^ε, $\tilde{p}^\varepsilon_{,n} = 0$ sur S_N et $\tilde{p}^\varepsilon = 0$ sur S_D).

Alors l'équation (4.9) devient

$$\int_{\Gamma^\varepsilon} (\hat{p} p_{,n} + \tilde{p}^\varepsilon \hat{p}_{,n}) \, \mathrm{d}\Gamma = -\int_{S_N} \tilde{p}^\varepsilon \rho\omega^2 \hat{u}_n \mathrm{d}\Gamma \tag{4.10}$$

En particulier, si $\hat{u}_n$ est choisi selon

$$\hat{u}_n = \begin{cases} \frac{1}{\rho\omega^2}(\overline{p - p^{\text{obs}}}), & \text{sur} S^{\text{obs}} \\ 0, & \text{sur} S_N \backslash S^{\text{obs}} \end{cases} \tag{4.11}$$

on reconnaît dans le membre de droite de (4.10) le terme que l'on cherche : $\int_{S^{\rm obs}} (\overline{p - p^{\rm obs}})\tilde{p}^\varepsilon \mathrm{d}\Gamma$ et l'équation (4.8) prend la forme

$$\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon, u_n) = \mathcal{J}(\Omega, u_n) - \mathrm{Re}\left[\int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon \hat{p}_{,i} n_i \,\mathrm{d}\Gamma + \int_{\Gamma^\varepsilon} \hat{p} p_{,i} n_i \,\mathrm{d}\Gamma\right] + o(\| \tilde{p}^\varepsilon \|) \tag{4.12}$$

à partir de laquelle le gradient topologique $\mathcal{T}(\underline{x}^o)$ peut être déduit du comportement asymptotique de $\tilde{p}^\varepsilon$ sur Γ_ε

4.2.3 Étude du comportement asymptotique

A partir des équations (4.5) et (4.6) on peut déduire les équations vérifiées par $\tilde{p}^\varepsilon$

$$\begin{cases} (\Delta + k^2)\tilde{p}^\varepsilon = 0 & \text{dans } \Omega^\varepsilon \\ \tilde{p}^\varepsilon_{,n} = 0 & \text{sur } S_N \\ \tilde{p}^\varepsilon_{,n} = -p_{,n} & \text{sur } \Gamma^\varepsilon \\ \tilde{p}^\varepsilon = 0 & \text{sur } S_D = S \setminus S_N \end{cases} \tag{4.13}$$

Afin d'effectuer l'étude du comportement asymptotique de $\tilde{p}^\varepsilon$ sur Γ^ε nous allons utiliser l'équation intégrale de frontière régularisée, telle que nous l'avons présentée au chapitre 1 (1.30), équivalente à l'équation (4.13).

$$\int_{S\cup\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) \left(G_{,i}(\underline{y} - \underline{x}) - G^0_{,i}(\underline{y} - \underline{x})\right) n_i \,\mathrm{d}S_y + \int_{S\cup\Gamma^\varepsilon} \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x})\right) G^0_{,i}(\underline{y} - \underline{x}) n_i \,\mathrm{d}S_y = \int_{S\cup\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon_{,i}(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x}) n_i \,\mathrm{d}S_y \tag{4.14}$$

où

$$G(\underline{y} - \underline{x}) = \frac{e^{ik|\underline{y} - \underline{x}|}}{4\pi|\underline{y} - \underline{x}|}$$

et

$$G^0(\underline{y} - \underline{x}) = \frac{1}{4\pi|\underline{y} - \underline{x}|}$$

sont les solutions fondamentales pour un milieu infini de l'équation de Helmholtz et de Laplace respectivement. Pour la suite des calculs nous utiliserons les notations suivantes : $\tilde{q}^\varepsilon = \tilde{p}^\varepsilon_{,i} n_i$, $H(\underline{y} - \underline{x}) = G_{,i}(\underline{y} - \underline{x}) n_i$ et $H^0(\underline{y} - \underline{x}) = G^0_{,i}(\underline{y} - \underline{x}) n_i$. Séparons dans l'équation (4.14) les cas où $\underline{x} \in S$ et $\underline{x} \in \Gamma^\varepsilon$.

Premier cas : $\underline{x} \in S$

Dans ce cas l'équation (4.14) peut s'écrire :

$$\int_S \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) \left(H(\underline{y}-\underline{x}) - H^0(\underline{y}-\underline{x})\right) \mathrm{d}S_y + \int_S \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x})\right) H^0(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y + \int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) H(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}) \int_{\Gamma^\varepsilon} H^0(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y - \int_{S_D} \tilde{q}^\varepsilon(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y = -\int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y \quad (4.15)$$

Or en intégrant l'équation fondamentale :

$$G^0_{,ii}(\underline{y}-\underline{x}) + \delta(\underline{y}-\underline{x}) = 0 \quad (4.16)$$

sur un volume Ω pour tout $\underline{x} \notin \partial\Omega$,

$$\int_\Omega G^0_{,ii}(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}V_y + \int_\Omega \delta(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}V_y = 0 \quad (4.17)$$

et en utilisant la formule de la divergence on obtient :

$$\int_{\partial\Omega} H^0(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y + \kappa = 0 \quad (4.18)$$

avec $\kappa = 1$ si $\underline{x} \in \Omega$, $\kappa = 0$ si $\underline{x} \notin \overline{\Omega}$ et $\kappa = -1/2$ si $\underline{x} \in \partial\Omega$.
Ainsi l'équation (4.15) devient :

$$\int_S \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) \left(H(\underline{y}-\underline{x}) - H^0(\underline{y}-\underline{x})\right) \mathrm{d}S_y + \int_S \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x})\right) H^0(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y + \int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) H(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y - \int_{S_D} \tilde{q}^\varepsilon(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y = -\int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y \quad (4.19)$$

Deuxième cas : $\underline{x} \in \Gamma^\varepsilon$

En tenant compte directement de l'équation (4.18), on obtient pour l'équation (4.14) :

$$\tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}) + \int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) \left(H(\underline{y}-\underline{x}) - H^0(\underline{y}-\underline{x})\right) \mathrm{d}S_y + \int_{\Gamma^\varepsilon} \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x})\right) H^0(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y + \int_S \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) H(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y - \int_{S_D} \tilde{q}^\varepsilon(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y = -\int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x}) \,\mathrm{d}S_y \quad (4.20)$$

Afin d'établir la contribution principale de $\tilde{p}^\varepsilon$ et $\tilde{q}^\varepsilon$ quand $\varepsilon \to 0$, nous allons étudier le comportement asymptotique de (4.19) et (4.20). Pour ce faire nous allons introduire de nouvelles coordonnées :

$$\overline{x} = \frac{\underline{x} - \underline{x}^0}{\varepsilon} \tag{4.21}$$

$$\overline{y} = \frac{\underline{y} - \underline{x}^0}{\varepsilon} \tag{4.22}$$

$$\tag{4.23}$$

où $\overline{x}, \overline{y} \in \mathscr{S}$ quand $\underline{x}, \underline{y} \in \Gamma^\varepsilon$. En particulier,

$$\mathrm{d}S_y = \varepsilon^2 \, \mathrm{d}S_{\overline{y}} \ \ (\underline{y} \in \Gamma^\varepsilon, \overline{y} \in \mathscr{S}) \tag{4.24}$$

Afin de faciliter cette étude nous allons indexer les champs surfaciques $\tilde{p}^\varepsilon$ et $\tilde{q}^\varepsilon$ par la partie de la frontière sur laquelle il est considéré. *Par exemple le champ* $\tilde{p}^\varepsilon$ *sur* Γ^ε *sera noté* $\tilde{p}^\varepsilon_{\Gamma^\varepsilon}$.
Compte tenu de (4.7) on peut supposer $\tilde{p}^\varepsilon_{\Gamma^\varepsilon} = O(\varepsilon^d)$.

Etude de $(\tilde{p}^\varepsilon, \tilde{q}^\varepsilon)$ ***sur*** S

Regardons chaque terme de l'équation (4.19) séparément :

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon H(\underline{y} - \underline{x}) \, \mathrm{d}S_y &= \int_{\mathscr{S}} \tilde{p}^\varepsilon(\varepsilon\overline{y} + \underline{x}^0) H(\varepsilon\overline{y} + \underline{x}^0 - \underline{x}) \varepsilon^2 \, \mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ &= G_{,i}(\underline{x}^0 - \underline{x}) \varepsilon^2 \int_{\mathscr{S}} \tilde{p}^\varepsilon(\varepsilon\overline{y} + \underline{x}^0) n_i(\overline{y}) \, \mathrm{d}S_{\overline{y}} + o(\varepsilon^{d+2}) \end{aligned} \tag{4.25}$$

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x}) \, \mathrm{d}S_y &= \int_{\mathscr{S}} q(\varepsilon\overline{y} + \underline{x}^0) G(\varepsilon\overline{y} + \underline{x}^0 - \underline{x}) \varepsilon^2 \, \mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ &= p_{,i}(\underline{x}^0) G(\underline{x}^0 - \underline{x}) \int_{\Gamma^\varepsilon} n_i(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y \\ &\quad + [p_{,i}(\underline{x}^0) G(\underline{x}^0 - \underline{x})]_{,l} \int_{\Gamma^\varepsilon} n_i(\underline{y})(\underline{y}_l - \underline{x}^0_l) \, \mathrm{d}S_y + o(\varepsilon^3) \end{aligned} \tag{4.26}$$

Or $\displaystyle\int_{\Gamma^\varepsilon} n_i(\underline{y}) \, \mathrm{d}S_y = 0$, $\displaystyle\int_{\Gamma^\varepsilon} n_i(\underline{y})(\underline{y}_l - \underline{x}^0_l) \, \mathrm{d}S_y = -\delta_{il}\varepsilon^3|\mathcal{B}|$ et $-p_{,ii} = k^2 p$ d'où

$$\int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y} - \underline{x}) \, \mathrm{d}S_y = \left[k^2 p(\underline{x}^0) G(\underline{x}^0 - \underline{x}) - p_{,i}(\underline{x}^0) G_{,i}(\underline{x}^0 - \underline{x})\right] \varepsilon^3 |\mathcal{B}| + o(\varepsilon^3) \tag{4.27}$$

On peut écrire les autres termes comme une fonction linéaire $L_{\mathscr{S}}\{\tilde{p}^\varepsilon_{S_N}, \tilde{q}^\varepsilon_{S_D}\}$ dont l'opérateur intégrale $L_{\mathscr{S}}$ est évidemment indépendant de ε d'où

$$L_{\mathscr{S}}\{\tilde{p}^\varepsilon_{S_N}, \tilde{q}^\varepsilon_{S_D}\} = O\left(\varepsilon^{\min(3,d+2)}\right) \tag{4.28}$$

On peut donc en conclure que $\tilde{p}^\varepsilon_{S_N}$ et $\tilde{q}^\varepsilon_{S_D}$ sont $O\left(\varepsilon^{\min(3,d+2)}\right)$.

Etude de $(\tilde{p}^\varepsilon, \tilde{q}^\varepsilon)$ ***sur*** Γ^ε

D'après ce qui précède

$$\int_{S_N} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) H(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{d}S_y = O\left(\varepsilon^{\min(3,d+2)}\right) \tag{4.29}$$

$$\int_{S_D} \tilde{q}^\varepsilon(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{d}S_y = O\left(\varepsilon^{\min(3,d+2)}\right) \tag{4.30}$$

Avant de continuer les développements faisons quelques remarques sur les fonctions de Green. Commençons par remarquer que :

$$r = |\underline{y}-\underline{x}| = |\underline{x}^0 + \varepsilon\overline{y} - \underline{x}^0 - \varepsilon\overline{x}| = \varepsilon|\overline{y}-\overline{x}| = \varepsilon\overline{r} \tag{4.31}$$

d'où, pour les solutions statiques :

$$G^0(\underline{y}-\underline{x}) = \frac{1}{4\pi r} = \frac{1}{\varepsilon}\frac{1}{4\pi\overline{r}} = \frac{1}{\varepsilon}G^0(\overline{y}-\overline{x}) \tag{4.32}$$

$$H^0(\underline{y}-\underline{x}) = -\frac{1}{4\pi r^2} r_{,n} = -\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{1}{4\pi\overline{r}^2}\overline{r}_{,n} = \frac{1}{\varepsilon^2}H^0(\overline{y}-\overline{x}) \tag{4.33}$$

et pour les solutions dynamiques :

$$\begin{aligned} G(\underline{y}-\underline{x}) &= \frac{e^{ikr}}{4\pi r} = \frac{1}{\varepsilon}\frac{e^{\varepsilon ik\overline{r}}}{4\pi\overline{r}} = \frac{1}{\varepsilon}G^0(\overline{y}-\overline{x})(1+\varepsilon ik\overline{r}+o(\varepsilon)) \\ &= \frac{1}{\varepsilon}G^0(\overline{y}-\overline{x}) + O(1) \end{aligned} \tag{4.34}$$

$$\begin{aligned} H(\underline{y}-\underline{x}) &= -\frac{r_{,n}}{4\pi r^2}(1-ikr)e^{ikr} = -\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\overline{r}_{,n}}{4\pi\overline{r}^2}(1-\varepsilon ik\overline{r})e^{\varepsilon ik\overline{r}} \\ &= -\frac{1}{\varepsilon^2}\frac{\overline{r}_{,n}}{4\pi\overline{r}^2}(1-\varepsilon ik\overline{r})(1+\varepsilon ik\overline{r}+o(\varepsilon)) = \frac{1}{\varepsilon^2}H^0(\overline{y}-\overline{x}) + O(1) \end{aligned} \tag{4.35}$$

continuons alors l'analyse avec les termes restants de l'équation (4.20), en se souvenant que $\tilde{p}^\varepsilon_{\Gamma^\varepsilon} = O(\varepsilon^d)$

$$\begin{aligned} &\int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon(\underline{y})\left(H(\underline{y}-\underline{x}) - H^0(\underline{y}-\underline{x})\right)\mathrm{d}S_y \\ &\qquad = \int_{\mathscr{S}} O(\varepsilon^d)\left(\frac{1}{\varepsilon^2}H^0(\overline{y}-\overline{x}) + O(1) - \frac{1}{\varepsilon^2}H^0(\overline{y}-\overline{x})\right)\varepsilon^2\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ &\qquad = O(\varepsilon^{d+2}) \end{aligned} \tag{4.36}$$

et

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma^\varepsilon} q(\underline{y}) G(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{d}S_y &= \int_{\mathscr{S}} q(\underline{x}^0+\varepsilon\overline{y})\left(\frac{1}{\varepsilon}G^0(\overline{y}-\overline{x}) + O(1)\right)\varepsilon^2\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ &= p_{,i}(\underline{x}^0)\int_{\mathscr{S}} G^0(\overline{y}-\overline{x})n_i(\overline{y})\varepsilon\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \tag{4.37}$$

d'où

$$\begin{aligned}\tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}) + \int_{\Gamma^\varepsilon} \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x})\right) H^0(\underline{y}-\underline{x})\,\mathrm{d}S_y \\ = \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}^0+\varepsilon\overline{x}) + \int_{\mathscr{S}} \left(\tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}^0+\varepsilon\overline{y}) - \tilde{p}^\varepsilon(\underline{x}^0+\varepsilon\overline{x})\right) H^0(\overline{y}-\overline{x})\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ = -p_{,i}(\underline{x}^0)\int_{\mathscr{S}} G^0(\overline{y}-\overline{x})n_i(\overline{y})\varepsilon\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} + O(\varepsilon^2) \qquad (4.38)\end{aligned}$$

On en déduit que l'on peut résumer l'équation (4.20) à l'existence d'un opérateur intégral linéaire $\mathscr{L}_{\mathscr{S}}$, qui est $O(1)$, et tel que

$$\mathscr{L}_{\mathscr{S}}\tilde{p}^\varepsilon = O(\varepsilon) \qquad (4.39)$$

d'où on déduit que $\tilde{p}^\varepsilon = O(\varepsilon)$ et donc $d = 1$. Ainsi on peut chercher $\tilde{p}^\varepsilon$ sous la forme :

$$\tilde{p}^\varepsilon(\underline{y}) = \varepsilon P(\overline{y}) + o(\varepsilon) \qquad (4.40)$$

où le champ P (indépendant de ε) est solution de

$$P(\overline{x}) + \int_{\mathscr{S}} (P(\overline{y}) - P(\overline{x}))\, H^0(\overline{y}-\overline{x})\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} = -p_{,i}(\underline{x}^0)\int_{\mathscr{S}} G^0(\overline{y}-\overline{x})n_i(\overline{y})\,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \qquad (4.41)$$

où on reconnait l'équation intégrale de frontière associée au problème extérieur de l'équation de Laplace pour l'obstacle normalisé $\mathscr{B}$:

$$\left\{\begin{array}{ll} \Delta P = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \mathscr{B} \\ P_{,n} = -p_{,n}(\underline{x}^0) & \text{sur } \mathscr{S} \end{array}\right. \qquad (4.42)$$

Aussi le déplacement normal imposé sur la frontière étant défini par un déplacement constant on peut traiter ce problème, en notant $P(\overline{y}) = p_{,i}(\underline{x}^0)\mathscr{P}^i(\overline{y})$, par la résolution des trois problèmes indépendants de $\underline{x}^0$:

$$\left\{\begin{array}{ll} \Delta\mathscr{P}^i = 0 & \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \mathscr{B} \\ \mathscr{P}^i_{,n} = -\underline{e}_i \cdot \underline{n} & \text{sur } \mathscr{S} \end{array}\right. \qquad (4.43)$$

4.2.4 Fin du calcul par le champ adjoint

L'étude asymptotique du champ $\tilde{p}^\varepsilon$ sur Γ^ε étant terminée, on peut désormais calculer les deux intégrales nécessaires à l'évaluation du gradient topologique par la méthode de l'état adjoint (cf équation (4.12)).

