

Evaluation de différents solveurs Maxwell pour la résolution de Maxwell-Vlasov par une méthode PIC

C. Fochesato et D. Bouche

*LRC MESO, ENS de Cachan, CEA DAM, 61 Avenue du Pt Wilson 94235
Cachan*

RAPPORT LRC MESO 2006

Résumé :

La résolution numérique des équations de Maxwell est un problème difficile. De plus, applications sont nombreuses et diverses: dispositifs microondes, diffraction, etc. Cela a conduit, depuis les années 60, au développement d'un grand nombre de méthodes, sans qu'aucune ne parvienne à s'imposer.

Le schéma différences finies sur maillage cubique, proposé par Yee en 1966, est bien adapté aux équations de Maxwell, mais représente mal les frontières d'objets complexes. Les éléments finis nodaux classiques génèrent des modes parasites faussant les simulations. Les éléments finis d'arête ont été développés notamment pour s'affranchir de ce problème, mais sont pénalisés par la complexité de mise en œuvre et le coût des calculs.

Des méthodes de volumes finis, certaines généralisant le schéma de Yee à des maillages distordus, d'autres adaptant les méthodes développées pour la discrétisation des systèmes d'équations hyperboliques sont également utilisées. Enfin, des méthodes « Galerkin Discontinu », généralisation à un ordre de précision arbitraire des volumes finis, ont été appliquées récemment aux équations de Maxwell.

Dans ce rapport, nous nous focalisons plus spécifiquement sur le couplage d'une méthode de résolution des équations de Maxwell à une méthode PIC. Nous analysons les avantages et inconvénients des méthodes les plus couramment utilisées : précision, robustesse, sensibilité aux artefacts numériques, efficacité, retour d'expérience.

**Comparison of different Maxwell solvers
coupled to a PIC resolution method of Maxwell-Vlasov equations**

C. Fochesato et D. Bouche

LRC MESO, ENS de Cachan, CEA DAM, 61 Avenue du Pt Wilson 94235 Cachan

REPORT LRC MESO 2006

Abstract :

The numerical solution of Maxwell equations is a challenging task. Moreover, the range of applications, is very wide : microwave devices, diffraction, to cite a few. As a result, a number of methods have been proposed since the sixties. However, among all these methods, none has proved to be free of drawbacks.

The finite difference scheme proposed by Yee in 1966, is well suited for Maxwell equations. However, it only works on cubical mesh. As a result, the boundaries of complex objects are not properly handled by the scheme. When classical nodal finite elements are used, spurious modes appear, which spoil the results of simulations. Edge elements overcome this problem, at the price of rather complex implementation, and computationally intensive simulations.

Finite volume methods, either generalizing Yee scheme to a wider class of meshes, or applying to Maxwell equations methods initially used in the field of hyperbolic systems of conservation laws, are also used. Lastly, « Discontinuous Galerkin » methods, generalizing to arbitrary order of accuracy finite volume methods, have recently been applied to Maxwell equations.

In this report, we more specifically focus on the coupling of a Maxwell solver to a PIC method. We analyze advantages and drawbacks of the most widely used methods: accuracy, robustness, sensitivity to numerical artefacts, efficiency, user judgment.

Table des matières

1	Introduction	5
2	Principales problématiques liées à la résolution de Maxwell-Vlasov par une méthode PIC	10
2.1	Description du solveur PIC utilisé	10
2.2	Quelques caractéristiques générales des solveurs PIC et liens avec le choix d'un solveur Maxwell	11
2.2.1	Bruit numérique	11
2.2.2	Chauffage numérique	17
2.2.3	Fonctions d'interpolation	18
2.2.4	Auto-force	21
2.2.5	Effet Cerenkov numérique	22
2.2.6	Problème de conservation de la charge	25
2.2.7	Maillage et raffinement	28
2.2.8	Filtrages	28
2.2.9	Analyses et tests numériques de convergence	29
2.3	Conclusions sur le solveur PIC en vue du choix du solveur Maxwell . . .	31
3	Présentation des différentes méthodes de résolution des équations de Maxwell	33
3.1	Méthodes de différences finies	33
3.1.1	Schéma de Yee	33
3.1.2	Variantes et extensions	35
3.2	Méthodes de volumes finis	36
3.2.1	Méthode de Hermeline	36
3.2.2	Méthode de Remaki	38
3.2.3	Variantes et extensions	40
3.3	Méthodes d'éléments finis	41
3.3.1	Méthode d'Assous et al	41
3.3.2	Eléments finis d'arête (Raviart-Thomas-Nédelec)	43
3.3.3	Eléments finis de Cohen-Monk	46
3.3.4	Variantes et extensions	47
3.4	Méthodes de Galerkin discontinues	48
3.4.1	Méthode de Ferrières-Cohen-Pernet	48
3.4.2	Méthode de Sonnendrücker	50
3.4.3	Méthode de Piperno	51
3.4.4	Variantes et extensions	53
4	Critères d'appréciation des solveurs Maxwell	53
4.1	Précision - robustesse	53
4.1.1	Précision et propriétés numériques (I)	53
4.1.2	Artefacts numériques (II)	54
4.2	Flexibilité	55
4.2.1	Formulation (III)	55