Première intégrale

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma^\varepsilon} \hat{p}p_{,i}n_i \,\mathrm{d}\Gamma &= -\int_{B^\varepsilon} (\hat{p}p_{,i})_{,i} \,\mathrm{d}V = -\int_{B^\varepsilon} \hat{p}_{,i}p_{,i} + \hat{p}p_{,ii} \,\mathrm{d}V \\ &= \int_{B^\varepsilon} k^2\hat{p}p - \hat{p}_{,i}p_{,i} \,\mathrm{d}V \end{aligned} \tag{4.44}$$

d'où en première approximation,

$$\int_{\Gamma^\varepsilon} \hat{p}p_{,i}n_i \,\mathrm{d}\Gamma = \varepsilon^3|\mathscr{B}|(k^2\hat{p}p - \hat{p}_{,i}p_{,i})(\underline{x}^0) + o(\varepsilon^3) \tag{4.45}$$

Deuxième intégrale

$$\begin{aligned}\int_{\Gamma^\varepsilon} \tilde{p}^\varepsilon\hat{p}_{,i}n_i \,\mathrm{d}\Gamma &= \int_{\mathscr{S}} \varepsilon P(\overline{y})\hat{p}_{,j}(\underline{x}^0 + \varepsilon\overline{y})n_j(\overline{y})\varepsilon^2 \,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \\ &= \varepsilon^3\hat{p}_{,j}(\underline{x}^0)\int_{\mathscr{S}} P(\overline{y})n_j(\overline{y}) \,\mathrm{d}S_{\overline{y}} + o(\varepsilon^3) \\ &= \varepsilon^3\hat{p}_{,j}(\underline{x}^0)p_{,i}(\underline{x}^0)\int_{\mathscr{S}} \mathscr{P}^i n_j(\overline{y}) \,\mathrm{d}S_{\overline{y}} + o(\varepsilon^3) \end{aligned} \tag{4.46}$$

Ainsi en notant $\underline{\underline{B}}$ le tenseur de composantes

$$B_{ij} = \frac{1}{|\mathscr{B}|}\int_{\mathscr{S}} \mathscr{P}^i n_j(\overline{y}) \,\mathrm{d}S_{\overline{y}} \tag{4.47}$$

et $\underline{\underline{A}}$ le tenseur tel que $\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{I}} - \underline{\underline{B}}$ alors le gradient topologique est donné explicitement par la formule :

$$\mathcal{T}(\underline{x}^o) = \mathrm{Re}\left[(\hat{p}_{,i}A_{ij}p_{,j} - k^2p\hat{p})(\underline{x}^o)\right] \tag{4.48}$$

Calculer le champ de gradient topologique nécéssite alors uniquement de résoudre le problème direct et le problème adjoint sur le domaine sain. Ce que nous proposons de faire par la méthode des équations intégrales de frontière accélérée présentée dans les chapitres 2 et 3.

4.2.5 Sur la forme de l'obstacle

Jusqu'à maintenant les calculs ont été effectués pour des obstacles complètement rigides mais de forme quelconque. Dans le cas général, comme nous l'avons vu, le tenseur $\underline{\underline{A}}$ peut être calculé par la résolution de trois problèmes de petites tailles (4.43). Dans le cas où l'obstacle est supposé sphérique ces problèmes peuvent être résolus analytiquement.

Obstacle de forme sphérique : résolution analytique

Rappelons qu'en coordonnées sphériques le Laplacien s'écrit :

$$\Delta p(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial p}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial p}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 p}{\partial\phi^2} \tag{4.49}$$

Les solutions de l'équation homogène $\Delta p = 0$ décroissantes à l'infini sont de la forme :

$$p(r,\theta,\phi) = \sum_{\ell,m}\left[\gamma_{\ell,m}\frac{1}{r^{\ell+1}}P_\ell^m(\cos\theta)\cos(m\phi) + \eta_{\ell,m}\frac{1}{r^{\ell+1}}P_\ell^m(\cos\theta)\sin(m\phi)\right] \tag{4.50}$$

Or pour chacun des trois problèmes de (4.43) les conditions aux limites sur la sphère unité sont successivement :

$$p^i_{,n} = -\frac{\partial p}{\partial r} = (-\underline{e}_i)\cdot(-\underline{e}_r) \text{ sur } \mathscr{S}, \text{ pour } i = 1,2,3 \tag{4.51}$$

Soit les trois conditions :

$$\begin{array}{rcccl} p^1_{,n} & = & \sin\theta\cos\phi & \text{sur} & \mathscr{S} \\ p^2_{,n} & = & \sin\theta\sin\phi & \text{sur} & \mathscr{S} \\ p^3_{,n} & = & \cos\theta & \text{sur} & \mathscr{S} \end{array} \tag{4.52}$$

d'où les solutions de notre problème, pour lesquels les seuls coefficients non nuls de (4.50) sont :

$$\begin{array}{ll} \gamma^1_{\ell,m} = -\frac{1}{2}\delta_{m1}\delta_{\ell 1} & \forall\ (\ell,m) \\ \eta^2_{\ell,m} = -\frac{1}{2}\delta_{m1}\delta_{\ell 1} & \forall\ (\ell,m) \\ \gamma^3_{\ell,m} = \frac{1}{2}\delta_{m0}\delta_{\ell 1} & \forall\ (\ell,m) \end{array} \tag{4.53}$$

d'où

$$\begin{array}{rcl} p^1(r,\theta,\phi) & = & \frac{1}{2r^2}\sin\theta\cos\phi \\ p^2(r,\theta,\phi) & = & \frac{1}{2r^2}\sin\theta\sin\phi \\ p^3(r,\theta,\phi) & = & \frac{1}{2r^2}\cos\theta \end{array} \tag{4.54}$$

ainsi le tenseur $\underline{\underline{B}} = -\frac{1}{2}\underline{\underline{I}}$ et le tenseur $\underline{\underline{A}} = \frac{3}{2}\underline{\underline{I}}$. Le champ de gradient topologique est donc calculé dans ce cas par la formule

$$\mathcal{T}(\underline{x}^o) = \mathrm{Re}\left[\frac{3}{2}\hat{p}_{,i}p_{,i} - k^2 p\hat{p}\right](\underline{x}^o) \tag{4.55}$$

4.3 Calcul numérique du gradient topologique

Comme nous venons de le voir, le calcul du gradient topologique nécessite le calcul de la pression et de son gradient à l'intérieur du domaine exploré, pour deux problèmes

aux conditions aux limites différentes, le problème direct et le problème adjoint. Sauf pour des situations géométriques particulières, il n'est pas possible de résoudre analytiquement de tels problèmes. Il sera donc nécessaire de faire appel à une méthode numérique.

Vu que la connaissance des champs n'est utile qu'à l'intérieur du domaine, les méthodes numériques de domaine tels que les différences finies ou les éléments finis viennent naturellement à l'esprit. Toutefois nous avons choisi de traiter ce problème par la méthode des éléments de frontière, et ce pour deux raisons,

- il est connu que le calcul numérique du gradient est plus précis par la méthode des éléments de frontière,
- la résolution accélérée utilisant la FMM permet de traiter des problèmes de dimensions grandes par rapport à la longueur d'onde et de calculer les champs simultanément en un grand nombre de points intérieurs.

Ainsi, la méthode présentée au chapitre 3 va servir pour calculer le champ de gradient topologique.

4.4 Présentation des résultats

Rappelons notre heuristique : « le gradient topologique prend des valeurs négatives quand la fonction coût à tendance à décroître. Nous supposons que cela correspond à de la présence d'obstacles à détecter ».

Cette « intuition » va donc être testée sur quelques cas afin d'être validée et de discuter le type d'informations qui peuvent être tirées d'un tel calcul dans le cadre de la résolution du problème inverse.

4.4.1 Un premier cas test

Le premier cas test que nous présentons est celui de la détection d'un obstacle sphérique inclus dans un domaine cubique. Le cube, centré sur l'origine, est défini par $\Omega(L) = \{\, |\xi_i| \leq L \;\; (i = 1, 2, 3) \,\}$ avec $L = 8a$ où a est une longueur de référence. L'obstacle, de rayon $0.8a$, est placé en $(2a,\, 3a,\, 2a)$. Les données mesurées sont simulées numériquement et ce pour trente expériences. Pour chacune on applique une excitation uniforme, de longueur d'onde $\lambda = 3a$, sur un petit disque $S_q \in S$ $(1 \leq q \leq 30)$ et la pression acoustique est mesurée sur toute la frontière du cube : $S^{\text{obs}} = S$ (i.e. en chaque nœud). Chaque face du cube Ω comporte cinq émetteurs S_q de rayon a disposés selon le schéma présenté par la (figure 4.3).

Le gradient topologique est calculé pour chaque expérience, le champ total présenté en est la somme. Autrement dit, la fonction coût pour le problème inverse est définie

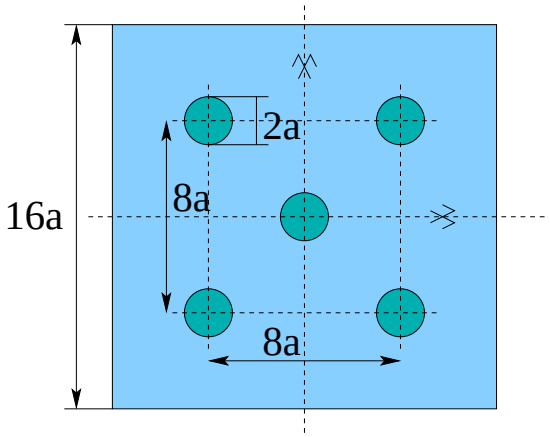


Figure 4.3: *Disposition des émetteurs S_q sur chaque face du cube $\Omega(8a)$.*

par

$$\mathcal{J}(\Omega^c) = \frac{1}{2}\sum_{q=1}^{30}\int_S |p^c - p_q^{\text{obs}}|^2 \, \mathrm{d}\Gamma_\xi \tag{4.56}$$

où p_q^{obs} est la pression mesurée pour l'émetteur q. Les calculs ont été effectués pour les parmètres « optima » du chapitre 3, c'est à dire que le maillage, composé d'éléments triangulaires, comporte 15 nœuds par longueur d'onde et que $C = 4$ dans la formule (3.64), la table 4.1 indique le nombre de DDLs utilisés.

Afin de faciliter la lecture des cartes de gradient topologique nous présentons une version seuillée $\hat{\mathcal{T}}$ de $\mathcal{T}$, définie par :

$$\hat{\mathcal{T}}(\underline{x}) = \begin{cases} \mathcal{T}(\underline{x}) \, , & \mathcal{T} \leq e\,\mathcal{T}_{\min} \\ 0 \, , & \mathcal{T} > e\,\mathcal{T}_{\min} \end{cases} \qquad \text{avec } e = 0.25. \tag{4.57}$$

où $\mathcal{T}_{\min} = \min_x \mathcal{T}(\underline{x})$. Le champ $\mathcal{T}(\underline{x})$ est calculé en supposant l'obstacle évanouissant $B^\varepsilon(\underline{x})$ de forme sphérique, c'est à dire par la formule (4.55).

Le champ de gradient topologique est calculé sur une grille régulière, centrée sur l'origine, de $100\times100\times100$ points à l'intérieur du domaine cubique $\Omega(8a)$. Dans chaque direction le pas est de $\Delta x_o = 16a/101$. Les résultats sont présentés dans trois plans

Taille du cube	Cube		Obstacle		Total	
	Elements	nœuds	Elements	nœuds	Elements	nœuds
$2L = 16a$	76800	38402	336	170	77136	38572
$2L = 32a$	307200	153602	336	170	307536	153772

Tableau 4.1: *Nombre d'élements et de DDLs des maillages de frontière.*

orthogonaux passant par le centre de l'obstacle, lui même figuré par un cercle blanc. Les zones où le gradient topologique prend les valeurs les plus négatives sont colorées en rouge (en noir dans la version noir et blanc). Des surfaces d'isovaleurs du gradient

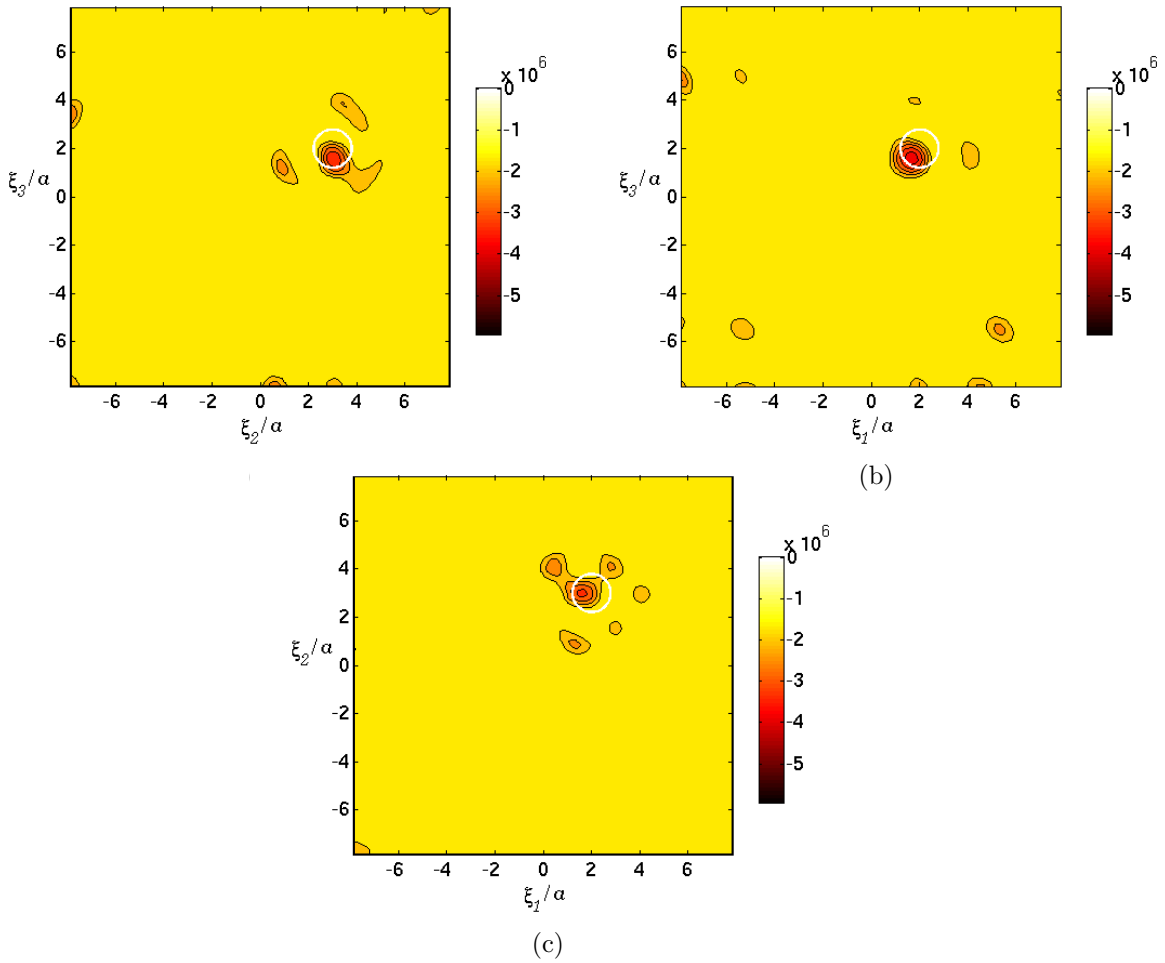


Figure 4.4: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

topologique pour $\mathcal{T} = 0.65\mathcal{T}_{\text{min}}$ et pour $\mathcal{T} = 0.75\mathcal{T}_{\text{min}}$ sont présentées respectivement à la figure 4.5 et à la figure 4.6. Ces graphiques indiquent que les valeurs de $\mathcal{T}(\underline{x})$ proches de $\mathcal{T}_{\text{min}}$ ne sont rencontrées que dans un voisinage de l'obstacle « réel » et complétent ainsi utilement les sections planes telles que celles de la figure 4.4.

Ce résultat est positif. En effet, on remarque que les zones où le gradient topologique prend les valeurs les plus basses se trouvent localisée approximativement au même endroit que l'obstacle. Par ailleurs, le contraste entre ces valeurs et celles prises

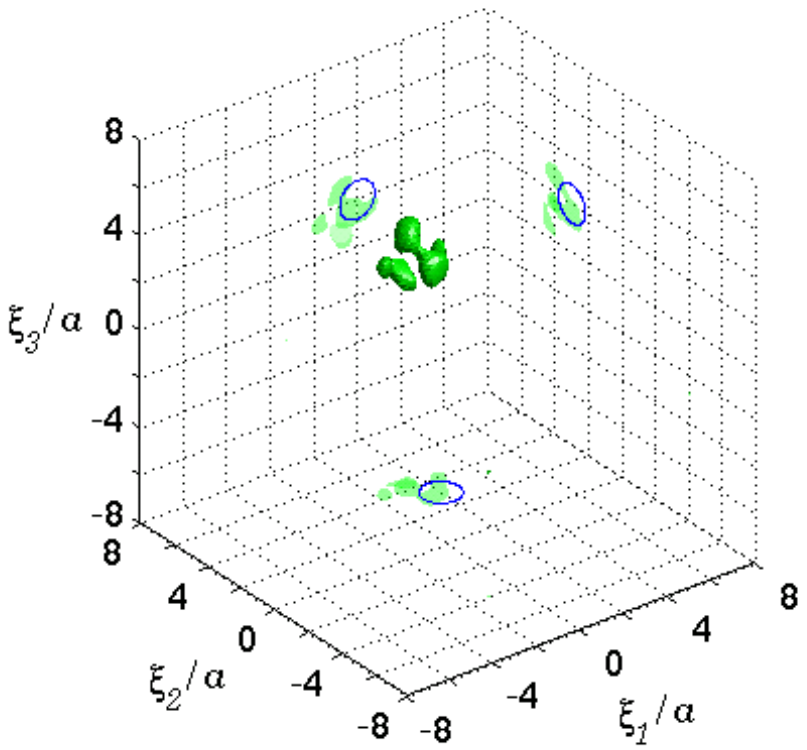


Figure 4.5: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.65\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

dans le reste du domaine est assez important. L'information donnée par le gradient topologique semble ainsi exploitable pour donner une première localisation approximative de l'obstacle. Cette information est exploitable en elle même ou pour initialiser un algorithme de localisation utilisant la minimisation d'un fonction coût, par exemple par une méthode utilisant le gradient.