4.2.2	Géométrie (IV)	55
4.2.3	Maillage (V)	55
4.3	Efficacité	56
4.3.1	Complexité de calcul (VI)	56
4.3.2	Parallélisation (VII)	56
4.3.3	Facilité de mise en œuvre (VIII)	56
4.3.4	Couplage à du structuré (IX)	56
4.4	Retour d'expérience (X)	56
5	Tableau d'évaluation des solveurs selon les critères choisis	56
6	Discussion plus détaillée pour chaque méthode	57
6.1	Méthode DF de Yee	57
6.2	Méthode VF de Hermeline	59
6.3	Méthode VF de Remaki	60
6.4	Méthode EF d'Assous	61
6.5	Méthode EF de Raviart-Thomas-Nédelec	63
6.6	Méthode EF de Cohen-Monk	65
6.7	Méthode GD de Cohen-Ferrières	66
6.8	Méthode GD de Sonnendrücker	67
6.9	Méthode GD de Piperno	69
7	Conclusion	70
8	Annexe: les modes parasites	72
8.1	Introduction	72
8.2	Difficultés pour l'analyse de la discrétisation par méthode d'EF du problème aux valeurs propres: Maxwell harmonique	72
8.2.1	Modes parasites observés	73
8.2.2	Clarification	73
8.2.3	Autres explications de l'origine des modes parasites	78
8.2.4	Sujets connexes	81
8.2.5	Conclusion	84
8.3	Pour le problème de Maxwell dépendant du temps	86
8.4	Les autres méthodes de discrétisation	87
8.5	Conséquences pour le choix d'un solveur Maxwell-Vlasov	90

1 Introduction

La plateforme Brennus est un ensemble de codes modélisant des faisceaux de particules en interaction avec les champs qu'elles génèrent et auxquelles elles sont soumises, et avec des structures métalliques ou diélectriques. Dans cette plateforme, les particules sont simulées par une méthode Particle-In-Cell (PIC). Le but de ce rapport est de choisir le "meilleur" (en un sens à préciser) solveur de Maxwell pour les champs. Pour cela, nous analysons les méthodes de résolution des équations de Maxwell disponibles, afin d'obtenir les éléments de choix d'un solveur adapté à la méthode PIC implémentée dans Brennus.

Le problème physique considéré est de déterminer les champs électromagnétiques et le mouvement de particules chargées donnés par le système couplé de Maxwell-Vlasov. Dans ce système, les particules sont représentées par leur fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ solution de l'équation de Vlasov. En général, il faut résoudre une équation par espèce de particules. Dans notre cas, le champ est généré par les électrons, et nous avons à résoudre une seule équation de Vlasov.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f + \mathbf{F} \cdot \nabla_p f = 0. \quad (1)$$

La vitesse relativiste est liée à la quantité de mouvement \mathbf{p} par

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \frac{c}{\sqrt{|\mathbf{p}|^2 + m^2 c^2}} \mathbf{p} \quad (2)$$

où c est la vitesse de la lumière et m la masse de la particule. La force F est la force de Lorentz

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times (\mu \mathbf{H})), \quad (3)$$

où q est la charge de la particule, et $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ et $\mathbf{H}(\mathbf{x}, t)$ sont les champs électrique et magnétique. Ceux-ci sont les solutions du système de Maxwell, que l'on écrit ici pour des matériaux invariants dans le temps (de permittivité ϵ et de perméabilité μ constants dans le temps)

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{H} = -\mathbf{J}, \quad (4)$$

$$\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho, \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) = 0. \quad (7)$$

Les coefficients ϵ et μ sont des tenseurs dans le cas de matériaux anisotropes et dépendent en général de \mathbf{x} (possibilité de considérer des matériaux inhomogènes).

Les équations de Vlasov et de Maxwell sont couplées via la charge $\rho(\mathbf{x},t)$ et le courant $\mathbf{J}(\mathbf{x},t)$. Ces quantités, définies comme les premiers moments de la fonction de distribution f , sont les sources générant les champs électromagnétiques.

$$\rho(\mathbf{x},t) = q \int f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)d\mathbf{p}, \quad \mathbf{J}(\mathbf{x},t) = q \int f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) \cdot \mathbf{v}d\mathbf{p}. \quad (8)$$

Dans le cas de ces équations continues, ces deux quantités sont reliées par la relation de compatibilité traduisant la conservation de la charge

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (9)$$

Une des conséquences de cette propriété est que les contraintes de divergence (6) et (7) sont satisfaites pour tout temps si elles le sont à l'instant initial et si les sources ρ , \mathbf{J} vérifient (9) pour tout temps. En revanche, si la conservation de la charge n'est pas satisfaite, le système de Maxwell devient surdéterminé. Ce point est important et sera donc discuté spécifiquement dans la section suivante dédiée aux caractéristiques de la méthode PIC.

On considère un domaine Ω borné quelconque de \mathbb{R}^3 . Pour la description qui va suivre, on ne considèrera que des conditions aux limites de type conducteur parfait pour les équations de Maxwell, c'est-à-dire

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0, \text{ sur } \partial\Omega. \quad (10)$$

Dans les discussions en revanche, nous considérons la possibilité d'implémenter des conditions aux limites permettant de modéliser un domaine non borné, à savoir les conditions de Silver-Muller. Parmi les méthodes d'implémentation de ces conditions, celles de type PML sont les plus efficaces, mais les conditions aux limites absorbantes classiques, plus simples, sont encore utilisées (voir [60] pour une revue). Les conditions aux limites pour l'équation de Vlasov permettent de modéliser le devenir des particules aux bords du domaine (réflexion, absorption, retour périodique pour conserver la charge totale, émission via la condition de Child-Langmuir). Ce point ne sera pas discuté dans ce rapport.

L'équation de Vlasov est une équation cinétique que l'on peut résoudre par différentes méthodes. L'inconvénient principal des méthodes de discrétisation classiques basées sur un maillage est qu'il faut mailler un espace de dimension 6. Lorsque le problème peut bénéficier de symétries ou de limites asymptotiques permettant de réduire la dimension, ces méthodes sur maillage peuvent être compétitives. En particulier, nous pouvons noter l'utilisation des méthodes spectrales [82] (en particulier celles basées sur les transformées de Fourier rapides avec des conditions aux limites périodiques) et les méthodes semi-lagrangiennes [110].

En revanche, la résolution de l'équation de Vlasov sur un maillage de l'espace des phases coûte trop cher en temps de calcul et en place mémoire, lorsque le nombre de dimensions est grand et la géométrie complexe.

On se tourne alors vers les méthodes dites lagrangiennes ou particulières. Elles consistent à représenter f par un nombre fini N de macro-particules de position \mathbf{x}_k , d'impulsion \mathbf{p}_k et de poids ω_k ($1 \leq k \leq N$), que l'on suit dans leur mouvement dans l'espace des phases. Le modèle habituel de macro-particules consiste à considérer ces particules numériques comme des particules ponctuelles mais en nombre bien moindre que les vraies particules physiques. Dans ce modèle, le poids, qui caractérise la macro-particule, reste constant dans le temps. Notons que l'on peut imaginer des modèles différents de macro-particules, soit avec des poids variables, soit une représentation autre que ce modèle de particule-point (masse de Dirac).