Le but que nous nous fixons maintenant est, partant de cet exemple, de tester la « réaction » du gradient topologique à la variation de certains paramètres du calcul. Nous testerons successivement l'accroissement de la longueur d'onde, les variations de dimension de l'obstacle, l'accroissement de la taille du domaine (ce qui revient à diminuer la longueur d'onde), l'influence de la position, de la forme de l'obstacle, et enfin l'influence du bruit sur les données mesurées.

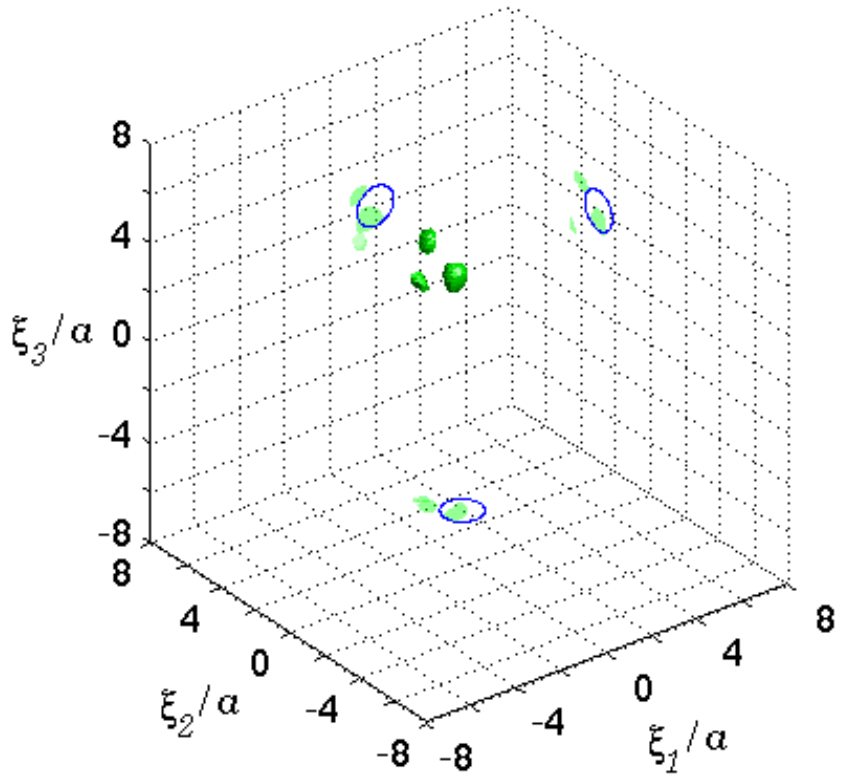


Figure 4.6: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.75\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

4.4.2 Accroissement de la longueur d'onde

Le premier paramètre pour lequel nous testons l'effet de ses variations est donc la longueur d'onde de la source. Sont testées successivement les longueurs d'ondes $6a$ (figure 4.7), $9a$ (figure 4.8) puis $12a$ (figure 4.9). Dans le premier cas, le maillage est le même que dans l'exemple présenté pour une longueur d'onde de $3a$ pour les deux derniers cas le maillage comporte deux fois moins d'éléments.

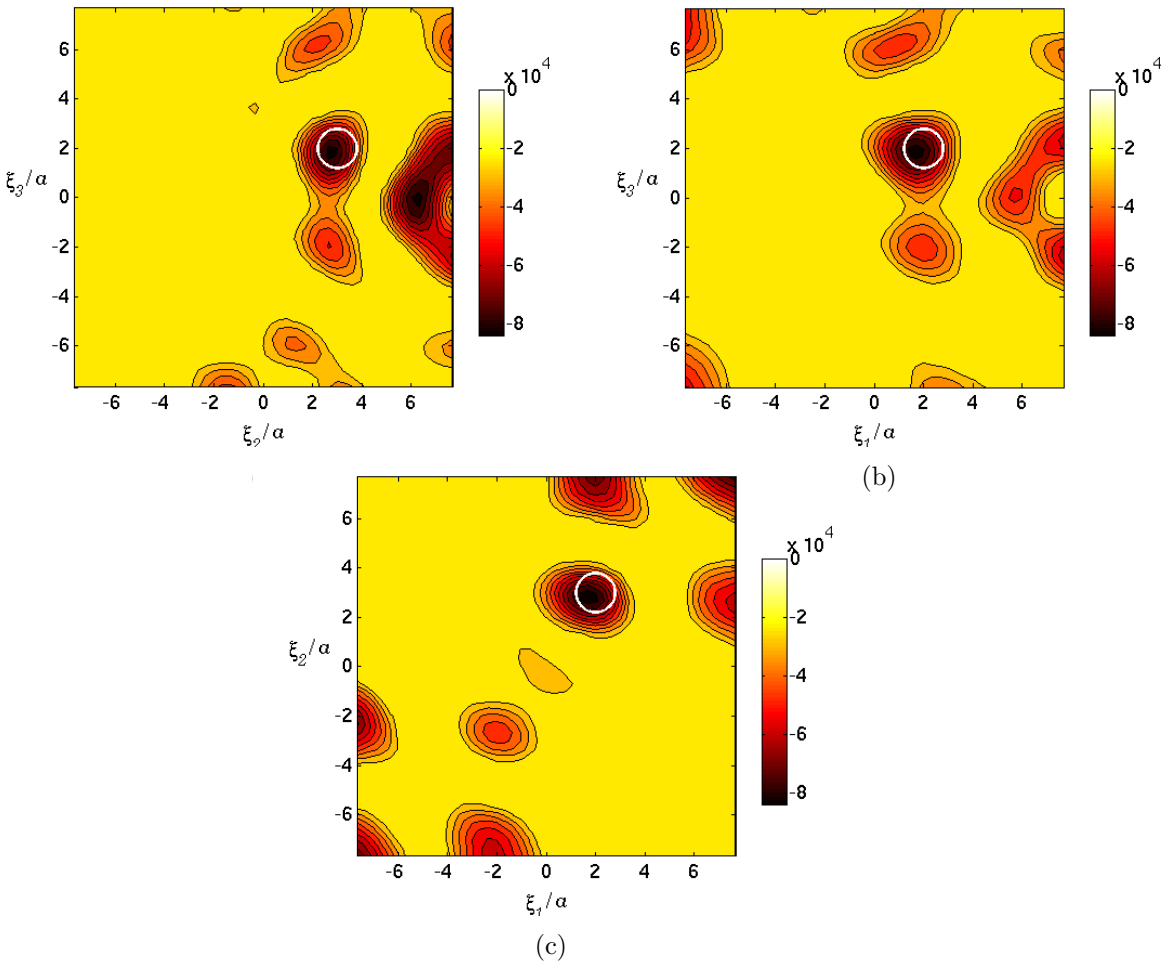


Figure 4.7: *Identification, à une longueur d'onde* $6a$*, d'un obstacle rigide sphérique de rayon* $0.8a$ *dans le domaine* $\Omega(8a)$ *: champ de gradient topologique seuillé* $\hat{\mathcal{T}}$ *dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a)* $\xi_1 = 2a$ *(b)* $\xi_2 = 3a$ *(c)* $\xi_3 = 2a$

Quelles conclusions pouvons-nous tirer des ces observations ? Tout d'abord, pour toutes ces longueurs d'onde il y a une zone où la valeur du gradient topologique est négative dans la région de l'obstacle. Par ailleurs, et ceci est logique, cette zone grandit avec la longueur d'onde, les grandes longueurs d'ondes ayant tendance à « étaler » l'obstacle. Si l'on regarde séparément ces résultats on remarque que dans les cas $6a$ et $12a$ le contraste entre les zones entourant l'obstacle et le reste du domaine est assez important. On retrouve alors les résultats obtenus dans le cas $3a$ qui sont plutôt positifs quant à la détectabilité de l'objet. En revanche, ce contraste est moins bon dans le cas $9a$ et nous l'expliquons difficilement. Sommes nous en présence d'un mode propre du domaine qui vient « parasiter » les résultats ? Cette piste que nous n'avons,

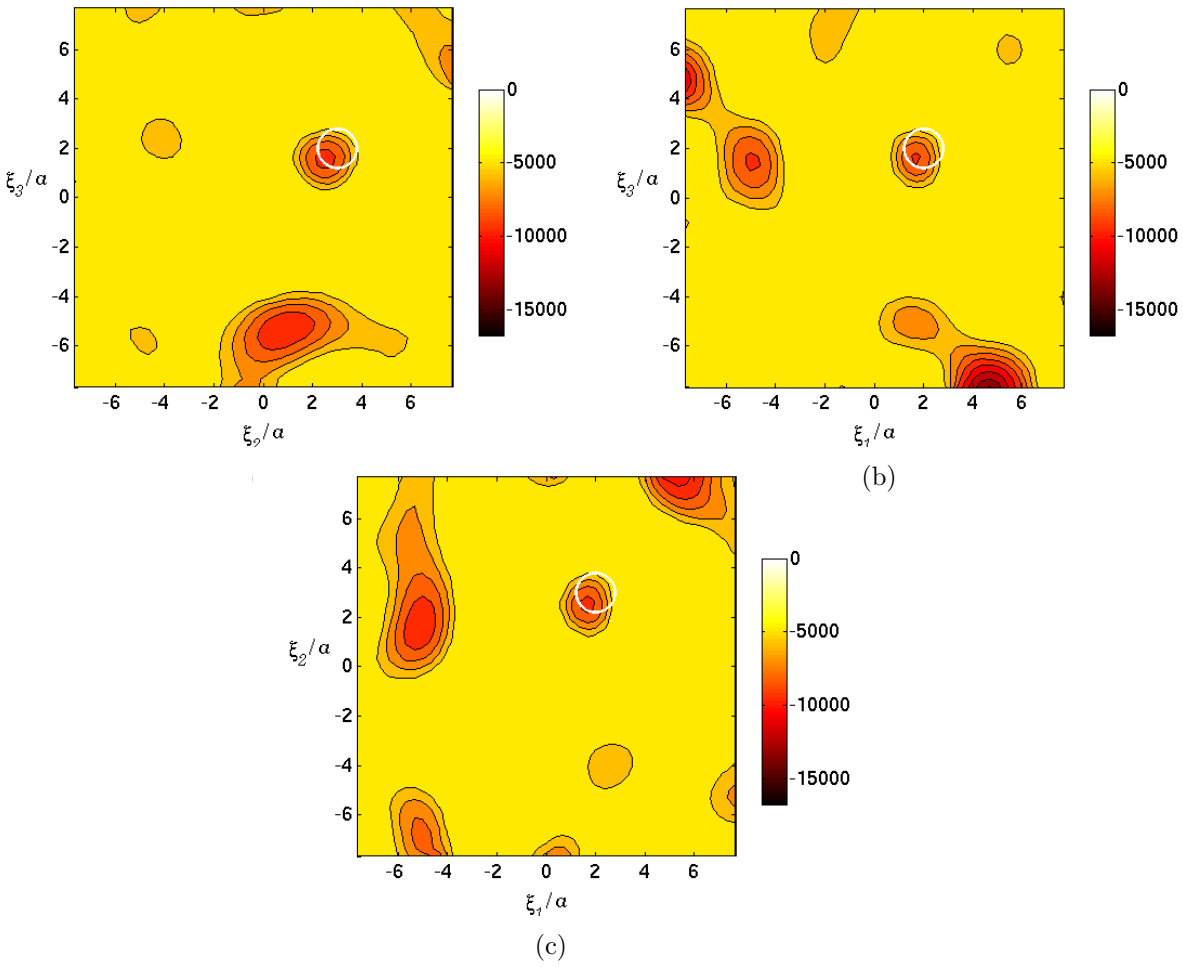


Figure 4.8: *Identification, à une longueur d'onde $9a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

malheureusement, pas eu le temps de suivre mériterait sûrement plus d'attention.

On peut considérer ces variations de longueurs d'onde comme une diminution de la taille de l'obstacle. Mais celle-ci s'accompagne alors aussi de la diminution de la taille du domaine. Le paramètre suivant que nous avons donc testé est l'influence de la taille de l'obstacle, les dimensions du domaine et la longueur d'onde restant constants.

4.4.3 Variations de la taille de l'obstacle

Nous présentons dans cette section quatre résultats. Les deux premiers sont pour des obstacles plus petits que celui du premier cas (présenté à la section 4.4.1), le rayon

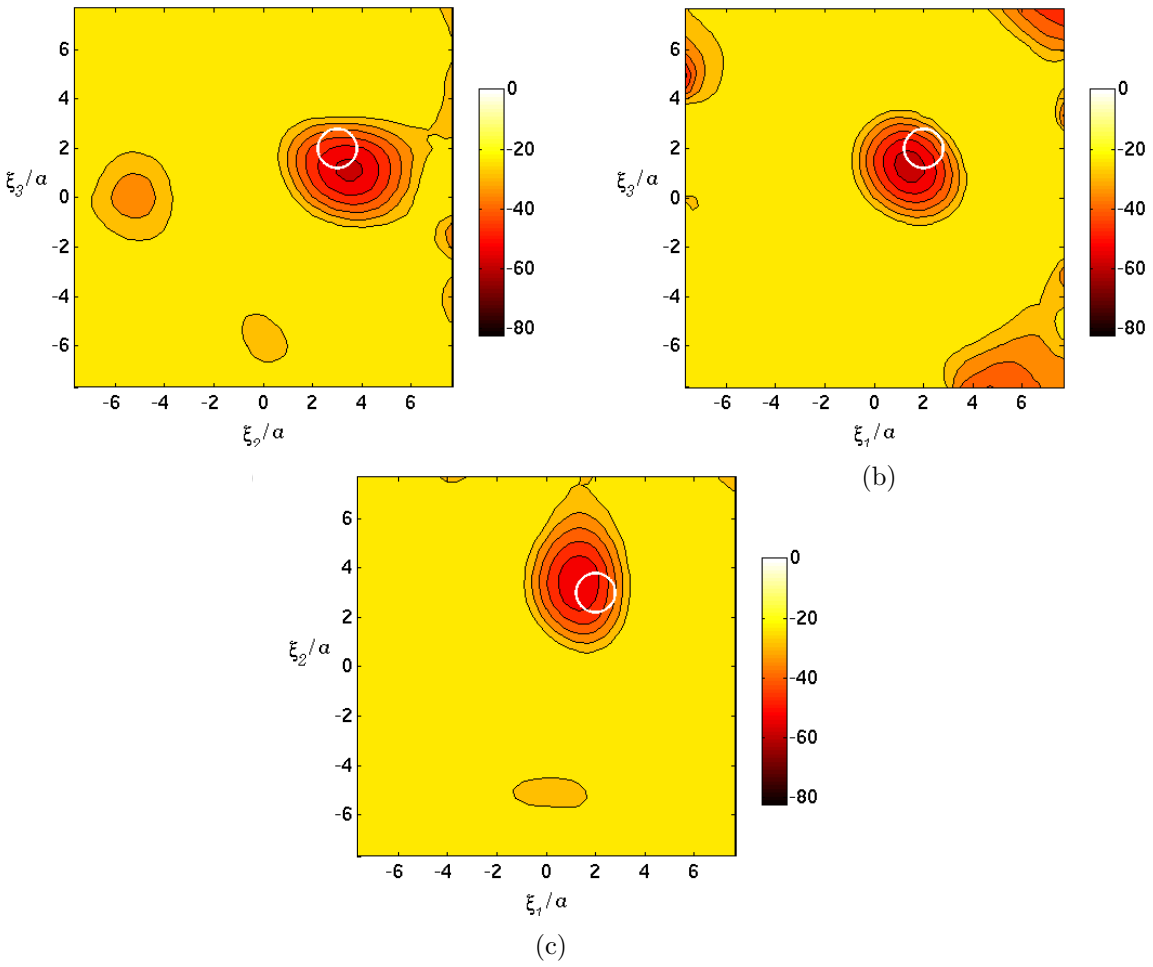


Figure 4.9: *Identification, à une longueur d'onde* $12a$*, d'un obstacle rigide sphérique de rayon* $0.8a$ *dans le domaine* $\Omega(8a)$ *: champ de gradient topologique seuillé* $\hat{\mathcal{T}}$ *dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a)* $\xi_1 = 2a$ *(b)* $\xi_2 = 3a$ *(c)* $\xi_3 = 2a$

de l'obstacle prenant successivement les valeurs $0.4a$ (figure 4.10) puis $0.2a$ (figure 4.11). Les deux cas suivants exposés correspondent à des obstacles plus grands, $1.2a$ (figure 4.12) puis $1.6a$ (figure 4.13).

A la vue de ces deux premiers résultats, nous sommes amenés à tirer les mêmes conclusions que précédemment, à savoir que la détectabilité semble bonne et que la zone du « puits » de gradient topologique doit en grande partie sa taille à la longueur d'onde de test.