Donc, en termes plus mathématiques, f est décomposée en une somme finie de masses de Dirac dans l'espace des phases

$$f_N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \sum_{k=1}^N \omega_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_k). \quad (11)$$

A l'instar des vraies particules, le suivi lagrangien de ces macro-particules a un sens, puisque l'on montre que si on décompose la fonction de distribution initiale ainsi, alors (sous certaines hypothèses pour les coefficients de l'équation de Vlasov) il existe une unique fonction de distribution qui s'écrit sous cette même forme (11), où $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k(t)$ et $\mathbf{p}_k = \mathbf{p}_k(t)$ sont solutions du système différentiel

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}_k(t) = \mathbf{v}_k(t), \quad \mathbf{x}_k(0) = \mathbf{x}_k^0, \quad (12)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_k(t) = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{p}_k(t), t)}{q}, \quad \mathbf{p}_k(0) = \mathbf{p}_k^0. \quad (13)$$

Ce système différentiel est simplement le système des équations du mouvement pour les macro-particules: la k -ième macro-particule est à la position \mathbf{x}_k , se déplace à la vitesse \mathbf{v}_k , et est accélérée d'après la force \mathbf{F} agissant sur la particule.

Ce modèle de macro-particules fournit une expression simple des densités de charge et de courant. Si on porte (11) dans les moments de f (8), on trouve

$$\rho_N(\mathbf{x}, t) = q \sum_{k=1}^N \omega_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k), \quad \mathbf{J}_N(\mathbf{x}, t) = q \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{v}_k(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k). \quad (14)$$

Pour résoudre les équations du mouvement (12) et (13), il est nécessaire de connaître le champ électromagnétique agissant sur les particules. La méthode Particle-In-Cell (PIC) consiste à calculer la solution des équations de Maxwell sur un maillage (de l'espace physique seulement) et d'en déduire, par interpolation, les champs à la position des macro-particules. Celles-ci sont alors avancées dans l'espace des phases en résolvant numériquement les équations du mouvement (12) et (13) par un schéma en temps pour équations différentielles.

Pour résoudre les équations de Maxwell sur le maillage, il faut définir les termes sources ρ et \mathbf{J} sur le maillage. Avec le modèle de macro-particules choisi, ces sources sont des

sommes de masses de Dirac. Il faut donc régulariser ces distributions, afin de les projeter sur le maillage et obtenir les valeurs de ces termes sources en chaque noeud du maillage. On les régularise en les appliquant à une fonction plus régulière S_i , définie pour chaque noeud i et supposée intégrable et à support compact. Il en résulte pour le modèle de macro-particules ponctuelles choisi, que les densités de charge et de courant sont données par

$$\rho_h(\mathbf{x}_i, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \rho_N(\mathbf{x}, t) S_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = q \sum_{k=1}^N \omega_k S_i(\mathbf{x}_k) \quad (15)$$

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{x}_i, t) = \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{J}_N(\mathbf{x}, t) S_i(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = q \sum_{k=1}^N \omega_k \mathbf{v}_k(t) S_i(\mathbf{x}_k). \quad (16)$$

La fonction S_i est appelée fonction de forme ou facteur forme au noeud i . On voit que, dans l'espace physique \mathbf{x} , cela correspond à interpoler les valeurs de la position des particules à la position des noeuds du maillage.

Une façon différente de voir cette régularisation est celle du physicien qui se demande quel modèle de macro-particule est ‘‘considéré’’ par les équations de Maxwell? En effet, ce point de vue permet de s’affranchir de la représentation des macro-particules en tant que charges ponctuelles, et de leur attribuer une certaine forme, une étendue et une régularité. Ces propriétés sont alors données par les fonctions d’interpolation S_i .

Deux références de base sur la méthode PIC sont les ouvrages de Birdsall et Langdon [13], et de Hockney et Eastwood [67]. L’avantage évident est que l’on ne maille plus l’espace des phases, mais seulement l’espace physique. Pourtant, la représentation en masses de Dirac est a priori plutôt paradoxale. En effet, pour obtenir l’équation de Vlasov, on néglige les effets individuels des particules physiques, et on passe d’une description particulière à une description continue des effets collectifs des particules à travers la fonction de distribution. L’utilisation de cette décomposition ramène donc à nouveau le problème à une description particulière mais avec un nombre réduit de particules. Ceci peut sembler quelque peu incohérent et rendre discutable une telle méthodologie.