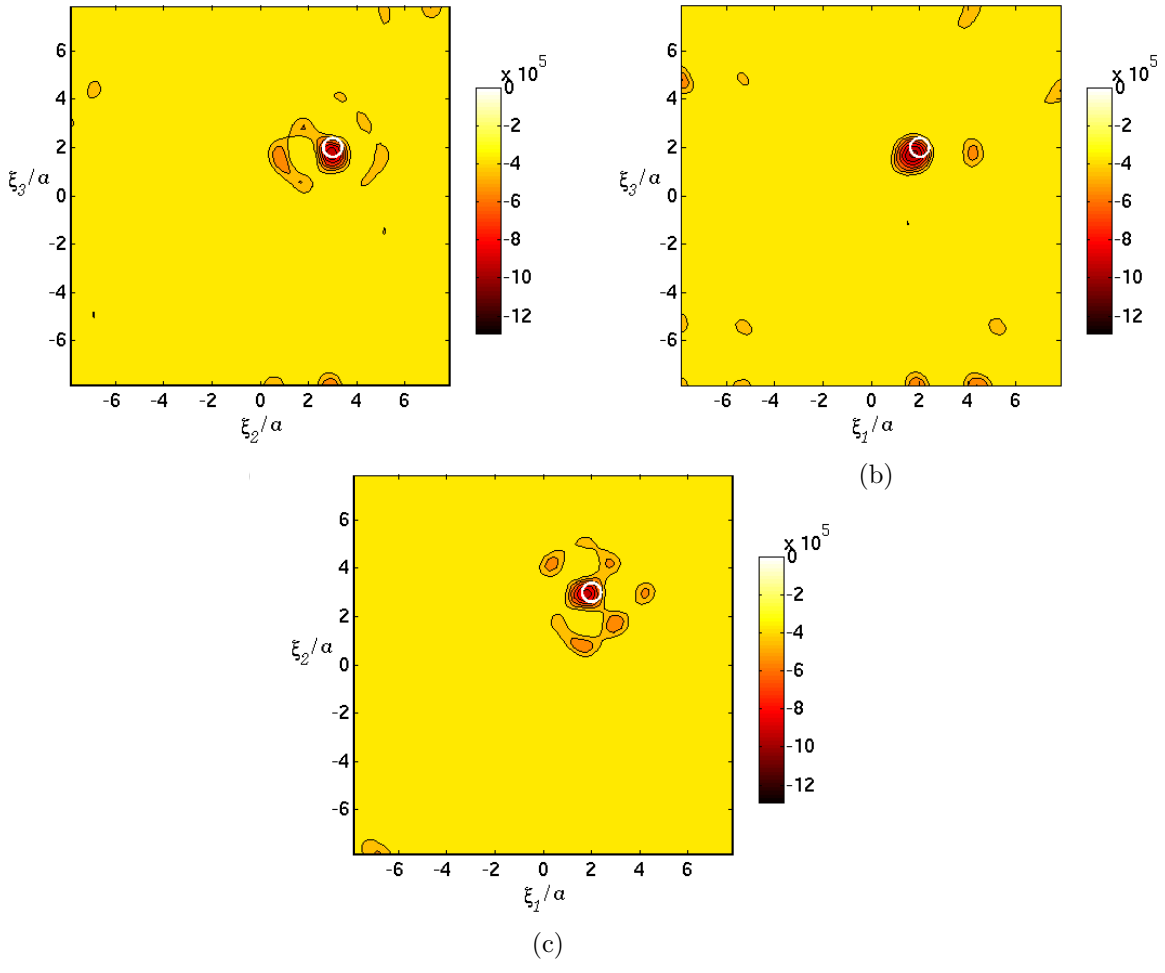


Figure 4.10: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.4a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passants par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

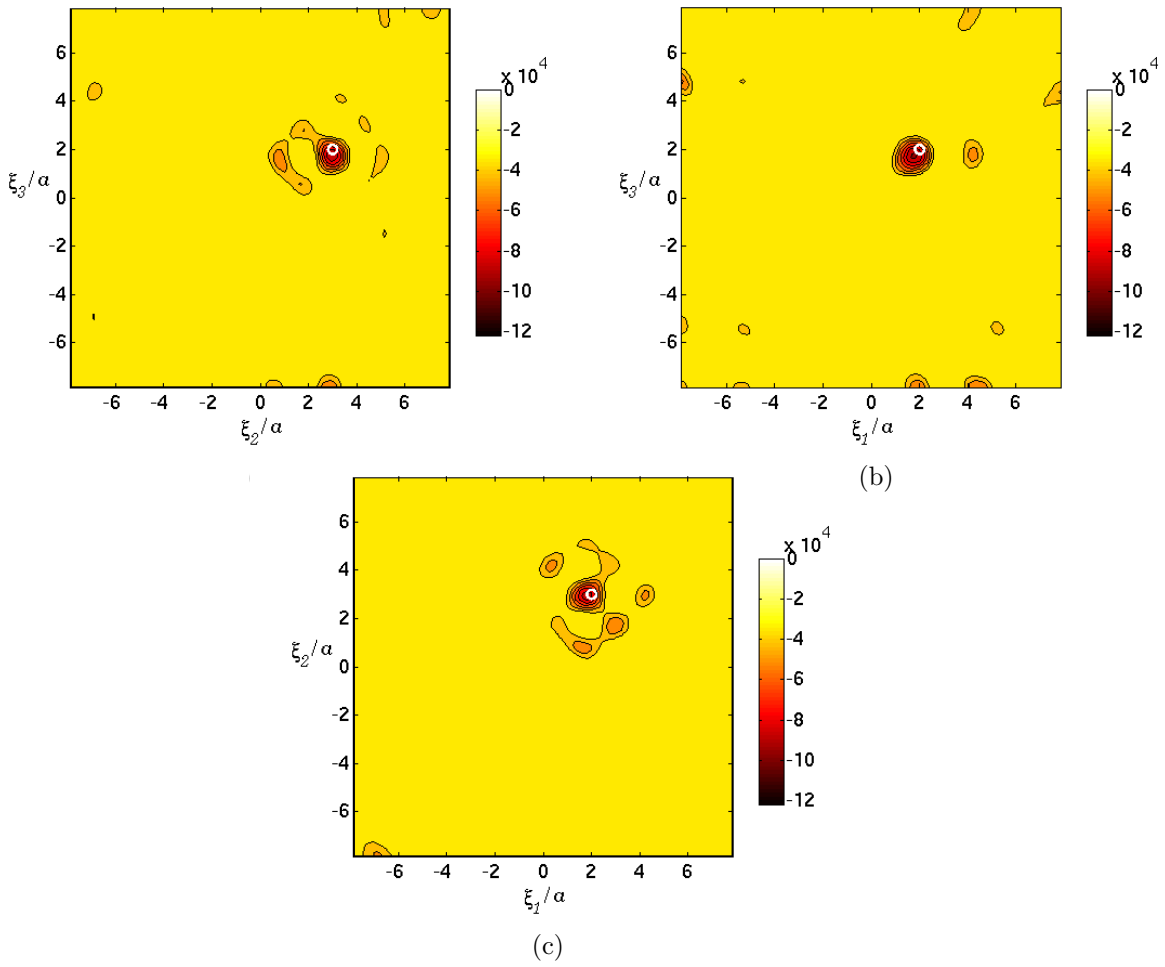


Figure 4.11: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.2a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

Malheureusement les deux calculs pour des obstacles dont le diamètre s'approche de la longueur d'onde ou même la surpasse donnent de bien moins bons résultats. N'ayant pas pu à ce jour analyser ce phénomène, nous ne pouvons qu'emettre des hypothèses. Sommes nous en présence d'un mode propre du domaine qui viendrait perturber nos résultats (hypothèse déjà émise précédemment) ? Sommes nous en présence d'un mode propre fictif, c'est à dire un mode propre de l'obstacle, dû à l'utilisation d'équations intégrales de frontières ? Si le calcul des modes du domaine est complexe, en revanche nous pouvons calculer analytiquement les fréquences propres de l'obstacle puisqu'il est sphérique.

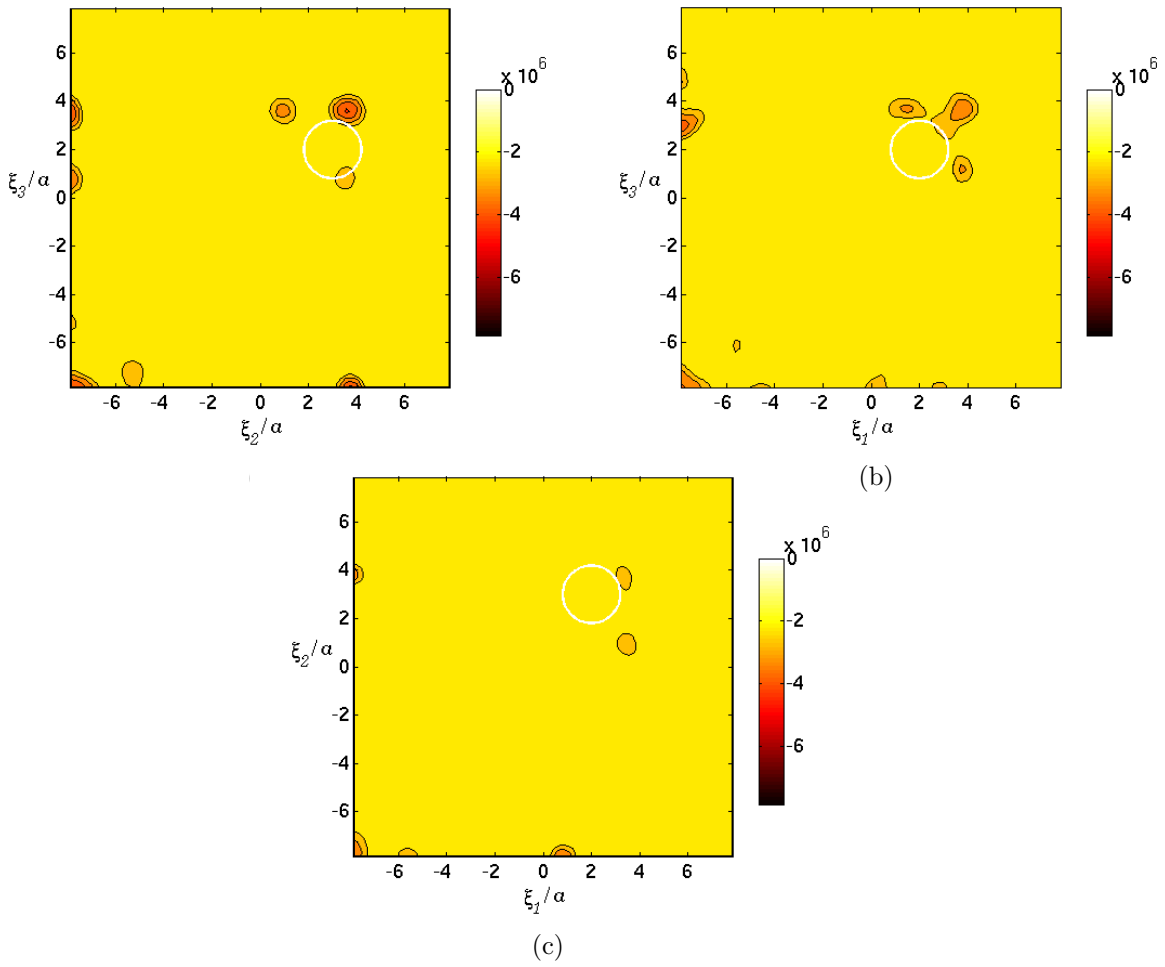


Figure 4.12: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $1.2a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

Fréquences propres de l'obstacle

Les modes propres acoustiques d'un domaine sphérique sont connus (voir par exemple [50]). Paramétrés par les indices m et n, ils s'écrivent en coordonnées sphériques :

$$p_{nm}(r,\theta,\phi) = j_n(kr)P_n^m(cos\theta)e^{\pm im\phi} \tag{4.58}$$

où k désigne le nombre d'onde. Le problème, associé à celui de l'obstacle rigide inclus dans un domaine, susceptible de faire apparaître des valeurs propres fictives dans la résolution par équations intégrales de frontière est celui d'un sphère « molle » (autrement dit de pression nulle sur sa surface). Ainsi les fréquences propres fictives, notées

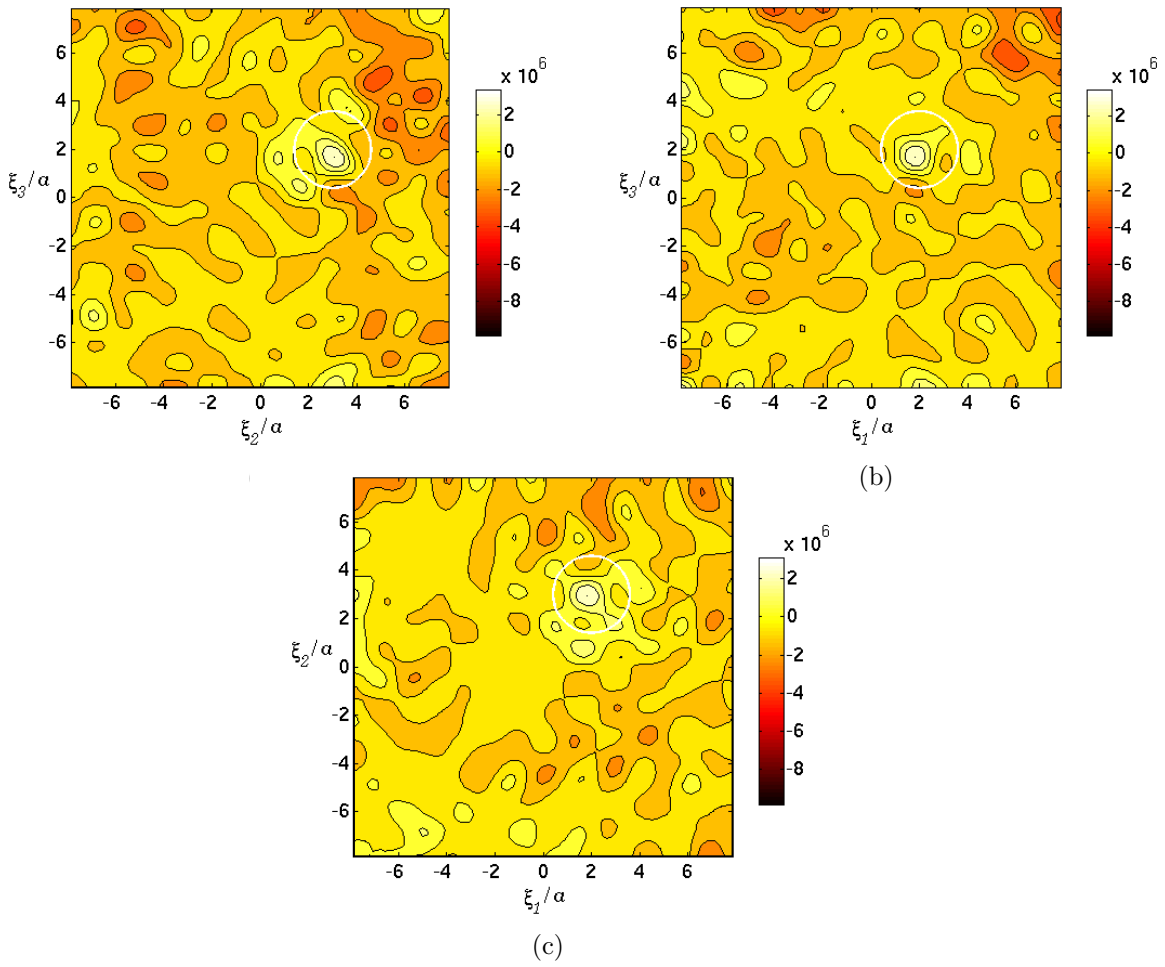


Figure 4.13: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $1.6a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique $\mathcal{T}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

f_l, pour un obstacle sphérique de rayon ρ sont données par les zéros de l'équation :

$$j_n(\frac{2\pi f_l}{c}\rho) = 0 \tag{4.59}$$

Ou encore, afin d'obtenir une information plus cohérente avec nos paramètres, les longueurs d'onde propres fictives, notées λ_l, sont les racines de l'équation :

$$j_n(\frac{2\pi}{\lambda_l}\rho) = 0 \tag{4.60}$$

En prenant les résultats tabulés [50] on obtient pour les $\frac{\lambda_l}{\rho}$, $j$ième racine de j_n :

	j=1	j=2	j=3	j=4	j=5
n=0	2	1	0.6667	0.5	0.4
n=1	1.3983	0.8133	0.5762	0.4466	0.3648
n=2	1.0901	0.6908	0.5098	0.4049	0.3361
n=3	0.8991	0.6031	0.4587	0.3712	0.3122
n=4	0.7678	0.5368	0.4178	0.3433	0.2918

Le premier mode propre fictif de l'obstacle correspond donc à une longueur d'onde de 2ρ (soit le diamètre de l'obstacle). Ce résultat pourrait donc expliquer la dégradation de nos calculs pour des obstacles dont le diamètre s'approche de la longueur d'onde. Nous n'avions pas pris en compte ce phénomène lors de nos développements, néanmoins des méthodes existent afin d'éviter la présence de valeurs propres fictives [60, 17]. Il pourrait donc être utile, lors d'études ultérieures, d'effectuer des calculs avec ces nouvelles formulations afin de tester si c'est bien la présence de ces valeurs propres fictives qui vient perturber les résultats.

4.4.4 Accroissement de la taille du domaine

On remarque toutefois qu'en doublant la taille du domaine $\Omega(16a)$, les résultats restent bons pour un obstacle de rayon $0.8a$ (figures 4.15, 4.14 et 4.16) et que pour un obstacle de rayon $1.2a$, les zones où le gradient topologique prend ses valeurs les plus négatives se concentrent sur la frontière de l'obstacle (figures 4.17, 4.18 et 4.19). Ce résultat flagrant ici est dû au fait qu'ailleurs le gradient topologique prend des valeurs plus élévées. Mais en y regardant de plus près, ceci était déjà observable dans le cas du domaine $\Omega(8a)$ mais alors peut-être perturbé par des effets de bords.

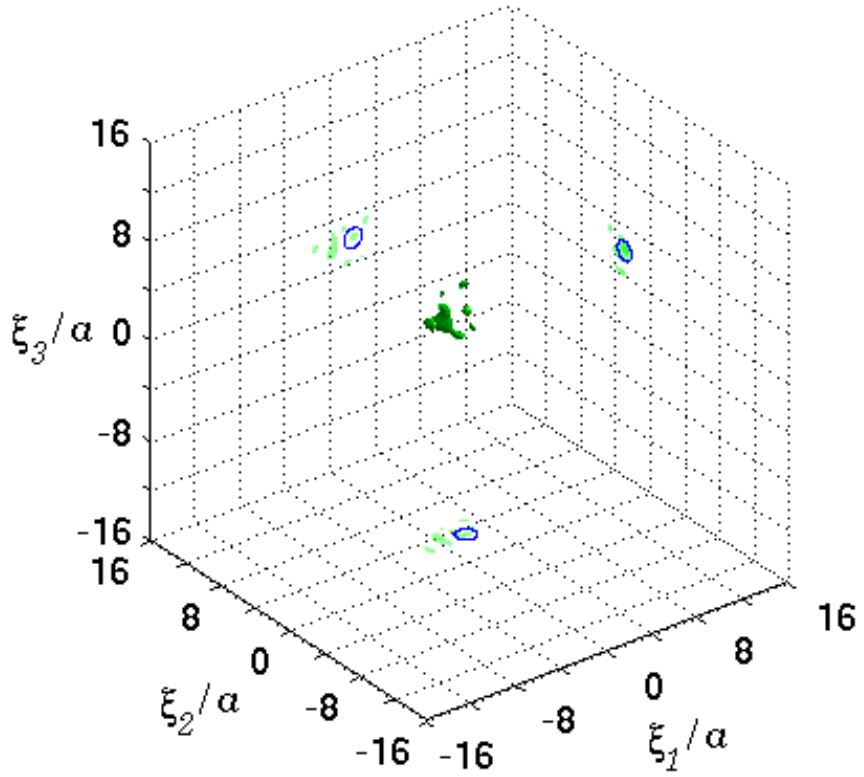


Figure 4.14: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.55\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

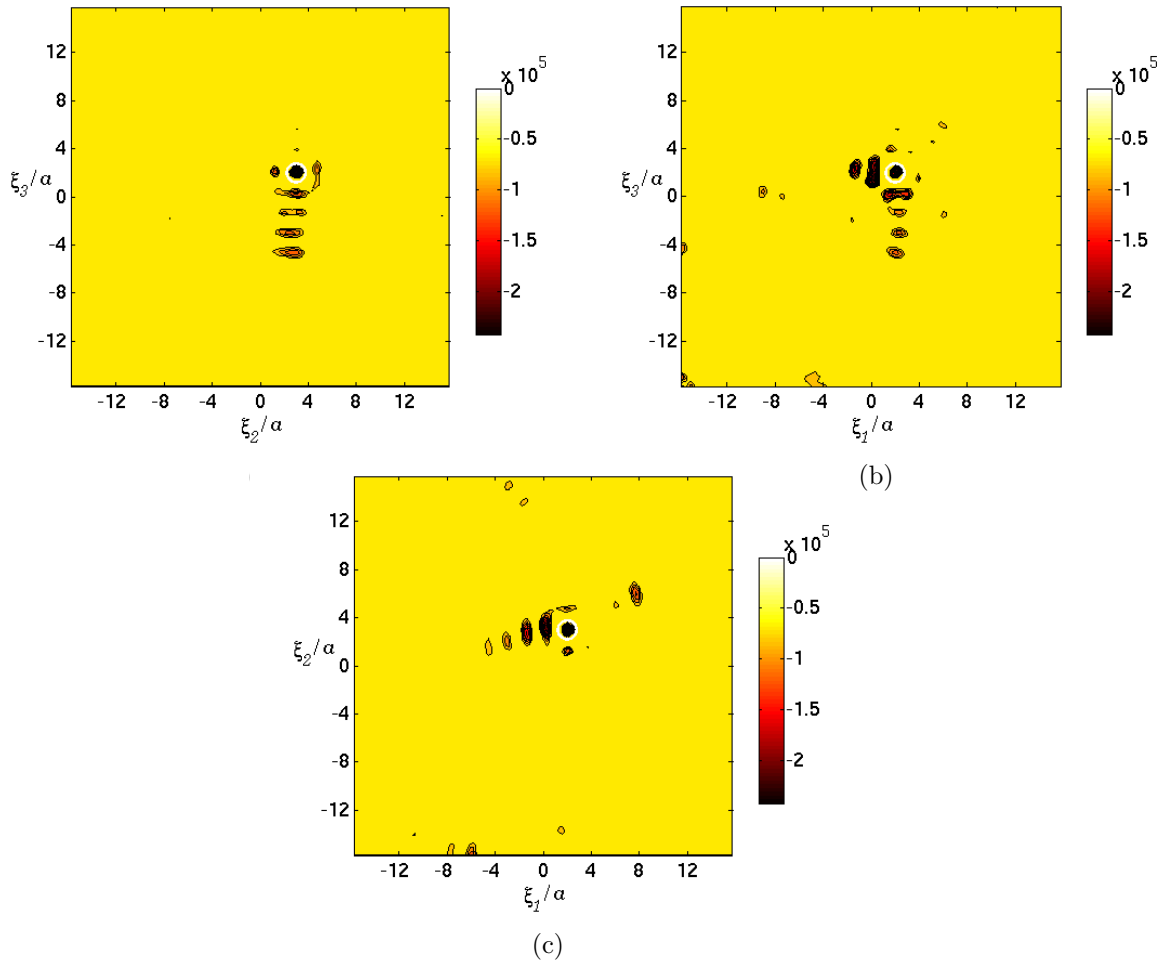


Figure 4.15: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

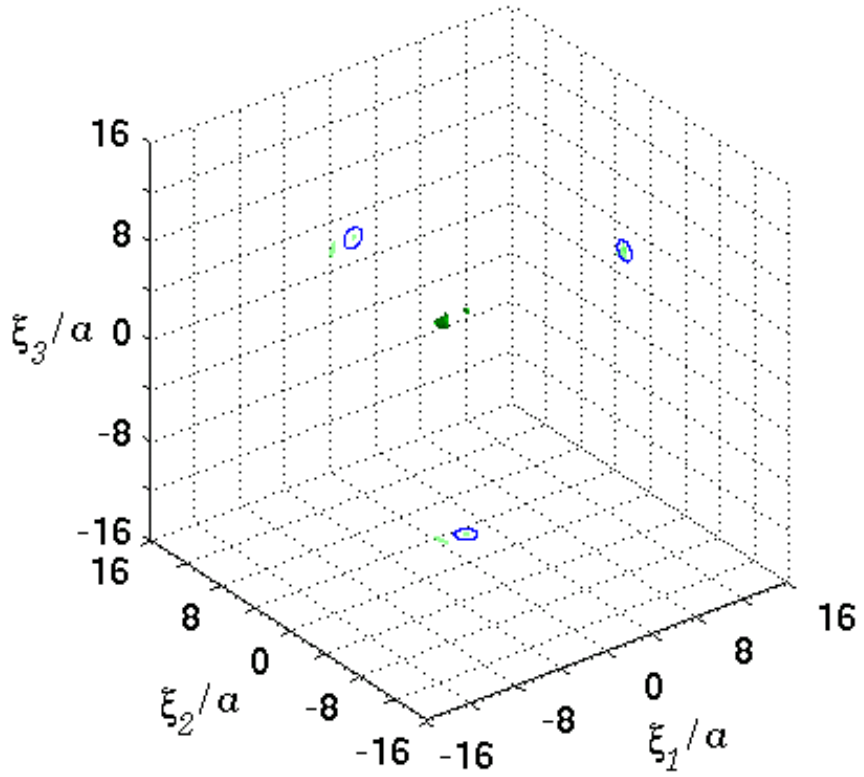


Figure 4.16: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.75\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

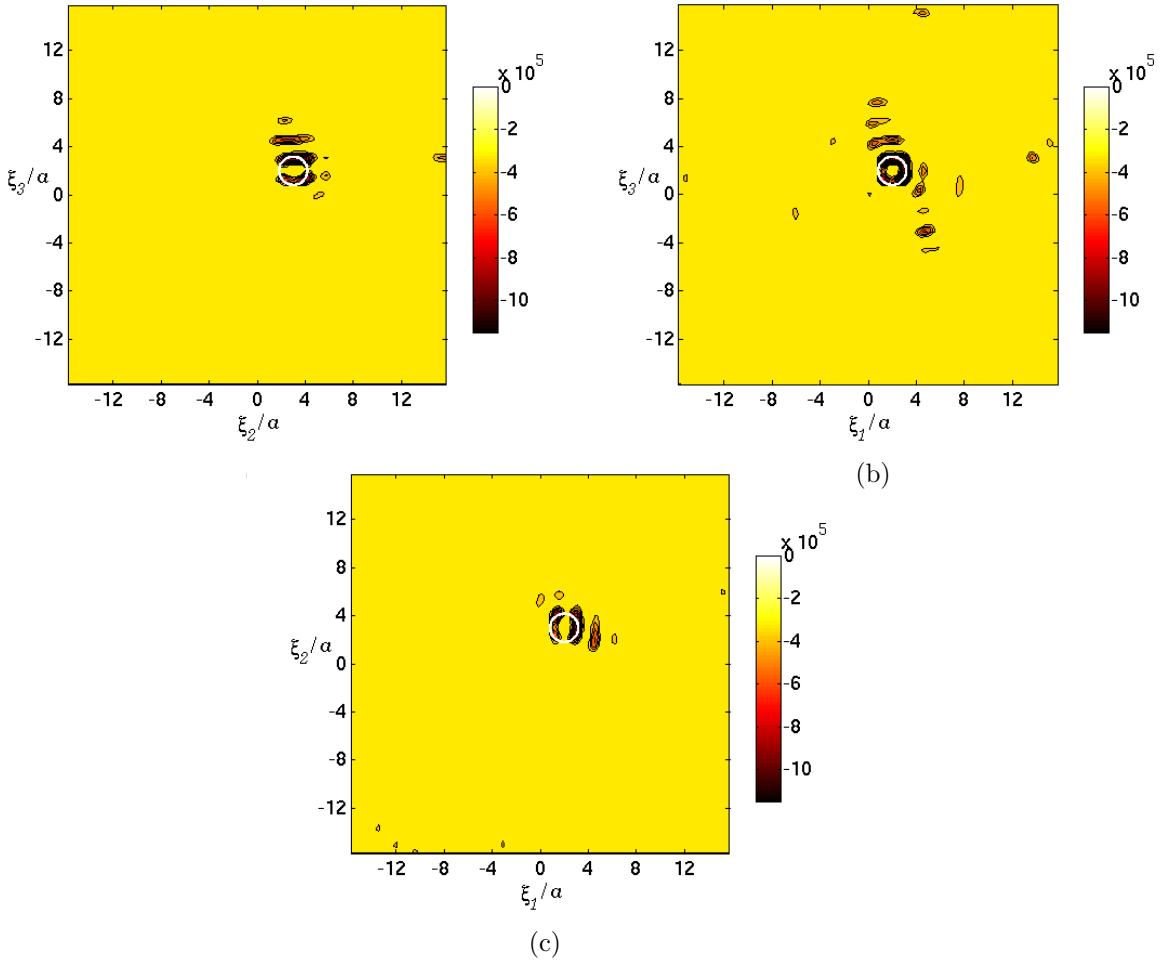


Figure 4.17: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $1.2a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

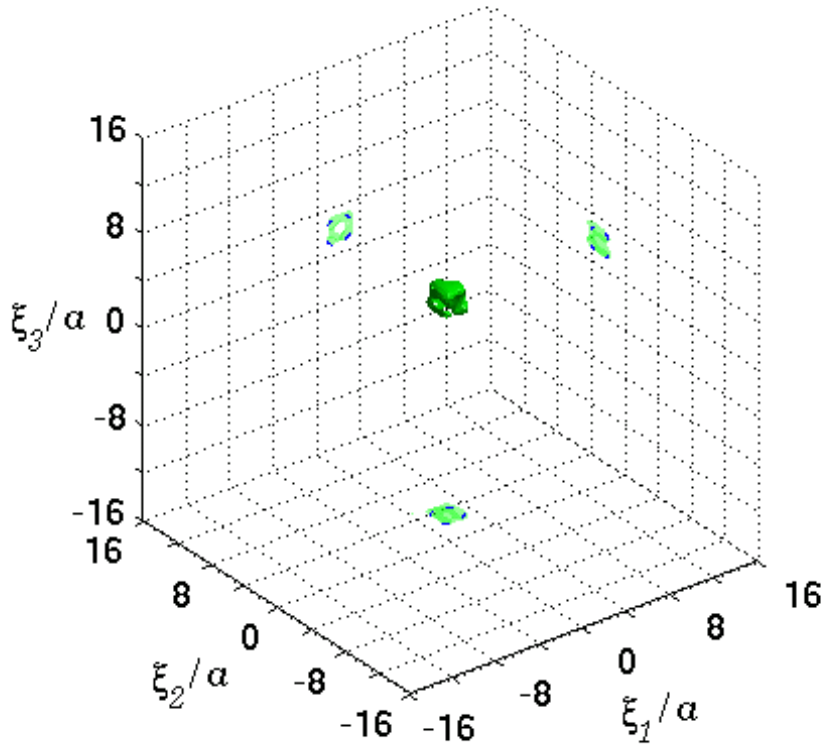


Figure 4.18: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $1.2a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.55\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

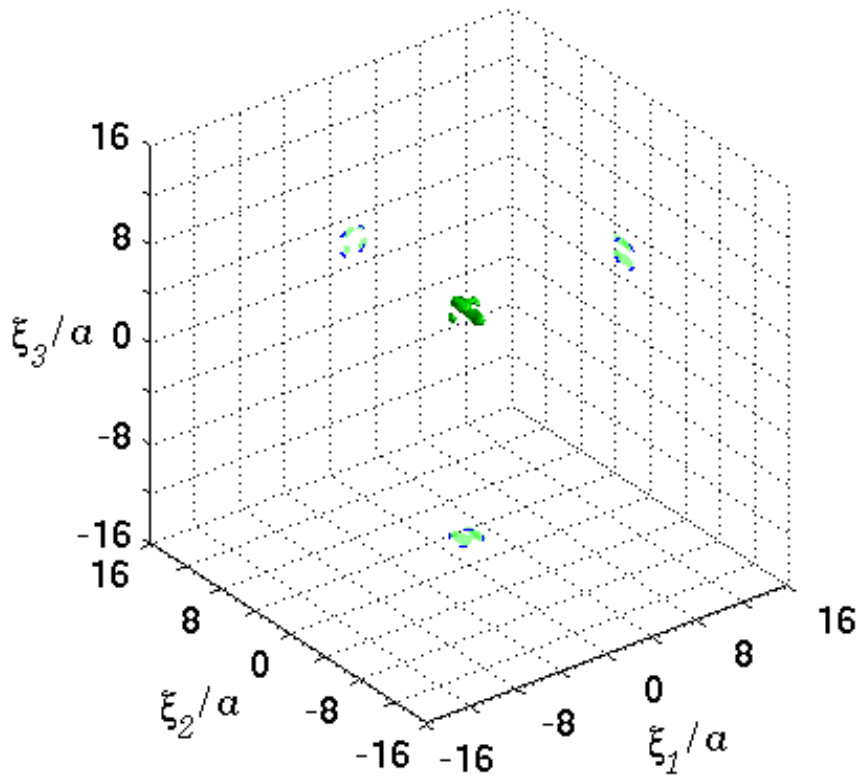


Figure 4.19: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique rigide de rayon $1.2a$ dans le domaine $\Omega(16a)$: isovaleur $\mathcal{T} = 0.75\mathcal{T}_{min}$ du champ de gradient topologique*

4.4.5 Variations de la position de l'obstacle

Le point suivant sur lequel on peut s'interroger est l'influence de la position de l'obstacle sur sa détectabilité. Notamment, que se passe-t-il lorsqu'il s'approche des limites du domaine ? Nous avons donc testé, pour un obstacle de rayon $0.8a$, différentes positions de plus en plus proches du bord du domaine, voire d'un coin.