De fait, décrire le système par un nombre réduit de particules a forcément des conséquences négatives (ne serait-ce que la non conservation de la longueur de Debye). Celles-ci se manifestent essentiellement sous la forme de fluctuations dans la fonction de distribution et les moments associés. Prenant un caractère aléatoire soit dès le début au moment de l’initialisation, soit au cours du temps, ces fluctuations sont considérées comme un bruit, inhérent à la méthode. Malgré cet inconvénient, la méthode PIC donne de bons résultats pour les quantités globales, ce qui suffit souvent pour les besoins de l’utilisateur. Il faut beaucoup de macro-particules pour obtenir une description précise de la fonction de distribution. Ceci est bien illustré par E. Sonnendrücker [53], lors de comparaisons entre une méthode PIC et une méthode semi-lagrangienne. Si on veut être aussi précis avec la méthode PIC, il faut tellement de macro-particules que la méthode n’est pas plus efficace. L’intérêt donc est de pouvoir appliquer la méthode PIC avec moins de particules, en acceptant un niveau significatif de bruit, du moment que l’on obtient des résultats

physiques pertinents (tout l'art est d'éviter des instabilités numériques qui modifient sensiblement les simulations).

La discussion des méthodes de discrétisation des équations de Maxwell concerne les méthodes classiques que sont les différences finies (DF), les volumes finis (VF) et les éléments finis (EF). A celles-ci s'ajoutent des méthodes de Galerkin discontinues (GD) dont l'utilisation en électromagnétisme est plus récente. D'autres méthodes existent mais ne seront pas discutées, comme les méthodes spectrales ou la méthode des potentiels retardés (équations intégrales en temps) par exemple. Les méthodes spectrales sont en effet difficiles à adapter à des géométries complexes. Les méthodes d'équations intégrales en temps sont peu utilisées en pratique, sans doute car elles obligent à traiter simultanément l'ensemble des pas de temps. Pour chacune de ces familles de méthodes (DF, VF, EF, GD), nous analyserons une ou plusieurs méthodes particulières présentées dans la littérature, ainsi que des variantes et extensions existantes ou envisageables, afin de dégager une méthode ayant une certaine capacité d'évolution.

La présentation commencera avec le schéma de DF de Yee [115, 125]. C'est en effet la méthode de référence, largement utilisée, notamment dans les codes commerciaux. Concernant les EF, différentes méthodes se sont développées, à cause de difficultés inattendues lors de leurs premières applications aux équations de Maxwell. En particulier, leur histoire est associée à l'apparition de modes parasites lors de l'utilisation des EF nodaux classiques (où les inconnues sont les trois composantes des champs au noeuds du maillage). Une discussion sur ce sujet spécifique, permettant de clarifier ce point, est proposée en annexe. Cela explique en partie l'évolution des méthodes d'EF dans deux directions principales: les EF nodaux sur une formulation de Maxwell contrainte (formulation mixte avec imposition des contraintes de divergence à travers des multiplicateurs de Lagrange) et les EF d'arête où les degrés de liberté, pour les EF de plus bas ordre, sont les composantes tangentielles sur les arêtes des éléments. Les premiers ont été choisis par Assous et al [6] pour les codes Maxwell-Vlasov M2V et M3V, développés au CEA au début des années 90. Les seconds, éléments dits de Nédelec ou de Raviart-Thomas, ou encore éléments d'arête, sont les éléments choisis pour le code PALAS, développé au CESTA, pour résoudre les équations de Maxwell en régime harmonique ou temporel [95]. Une troisième méthode d'EF est discutée, à savoir celle de Cohen-Monk développée à l'ONERA [37] (c'est un cas particulier d'éléments d'arête). Deux méthodes de VF sont décrites. La méthode de Hermeline [62], qui a été codée en 2D dans M2V, est une extension du schéma de Yee pour des maillages non orthogonaux. La méthode de Remaki développée à l'INRIA [104] s'appuie sur une écriture des équations de Maxwell comme une loi de conservation, et applique la méthode de VF pour ce type de problème. Les méthodes de GD sont des extensions de ce point de vue, où les champs ne sont plus constants par maille, mais sont approchés par des polynômes d'ordre supérieur. Trois variantes sont présentées: la méthode d'E. Sonnendrücker à Strasbourg [111] (développée sur la base de la méthode de Hesthaven [64]; elle a également été développée de façon similaire par S. Piperno à l'Inria [101] et M. Sesquès au CESTA [109]), la méthode de Ferrières de l'ONERA qui est la variante "discontinue" des EF de Cohen-Monk [34], et une méthode particulière de Piperno, avec des bases de polynômes à divergence nulle [26].