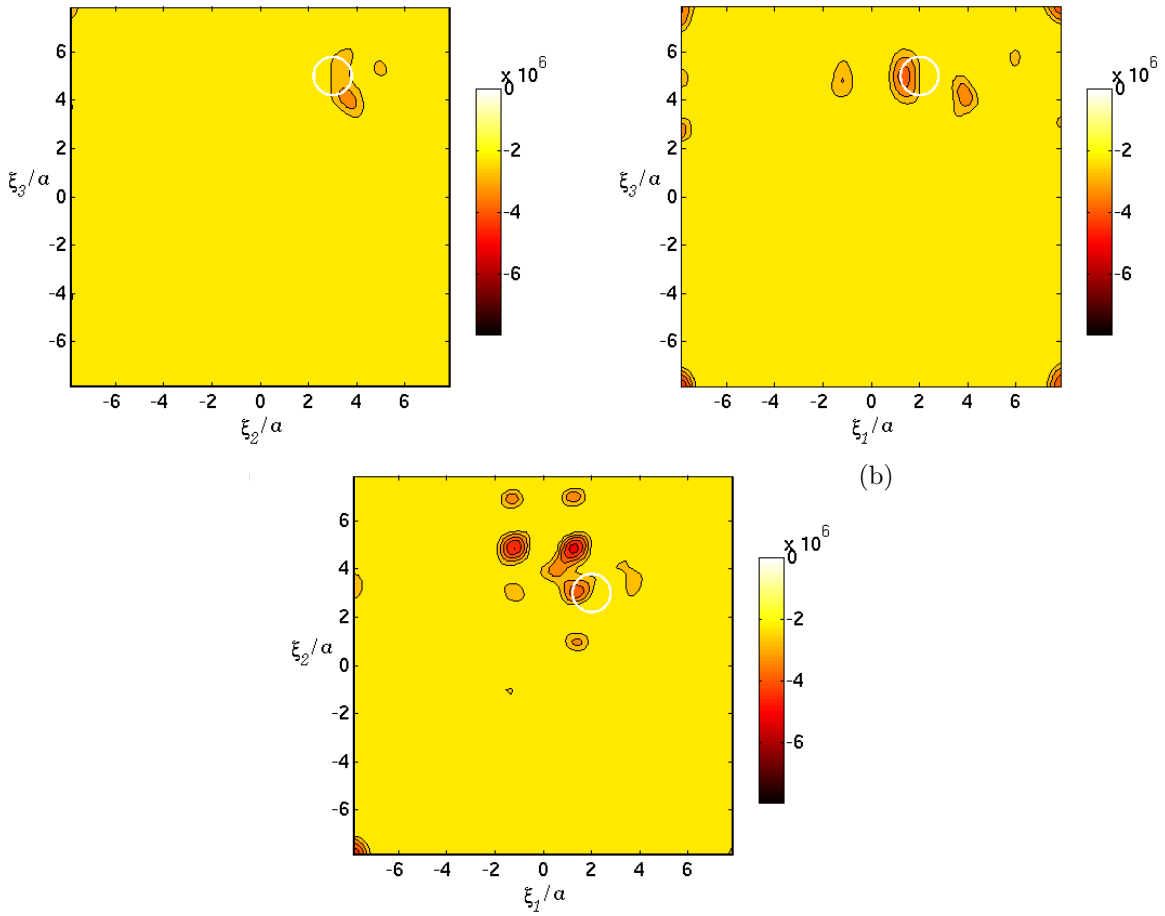


Figure 4.20: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 5a$*

Ces résultats montrent que la position de l'obstacle n'a que peu d'influence sur les résultats de gradient topologique. Néanmoins pour les obstacles trop près du bord (figure 4.21) ou dans un coin (figure 4.22) le « puits » de gradient topologique se disperse plus que dans le cas où l'obstacle est au milieu du domaine. On peut supposer que des

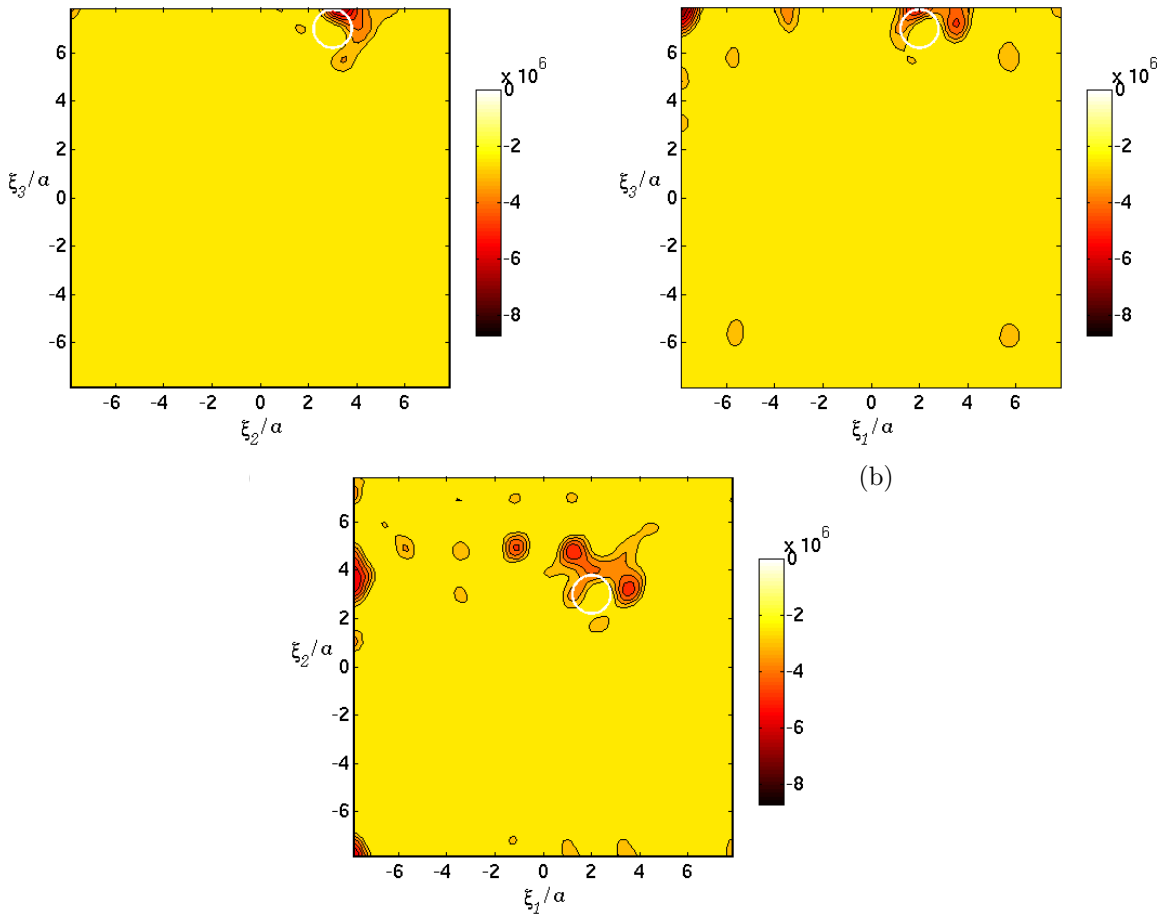


Figure 4.21: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 7a$*

effets de bord non encore analysés à ce jour interviennent dans cette constatation.

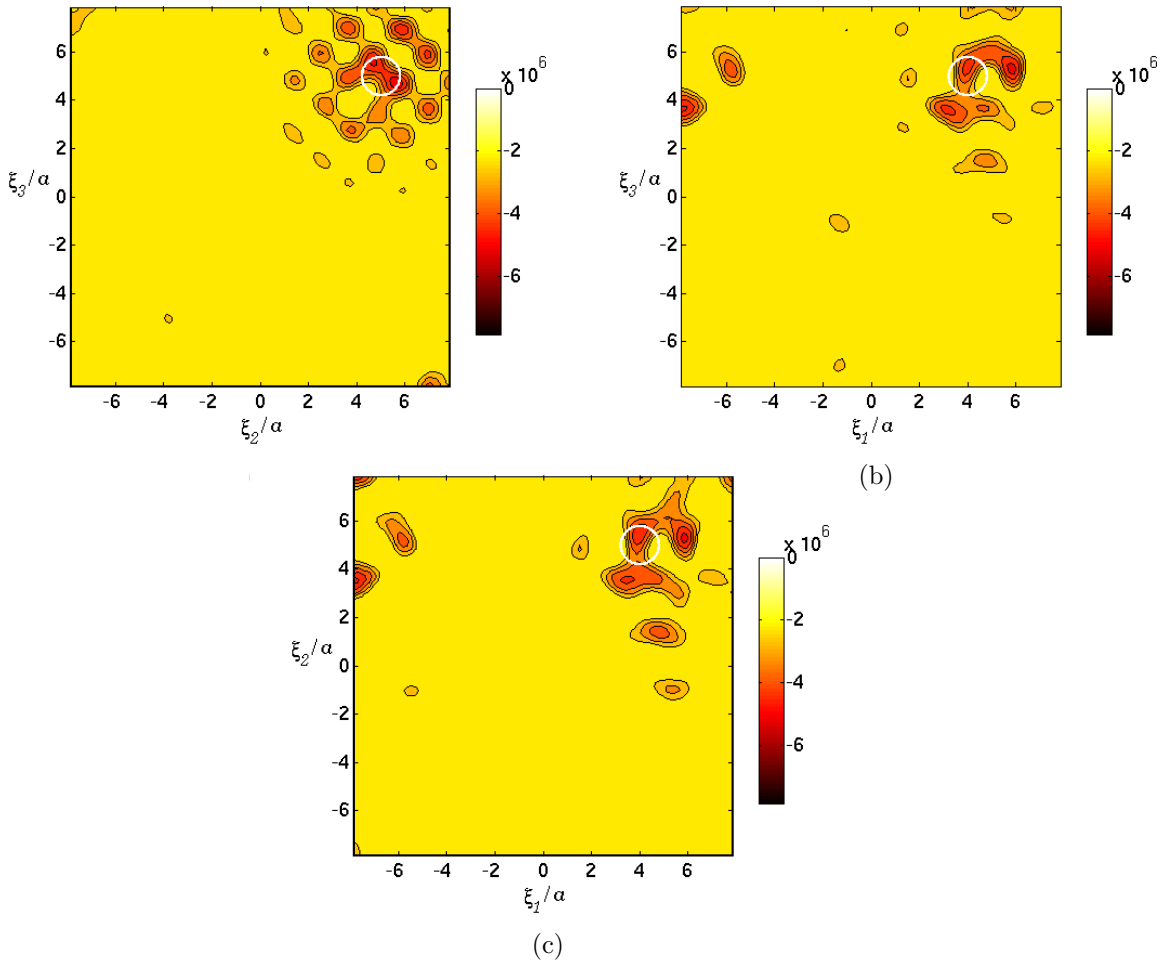


Figure 4.22: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 4a$ (b) $\xi_2 = 5a$ (c) $\xi_3 = 5a$*

4.4.6 Influence de la forme de l'obstacle

Tester uniquement la détectabilité d'un obstacle sphérique, peut sembler un peu académique et laisser penser que ce cas favorable est le seul possible. Nous avons testé le calcul du gradient topologique pour des géométries d'obstacles différentes, tout en restant dans le cas d'obstacles dont la plus grande dimension ne dépasse pas la longueur d'onde. Nous présentons ici trois cas : un obstacle ellipsoïdal (figure 4.23), un obstacle parallépipédique (figure 4.24) et un obstacle en coin (figure 4.25). Le champ de gradient topologique $\mathcal{T}(\underline{x})$ reste calculé à l'aide de (4.55), c'est à dire sous l'hypothèse

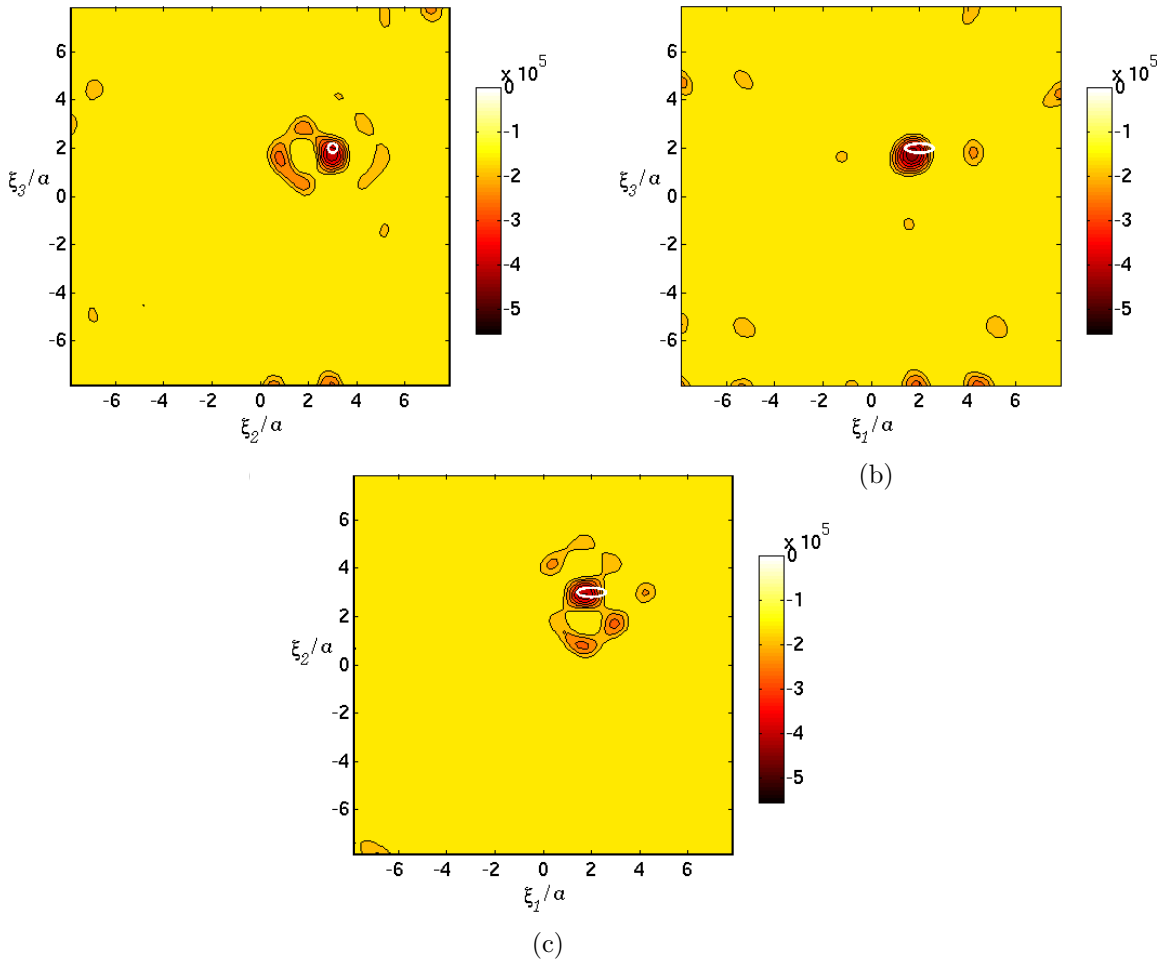


Figure 4.23: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide ellipsoïdal de grand axe $0.6a$ et de petit axe $0.4a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

d'un obstacle sphérique.

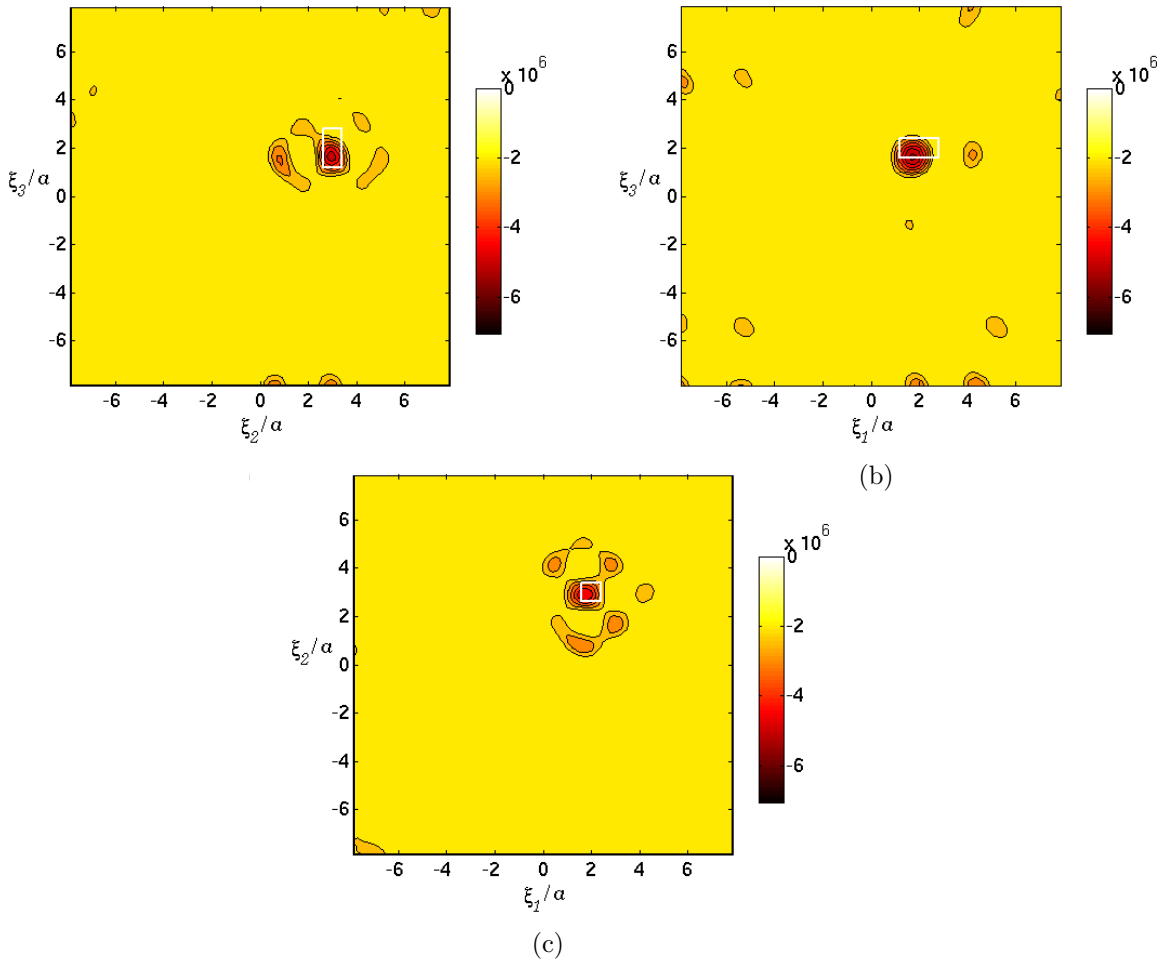


Figure 4.24: *Identification, à une longueur d'onde* $3a$*, d'un obstacle rigide parallépipédique de longueur* $0.8a$ *dans le domaine* $\Omega(8a)$ *: champ de gradient topologique seuillé* $\hat{\mathcal{T}}$ *dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a)* $\xi_1 = 2a$ *(b)* $\xi_2 = 3a$ *(c)* $\xi_3 = 2a$

A la vue de ces résultats nous pouvons tirer deux conclusions. D'une part la forme de l'obstacle a peu d'influence sur sa détectabilité par le calcul du gradient topologique. Mais d'autre part, cette forme n'est pas détectée par le gradient topologique. A ce stade nous pouvons dire que si le gradient topologique peut nous donner de bonnes informations sur la position de petits obstacles, et ce quelque soit leur forme et leur position, en revanche il ne nous donne pas d'information sur leur forme.

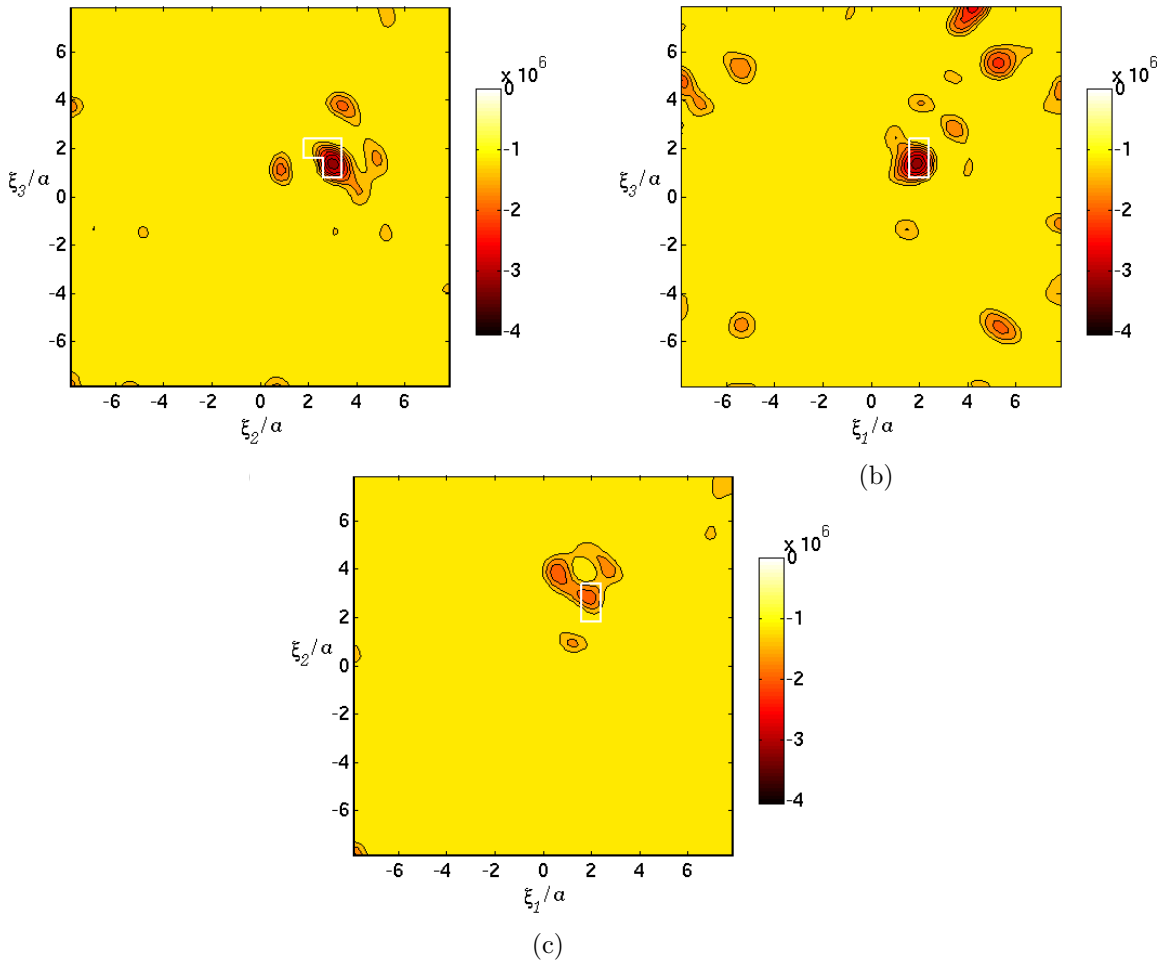


Figure 4.25: *Identification, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide en coin de coté $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

4.4.7 Données bruitées

Reste que tous les calculs présentés ici reposent sur l'exploitation de données simulées numériquement. Or pour espérer pouvoir exploiter une telle méthode en pratique, il faut tester sa réaction à la présence de bruit sur les mesures. Nous n'avions pas de données expérimentales mais nous avons bruité des données simulées numériquement.

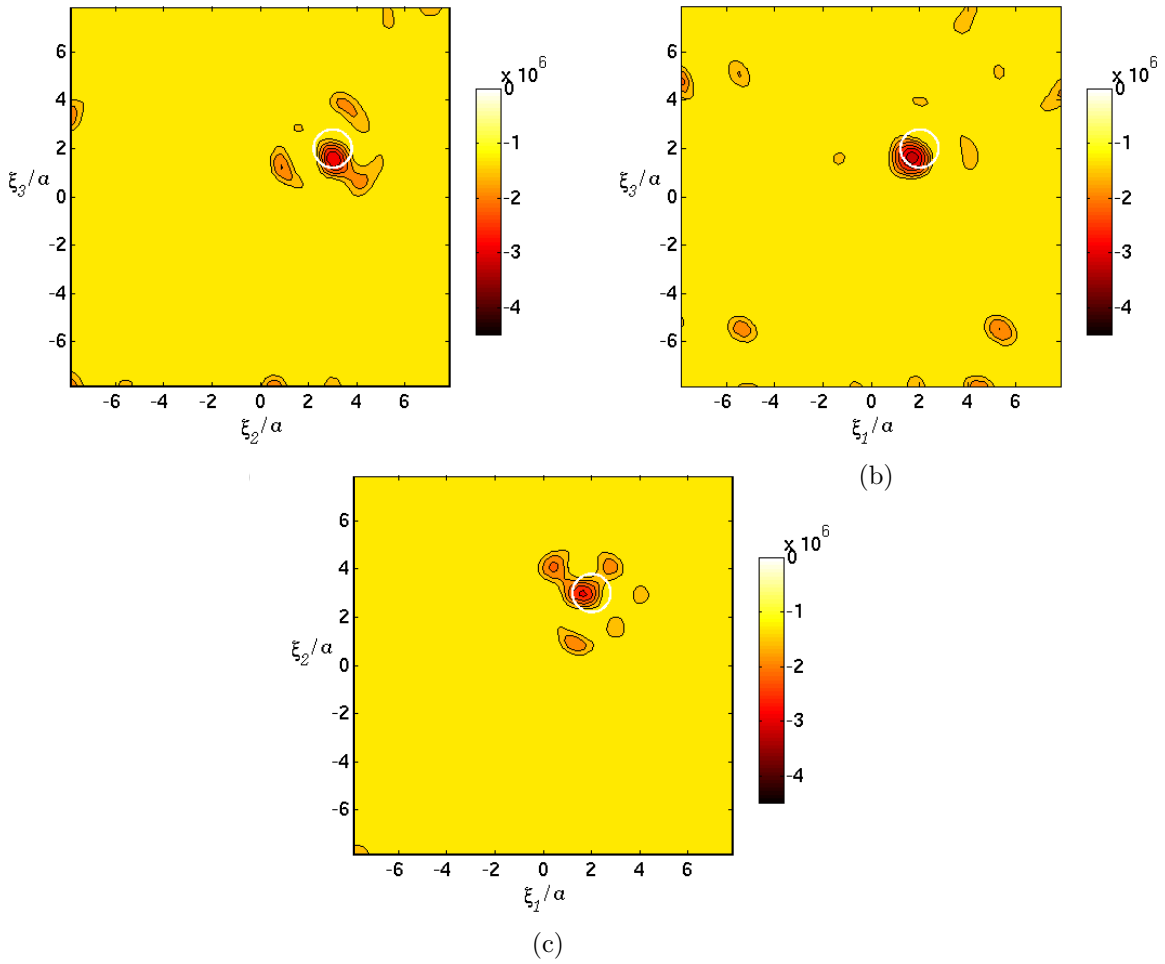


Figure 4.26: *Identification avec données bruitées, à une longueur d'onde $3a$, d'un obstacle rigide sphérique de rayon $0.8a$ dans le domaine $\Omega(8a)$: champ de gradient topologique seuillé $\hat{\mathcal{T}}$ dans les trois plans passant par le centre de l'obstacle (a) $\xi_1 = 2a$ (b) $\xi_2 = 3a$ (c) $\xi_3 = 2a$*

Sur le cas présenté (figure 4.26) les données observées p^{obs} sont calculées en fonction des données simulées p^{sim} par $p^{\text{obs}} = (1+\eta)p^{\text{sim}}$ où η est un nombre tiré aléatoirement dans l'intervalle $[-0.1, 0.1]$. On remarque que les résultats ne sont que peu perturbés

par la présence de bruit. Cette constatation est importante et utile, car il est connu que les méthodes inverses sont habituellement sensibles aux erreurs de mesures. Par ailleurs, elle peut être expliquée assez simplement. En effet, comme on utilise une fonction coût au moindres carrés, le champ adjoint $\hat{p}$ est défini par (4.11). Ce champ adjoint, ainsi que son gradient, dépend donc linéairement des erreurs de mesures commises sur p^{obs}. Le problème direct est quant à lui, par définition, indépendant des mesures. Le champ de gradient topologique $\mathcal{T}$ dépend donc linéairement des erreurs de mesures, ce qui explique vraisemblablement la relativement faible influence observée du bruit affectant les données.

4.4.8 Conclusion sur les résultats numériques

Sur l'utilisation du gradient topologique afin d'obtenir des informations sur la présence d'obstacles, les résultats sont plutôt encourageants. Notamment il ressort des calculs que nous avons présentés que pour des obstacles dont la plus grande dimension ne dépasse pas une longueur d'onde la détectabilité est bonne et ce pour des petits ou des grands domaines. Par ailleurs, la forme de l'obstacle ainsi que la présence de bruit sur les mesures n'ont que peu d'influence sur ces résultats. De plus, l'utilisation de la FMM permet d'effectuer ces calculs dans des temps raisonnables (voir table 4.2). Ceci dit, certains cas pour lesquels les résultats se dégradent ne sont pas encore bien expliqués. Peut-être ces cas correspondent-ils à des fréquences propres du domaine, du domaine sain ou encore de l'obstacle ? Dans ce dernier cas ces fréquences propres fictives seraient alors dues au fait que nous simulons les données par équations intégrales de frontière. Notons, enfin, que pour tous ces calculs la fonction coût utilisée était une distance au sens des moindres carrés, peut-être n'est-elle pas la mieux adaptée, surtout aux fréquences élevées.

	p^{vrai} sur $S \cup \Gamma^{\text{vrai}}$	p sur S	$\hat{p}$ sur S	$\mathcal{T}$ dans Ω
$2L = 16a$	1444s (435)	969s (282)	1163s (342)	852s
$2L = 32a$	6461s (439)	5615s (388)	6818s (476)	1860s

Tableau 4.2: *Temps de calcul et (entre parenthèses) nombre d'itérations de GMRES nécessaire afin de simuler les données puis de calculer les solutions directes et adjointes sur la frontière, et le temps de calcul pour évaluer le gradient topologique sur l'ensemble des points de la grille intérieure.*

Conclusions et perspectives

Ce travail a contribué à l'exploration de deux points clefs. Le premier est la résolution accélérée, par la méthode multipôle rapide, des équations intégrales de frontières de l'acoustique linéaire en régime harmonique. Le deuxième est le calcul du gradient topologique associé à une fonction coût afin d'obtenir des informations sur la position d'obstacles rigides inclus dans un domaine tridimensionnel borné à partir de mesures acoustiques.

Après une étude théorique complète de la méthode multipôle rapide, nous en avons proposé une mise en œuvre à la fois simple et efficace. Nous avons montré, sur des exemples numériques, que la méthode possède la complexité prévue théoriquement. Par ailleurs, une étude paramétrique nous a permis d'effectuer nos calculs dans un compromis optimum entre vitesse et précision. Nous avons ainsi pu réaliser des calculs pour des domaines tridimensionnels bornés relativement grand par rapport à la longueur d'onde, d'un diamètre de plus de 40λ pour les produits matrice-vecteur et de plus de 15λ pour les calculs complets, le tout sur un ordinateur personnel. De plus, le calcul de la pression et de son gradient par représentation intégrale, accéléré également, a pu être effectué sur une grille de plus de 3 millions de points. Ce qui permettait d'envisager d'utiliser cette méthode pour les calculs de la seconde partie.

Nous espérions que le calcul du gradient topologique associé à un fonction coût nous permettrait d'obtenir des informations qualitatives sur la présence d'obstacle dans un domaine acoustique, aucuns développements mathématiques nous assurant ce résulat pour des obstacles de dimensions finies. Nous avons donc présenté le champ de gradient topologique et montré qu'il pouvait être calculé simplement à partir de la résolution de deux problèmes définis sur le domaine sain (i.e. sans obstacle). Puis, ce champ a été calculé pour plusieurs configurations d'obstacles, à partir de données simulées numériquements, par la méthode multipôle rapide. Nous avons vu que des effets de bords intervenaient dans les zones proches de la frontière. De plus, il semblerait que l'on ne puisse négliger les valeurs propres de la cavité, de même que celles introduites fictivement par les équations intégrales choisies lors de notre étude. Néanmoins, les résultats dans l'ensemble sont encourageants. Nous retiendrons, que la détectabilité est, en général, bonne mais que la forme de l'obstacle n'est pas reconstruite (sauf pour un cas, encore mal expliqué, d'un obstacle dans un domaine de grande dimension). Ainsi,

le calcul de champ de gradient topologique permet une identification approchée, à un coût de calcul bien inférieur à celui d'une inversion classique, et réalise une exploration globale du milieu. Nous avons vu, par ailleurs, qu'avec une fonction coût prise au sens des moindres carrés les résultats sont peu sensibles aux erreurs de mesures. Il pourrait, néanmoins, être interessant d'étudier les champs de gradient topologique associés à d'autres fonctions coûts.

Cette étude qui se plaçait dans l'hypothèse d'un obstacle rigide pourrait se prolonger par le calcul d'une sensibilité topologique généralisée, prenant en compte les caractéristiques physiques d'obstacles pénétrables, il faudrait alors coupler les équations intégrales des deux milieux. Par ailleurs, la détectabilité d'un obstacle de dimension finie par l'apparition d'un obstacle infinitésimal pourrait se prolonger en étudiant le développement de $\mathcal{J}(\Omega^\varepsilon)$ aux ordres supérieurs en ε. De plus, comme nous l'avions vu en introduction, l'équation de Helmholtz qui nous a servi de modèle tout au long de cette étude peut être vue comme une simplification de problèmes plus complexes. Ces travaux pourraient être étendus aux équations de l'élastodynamique ou de l'électromagnétisme. Enfin, le calcul du gradient topologique donnant une identification rapide mais approchée, il pourrait être intéressant de le combiner (en tant qu'information *a priori* par exemple) avec une méthode d'optimisation, plus précise mais plus coûteuse et pouvant dépendre fortement du choix des conditions initiales.

Annexe A

Calcul des intégrales singulières

Le contenu de ce paragraphe n'a pas été utilisé dans notre implémentation, puisque nous n'avons utilisé que des éléments triangulaires linéaires, pour lesquels les intégrales singulières sont nulles. Néanmoins par souci de présenter la méthode la plus complète possible, et les calculs et les tests ayant été faits, nous exposons tout de même ces développements.

Lors du calcul des interactions proches, on doit calculer des intégrales de la fonction de Green multipliée par des fonctions d'interpolation sur les éléments du maillage. Nous employons pour se faire une méthode classique par points de Gauss pour tous les cas où le point de collocation n'est pas situé sur l'élément. Mais la fonction de Green diverge lorsque son argument tend vers zéro. L'intégrale élémentaire est alors singulière si le point de collocation est sur l'élément. L'intégration par points de Gauss usuels ne fournit alors pas une précision satisfaisante.

Le traitement des intégrations élémentaires singulières considéré ici repose sur une technique qui consiste à enrichir en points d'intégration l'élément, mais de sorte que les points se concentrent vers le nœud de la singularité. La méthode utilisée pour calculer ces nouveaux points d'intégrations est de considérer un triangle comme un carré dégénéré dans lequel on choisi des points de Gauss classiques.

Ainsi deux sommets du carré correspondent au même sommet du triangle, les deux autres sommets étants en relation biunivoque. Si on note $\underline{\xi}_i$ les nœuds sommets du triangle et $\underline{U}_j$ ceux du carré, que par ailleurs on suppose qu'à $\underline{\xi}_1$ correspond $\underline{U}_1$ et $\underline{U}_4$ alors à tout point (u_1, u_2) du carré correspond un point $\underline{\xi} = (\xi_1, \xi_2)$ du triangle tel que

$$\underline{\xi} = \underline{\xi}_1(N_1(u_1, u_2) + N_4(u_1, u_2)) + \underline{\xi}_2 N_2(u_1, u_2) + \underline{\xi}_3 N_3(u_1, u_2) \tag{A.1}$$

où N_q est la q-ième fonction de forme du carré. Ainsi en prenant les fonctions de formes

classiques du carré à 4 nœuds(voir annexe).

$$\begin{aligned}\underline{\xi} &= \frac{1}{4}\underline{\xi}_1(1-u_1)\left((1-u_2)+(1+u_2)\right)+\frac{1}{4}(1+u_1)\left(\underline{\xi}_2(1-u_2)+\underline{\xi}_3(1+u_2)\right)\\ &= \frac{1}{2}\underline{\xi}_1(1-u_1)+\frac{1}{4}(1+u_1)\left(\underline{\xi}_2(1-u_2)+\underline{\xi}_3(1+u_2)\right)\end{aligned} \tag{A.2}$$

Pour les calculs on doit choisir $\underline{\xi}_1$ à l'origine de la singularité (nœud correspondant au point de collocation)), puis on numérote les autres nœuds dans l'ordre trigonométrique. Le calcul de l'intégrale sur le triangle Δ est donc

$$\int_\Delta g(\xi)\,d\xi = \int_\Delta g(\xi(u))J(u)\,du \tag{A.3}$$

où J est le Jacobien, déterminant de la matrice Jacobienne, de la transformation du carré en triangle.

$$J(u) = \begin{vmatrix} \frac{\partial \xi_1}{\partial u_1} & \frac{\partial \xi_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial \xi_2}{\partial u_1} & \frac{\partial \xi_2}{\partial u_2} \end{vmatrix} = \frac{\partial \underline{\xi}}{\partial u_1} \wedge \frac{\partial \underline{\xi}}{\partial u_2} \tag{A.4}$$

Or

$$\begin{aligned}\frac{\partial \underline{\xi}}{\partial u_1} &= -\frac{1}{2}\underline{\xi}^1+\frac{(1-u_2)}{4}\underline{\xi}^2+\frac{(1+u_2)}{4}\underline{\xi}^3\\ \frac{\partial \underline{\xi}}{\partial u_2} &= \frac{(1+u_1)}{4}\left(\underline{\xi}^3-\underline{\xi}^2\right)\end{aligned} \tag{A.5}$$

d'où

$$\begin{aligned}J(u) &= -\frac{(1+u_1}{8}\left(\underline{\xi}^1\wedge\left(\underline{\xi}^3-\underline{\xi}^2\right)\right)+\frac{(1+u_1)(1-u_2)}{16}\underline{\xi}^2\wedge\underline{\xi}^3-\frac{(1+u_1)(1+u_2)}{16}\underline{\xi}^3\wedge\underline{\xi}^2\\ &= \frac{(1+u_1)}{8}\left[\underline{\xi}^1\wedge\underline{\xi}^2+\underline{\xi}^2\wedge\underline{\xi}^3+\underline{\xi}^3\wedge\underline{\xi}^1\right]\end{aligned} \tag{A.6}$$

où la quantité $\alpha_\Delta = \underline{\xi}^1\wedge\underline{\xi}^2+\underline{\xi}^2\wedge\underline{\xi}^3+\underline{\xi}^3\wedge\underline{\xi}^1$ ne dépend que du triangle d'origine (donc indépendante du point de calcul). Par exemple elle vaut 1 pour le triangle de référence.