L'objet du rapport consiste donc à présenter ces méthodes de résolution des équations de Maxwell, en précisant leurs avantages et leurs inconvénients afin de choisir la mieux adaptée au couplage au solveur PIC du code Brennus. Pour cela, la section 2 décrit la méthode PIC implémentée et les principales caractéristiques de cette méthode. Nous rassemblons un certain nombre d'informations destinées à avoir une vision des évolutions possibles du solveur PIC, en conjonction avec le choix et l'évolution du solveur Maxwell. La section 3 présente et analyse les différents solveurs de Maxwell. La grille d'analyse employée est uniforme, pour bien montrer les similitudes et les différences, et faire ressortir les avantages et inconvénients des différents solveurs (ainsi la présentation peut s'écarter plus ou moins de la présentation originale faite par les auteurs dans leurs articles). La section 4 présente les critères d'appréciation choisis pour notre discussion. En section 5, nous proposons un tableau synthétique signifiant pour chaque méthode si elle répond ou non à ces différents critères. S'ensuit alors en section 6 une discussion détaillée des méthodes permettant d'argumenter la réponse donnée dans le tableau de la section 5. Cette discussion mène alors à la conclusion dans laquelle nous résumons nos propositions.

2 Principales problématiques liées à la résolution de Maxwell-Vlasov par une méthode PIC

Cette section commence par une brève description du solveur PIC implémenté dans Brennus (nous appelons solveur PIC l'ensemble des étapes de la méthode PIC autre que le solveur Maxwell). Puis, nous passons en revue certaines caractéristiques des méthodes PIC. Le bruit numérique est discuté en premier lieu, puis le phénomène numérique d'auto-chauffage qui lui est lié. Une discussion sur les fonctions d'interpolation est ensuite proposée. Des problèmes spécifiques sont soulevés, à savoir l'autoforce, l'effet Cerenkov numérique et le problème de la conservation de la charge. Quelques remarques sur le maillage et le raffinement, puis sur le filtrage sont données. Enfin, une discussion de résultats théoriques et numériques de convergence des méthodes PIC souligne quelques points intéressants. La section se conclut par un paragraphe qui résume ces informations en établissant un lien critique avec le choix d'un solveur Maxwell.

2.1 Description du solveur PIC utilisé

Le principe de la méthode PIC a été présenté en introduction. Nous résumons brièvement les choix effectués pour le solveur PIC de la plateforme Brennus. Le détail est donné dans le rapport [112].

En plus du solveur résolvant les équations de Maxwell ou de Poisson, sur un maillage structuré ou non, nous distinguons trois étapes de la boucle en temps pour avancer les particules : l'interpolation des champs électromagnétiques à la position des particules, le schéma temporel intégrant les équations de la dynamique pour les particules, et l'interpolation assurant la répartition des densités de charge et de courant sur le maillage. A

ces étapes s'ajoutent l'initialisation des positions, vitesses et poids des macro-particules, ainsi que le traitement des conditions aux limites.

Dans le cas d'un maillage structuré, les deux étapes d'interpolation sont réalisées par des fonctions splines, implémentées jusqu'à l'ordre 2. Dans le cas d'un maillage non structuré, elles sont obtenues par une approximation de type éléments finis linéaires. L'intégration des équations de Newton est effectuée par un schéma saute-mouton (pous-seur de Boris).

La localisation des particules sur maillage structuré est aisée puisqu'il suffit de prendre la partie entière d'une quantité liée à la position de la particule pour retrouver la position du noeud. Sur maillage non structuré, l'information est stockée en mémoire. Les coordonnées d'une particule sont calculées à partir des coordonnées barycentriques de la maille qui la contient.

2.2 Quelques caractéristiques générales des solveurs PIC et liens avec le choix d'un solveur Maxwell

2.2.1 Bruit numérique

La méthode PIC fournit des résultats bruités. Nous rassemblons dans cette section des informations sur ce point essentiel. Comme nous l'avons dit en introduction, la présence de bruit n'empêche pas la méthode de donner des résultats physiques pertinents, notamment pour les quantités globales comme l'énergie. Mais il faut garder un point de vue critique sur les résultats obtenus. En effet, une référence récente illustre bien le danger [97]. Cet article clôt une polémique concernant l'obtention de résultats différents par deux équipes pour la résolution d'un problème en microturbulence de plasma alors que des paramètres similaires avaient été utilisés. Une des deux équipes a effectué des calculs par une méthode PIC et les auteurs dans [97] parviennent à mettre en évidence que la différence de résultat provient du bruit de cette résolution PIC, et n'est pas à mettre sur le compte d'une quelconque réalité physique.