Bien sûr, pour le calcul effectif de l'intégrale il ne faudra pas oublier la transformation de l'élément réel en l'élément de référence étudié jusqu'ici.

Dans le cas où notre élément initial n'est pas un élément triangulaire linéaire, il faut alors découper l'élément de référence en régions triangulaires ayant pour sommet commun le point singulier et faire une transformation du type précédent décrit sur chaque sous triangle ainsi obtenu. Par exemple, voici ce qu'on obtiendrait pour un nœud d'un quadrangle à huit nœuds (figure A.4).

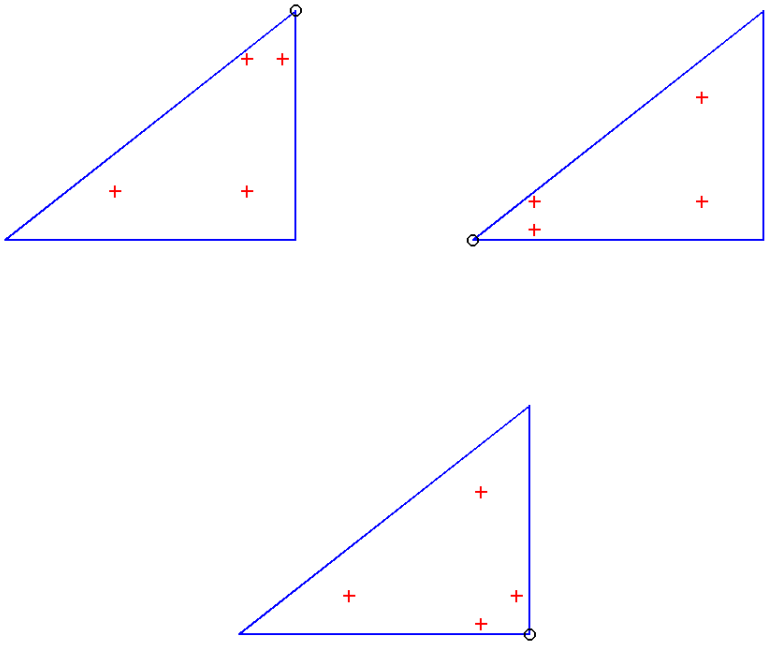


Figure A.1: *Répartition de 4 points de Gauss à l'intérieur d'un triangle pour le calcul d'une intégrale singulière, le sommet de la singularité étant repéré par un cercle noir.*

Enfin, on donne un petit exemple afin d'illustrer l'efficacité de cette méthode d'intégration numérique singulière. On compare la précision du calcul d'une intégrale singulière sur un élément triangulaire pour différents nombres de points de Gauss. On présente dans le tableau ci-dessous l'écart relatif à une solution analytique pour une fonction dont la singularité est en $\frac{1}{r}$

Type d'intégration	Ecart Relatif
Régulière 3 points	0.229
Singulière 4 points	0.018
Singulière 9 points	0.002
Singulière 16 points	$3.47\,10^{-4}$

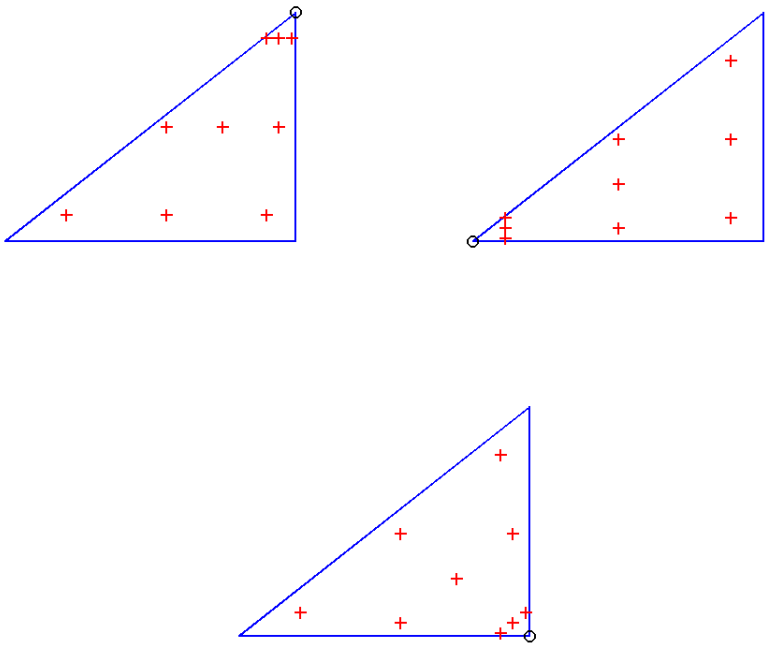


Figure A.2: *Répartition de 9 points de Gauss à l'intérieur d'un triangle pour le calcul d'une intégrale singulière, le sommet de la singularité étant repéré par un cercle noir.*

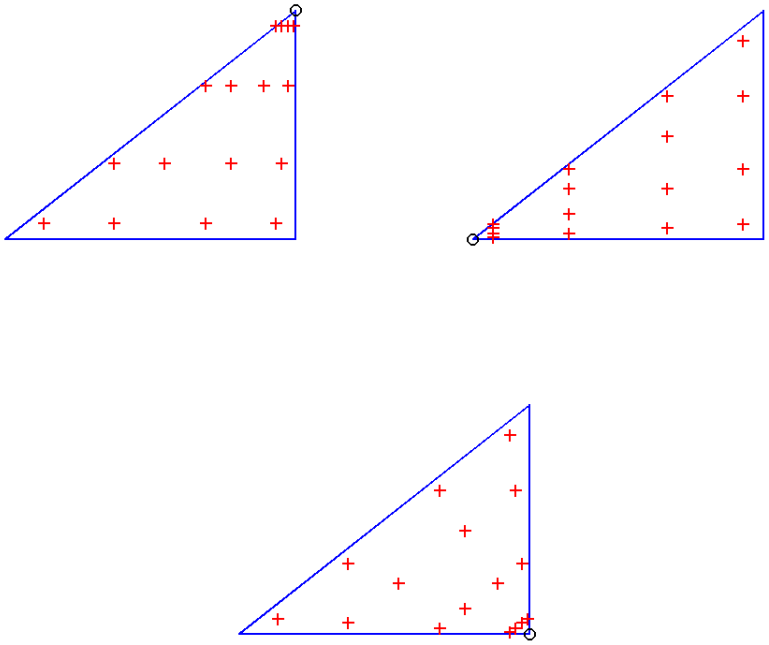


Figure A.3: *Répartition de 16 points de Gauss à l'intérieur d'un triangle pour le calcul d'une intégrale singulière, le sommet de la singularité étant repéré par un cercle noir.*

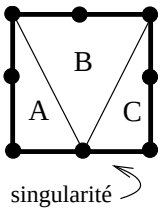


Figure A.4: *Quadrangle à 8 nœud et découpage en triangle d'intégrations A,B et C pour le calcul d'une intégrale singulière.*

Bibliographie

[1] Abramowitz M. et Stegun I. A. (eds.). *Handbook of mathematical functions : with formulas, graphs and mathematical tables*. Dover, New-York (1965).

[2] Allaire G. *Analyse numérique et optimisation*. Cours de l'Ecole Polytechnique (2002).

[3] Andrieux S. et Ben Abda A. Identification of planar cracks by complete overdetermined data : inversion formulae. *Inverse Problems*, **12**, 553–563 (1996).

[4] Andrieux S., Ben Abda A. et Bui H. Sur l'indentification de fissures planes via le concept d'écart à la réciprocité. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **Série I, 324**, 1431–1438 (1997).

[5] Andrieux S., Ben Abda A. et Bui H. Reciprocity principle and crack identification. *Inverse Problems*, **15**, 59–65 (1999).

[6] Andrieux S. *Méthodes et techniques de résolution de quelques problèmes inverses*. Notes de cours DEA TACS, Ecole Polytechnique (janvier 2003).

[7] Bécache E. et Joly P. *Analyse et approximation de modèles de propagation d'ondes, Analyse numérique Partie2*. Cours de l'École Polytechnique (2004).

[8] Bernhard P. *Éléments d'optimisation*. Cours de la faculté des sciences, Nice-Sophia Antipolis (janvier 2000).

[9] Bonnet M. BIE and material differentiation applied to the formulation of obstacle inverse problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **15**, 121–136 (1995).

[10] Bonnet M. *Equations intégrales et éléments de frontière*. CNRS Edition, Paris (1995).

[11] Bonnet M. A general boundary-only formula for crack shape sensitivity of integral functionals. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **Série II b 327**, 1215–1221 (1999).

[12] Bonnet M. *Problèmes inverses*. Notes de cours du DEA Dynamique des structures de Couplages (2000).

[13] Bonnet M. et Guzina B. B. Sounding of finite solid bodies by way of topological derivative. *International Journal for Numerical Method in Engineering*, **61**, 2344–2373 (2004).

[14] Bui H. *Introduction aux problèmes inverses en mécanique des matériaux*. Direction des études et recherches d'électricité de France, Eyrolles, Paris (1993).

[15] Bui H., Constantinescu A. et Maigre H. Diffraction acoustique inverse de fissure plane : solution explicite pour un solide borné. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **Série II b 327**, 971–976 (1999).

[16] Bui H., Constantinescu A. et Maigre H. Numerical identification of linear cracks in 2D elastodynamics using instantaneous reciprocity gap. *Inverse Problems*, **20**, 993–1001 (2004).

[17] Burton A. et Miller G. The application of integral equation methods to the numerical solution of some exterior boundary-value problems. *Proc R Soc Lond*, **10**, 323–201 (1971).

[18] Carayol Q. et Collino F. Error estimates in the fast multipole method for scattering problems - Part 1 : Truncation of the Jacobi-Anger series. *ESAIM - Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, **38**, 371–394 (Mar-Apr 2004).

[19] Carayol Q. et Collino F. Error estimates in the fast multipole method for scattering problems - Part 2 : Truncation of the Gegenbauer series. *ESAIM - Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, **39**, 183–221 (Jan-Feb 2005).

[20] Céa J. *Optimisation, théorie et algorithmes*. Dunod, Paris (1971).

[21] Chaigne A. *Ondes acoustiques*. Editions de l'Ecole Polytechnique (2001).

[22] Chew W., Jin J., Lu C., Michielssen E. et Song J. Fast solution Methods in Electromagnetics. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **45**(3), 533–543 (march 1997).

[23] Colton D., Giebermann K. et Monk P. A regularized sampling method for solving three-dimensional inverse scattering problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, **21**, 2316–2330 (2000).

[24] Colton D., Haddar H. et Piana M. The linear sampling method in inverse electromagnetic scattering theory. *Inverse Problems*, **19**, S105–S137 (2003).

[25] Colton D. et Kirsch A. A simple method for solving inverse scattering problems in the resonance region. *Inverse Problems*, **12**, 383–393 (1996).

[26] Colton D. et Kress R. *Inverse acoustic and Electromagnetic Scattering theory*. Springer-Verlag, Berlin (1992).

[27] Crighton D., Dowling A., Ffowcs Williams J., Heckl M. et Leppington F. *Modern Methods in analytical acoustics*. Springer-Verlag, London (1992).

[28] Darve E. *Méthodes multipôles rapides : résolution des équations de Maxwell par formulation intégrale*. Thèse de doctorat, Université Paris 6 (1999).

[29] Darve E. The fast multipole method : numerical implementation. *Journal of Computational Physics*, **160**, 195–240 (2000).

[30] Darve E. The fast multipole method I : error analysis and asymptotic complexity. *SIAM J. Numer. Anal.*, **38**(1), 98–128 (2000).

[31] Epton M. A. et Dembart B. Multipole translation theory for three dimensional Laplace and Helmholtz equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, **16**(4), 865–897 (july 1995).

[32] Erhard K. *Point source approximation methods in inverse obstacle reconstruction problems*. Phd thesis, University of Göttingen (2005).

[33] Erhard K. et Potthast R. A numerical study of the probe method. *SIAM J. Sci. Comput.* (2006).

[34] Eschenauer H. A., Kobelev V. V. et Schumacher A. Bubble method for topology and shape optimization of structures. *Structural Optimization*, **8**, 42–51 (1994).

[35] Farhat C., Tezaur R. et Djellouli R. On the solution of three-dimensional inverse obsatcale acoustic scattering problems by a regularized Newton method. *Inverse problems*, **18**, 1229–1246 (2002).

[36] Feijoo G. R. A new method in inverse scattering based on the topological derivative. *Inverse Problems*, **20**, 1819–1840 (2004).

[37] Garreau S., Guillaume P. et Masmoudi M. The topological asymptotic for PDE systems : the elasticity case. *SIAM J. Contr. Opt.*, **39**, 1756–1778 (2001).

[38] Greengard L. et Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations. *J. of Comp. physics*, **73**, 325–348 (1987).

[39] Greengard L. et Rokhlin V. A new version of the fast multipole method for the Laplace equation in three dimension. *Acta numerica*, **6**, 229–269 (1997).

[40] Guzina B. et Bonnet M. Topological derivative for the inverse scattering of elastic waves. *Q. Jl Mech. Appl. Math.*, **57**, 161–179 (2004).

[41] Ikehata M. Reconstruction of the shape of the inclusion by boundary measurements. *Commun. Partial Differential Eqns*, **23**, 1479–1474 (1998).

[42] Ikehata M. Reconstruction of obstacle from boundary measurements. *Wave Motion*, **30**, 205–223 (1999).

[43] Isakov V. *Inverse problems for partial differential equations*. Springer (1998).

[44] Jakob-Chien R. et Alpert B. K. A Fast Spherical Filter with Uniform Resolution. *J. of Comp. Physics*, **136(2)**, 580–584 (1997).

[45] Joly P. *Méthodes mathématiques et numériques en électromagnétisme*. Cours de l'Ecole Polytechnique (1996).

[46] Joly P. *Analyse et approximation de modèles de propagation d'ondes, analyse mathématique*. Cours de l'Ecole Polytechnique (2002).

[47] Koc S., Song J. et Chew W. Error analysis for the numerical evaluation of the diagonal forms of the scalar spherical addition theorem. *SIAM J. Numer. Anal.*, **36**(3), 906–921 (1999).

[48] Margorani M. et Bonnet M. Fast multipole method applied to elastostatic BEM-FEM coupling. *Computers and Structures*, **83**, 700–717 (2005).

[49] Masmoudi M. A synthetic presentation of shape and topological optimization. In *Les problèmes inverses, le contrôle et l'optimisation de formes, PICOF'98*, pp. 121–127 (1998).

[50] Morse P. M. et Feshbach H. *Methods of theoretical physics*. McGraw-Hill, New-York (1953).

[51] Morse P. M. et Ingard K. U. *Theoretical acoustics*. McGraw-Hill (1968).

[52] Nishimura N. Crack determination problems. *Theoretical and Appl. Mech.*, **46**, 39–57 (1997).

[53] Nishimura N. Fast multipole accelerated boundary integral equation methods. *Appl. Mech. Rev.*, **55**(4), 299–324 (july 2002).

[54] Perrin G. *Acoustique*. Notes de cours de l'Université de Versailles (2005).

[55] Potthast R. A fast few method to solve inverse scattering problems. *Inverse Problems*, **12**, 731–742 (1996).

[56] Potthast R. A point source method for inverse acoustic and electromagnetic obstacle scattering problems. *IMA J. Appl. Math.*, **61**, 119–140 (1998).

[57] Potthast R. *Point sources and multipoles in inverse scattering theory*. Habilitation thesis, Göttingen (1999).

[58] Potthast R. Stability estimates and reconstructions in inverse scattering using singular sources. *J. Comput. Appl. Math.*, **114**, 247–274 (2000).

[59] Potthast R. A survey on sampling and probe methods for inverse problems. *Inverse Problems*, **22**, R1–R47 (2006).

[60] Pyl L., Clouteau D. et Degrande G. A weakly singular boundary integral equation in elastodynamics for heterogeneous domains mitaging fictitious eigenfrequencies. *Engineering Analysis withe Boundary Elements*, **28**, 1493–1513 (2004).

[61] Rokhlin V. Rapid solution of integral equations of classical potential theory. *J. of Comp. physics*, **60**, 187–207 (1985).

[62] Rokhlin V. Diagonal forms of translation operators for the Helmholtz Equation in three dimensions. *App. and Comp. Harmonic analysis*, **1**, 82–93 (1993).

[63] Sokolowski J. et Zochowski A. On topological derivative in shape optimization. *INRIA report*, **3170** (mai 1997).

[64] Sokolowski J. et Zochowski A. Topological derivatives for elliptic problems. *Inverse Problems*, **15**, 123–134 (1999).

[65] Sylvand G. *La méthode multipôle rapide en électromagnétisme : performances, parallélisation, applications*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (2002).

[66] Tikhonov A. et Arsenine V. *Méthodes de résolution de problèmes mal posés*. Editions Mir, Moscou (1976).

[67] Trefethen L. N. et Bau D. *Numerical linear algebra*. SIAM, Philadelphia (1997).

[68] Yoshida K.-i. *Applications of Fast Multipole Method to Boundary Integral Equation Method*. Thèse de doctorat, Kyoto univ., Japan (2001).