Différentes sources du bruit

Pour tenter de réduire le bruit dans les simulations, il faut déjà comprendre pourquoi il y en a. En fait, plusieurs sources de fluctuations existent. Nous les précisons ci-dessous. La première source de fluctuations vient de la décomposition de f en une somme finie de distributions à support compact. Autrement dit, l'utilisation d'un nombre fini de macro-particules discrètes pour représenter la fonction de distribution apporte clairement une granularité à la représentation. Du point de vue du système de Maxwell, cette granularité, qui se traduit dans les termes sources ρ et \mathbf{J} , est atténuée grâce à l'interpolation sur le maillage par une fonction de forme plus régulière et plus étendue.

Cette première source de fluctuations est plus ou moins présente dès le début de la simulation selon la façon d'initialiser la fonction de distribution à $t = 0$. Un choix naïf consiste

à répartir les macroparticules régulièrement dans l'espace des phases, et à leur attribuer un poids dépendant de la valeur de la fonction de distribution. L'inconvénient est que les zones d'intérêt sont peu représentées à moins d'utiliser un très grand nombre de particules. Cela induit un bruit numérique sous la forme d'oscillations importantes, mais sans aspect aléatoire initialement. Un second choix consiste à considérer les particules comme un échantillon d'une loi de probabilité donnée par la fonction de distribution. Les poids sont alors identiques et les particules représentent bien mieux les zones d'intérêt. Cette méthode d'initialisation est meilleure, mais elle souffre d'un bruit numérique encore important et à caractère aléatoire. Ce point de vue probabiliste permet d'avoir une idée de la dépendance du bruit par rapport au nombre de particules. En effet, en appliquant la loi des grands nombres, on s'aperçoit que les moments de f sont approchés avec une erreur qui décroît en $1/\sqrt{N}$. Cet argument simple montre qu'il faut augmenter beaucoup le nombre de particules pour réduire significativement ces fluctuations.

Pour terminer sur l'initialisation, notons l'utilisation de méthodes dites "quiet start". Il s'agit de remplir l'espace des phases à l'aide de suites de nombres, non aléatoires, qui permettent d'obtenir une dépendance du bruit numérique en $1/N$. Nous renvoyons à [11, 75] pour une présentation de ces techniques d'initialisation et des références.

Nous venons de voir que cette première source de fluctuations, dues à la représentation discrète de f , induit des fluctuations spatialement à $t = 0$. Elle induit également des fluctuations en temps. En effet, la dynamique des macro-particules subit des variations à cause de la présence d'un nombre fini de macro-particules voisines. L'équation de Vlasov modélise les effets collectifs des particules physiques dans un plasma (ou faisceau de particules). L'orbite d'une particule test, dans un tel plasma supposé non collisionnel, correspond localement à un mouvement rectiligne. Mais, lorsque l'équation de Vlasov est discrétisée par des macro-particules ponctuelles, l'orbite d'une particule test est perturbée, d'autant plus qu'il y a peu de macro-particules dans la sphère de Debye. Il en résulte que même si on part d'une distribution régulière des macro-particules, cette dynamique perturbée de chacune des macro-particules finit par entraîner l'apparition de fluctuations à caractère aléatoire. En fait, quelle que soit la méthode d'initialisation, un cas test décrit dans [11] montre qu'une simulation initialisée par "quiet start" rattrape rapidement le même ordre d'erreur et de fluctuations qu'une simulation initialisée aléatoirement. En particulier, on en déduit qu'au bout d'un certain temps, la dépendance du bruit dans une simulation avec "quiet start" devient en $1/\sqrt{N}$.

La modélisation qui mène à l'équation de Vlasov est valable dans le temps jusqu'à ce que les collisions entre particules physiques aient un effet significatif par rapport aux effets collectifs. Une mesure de cette durée est donnée par le temps de collision τ_c , temps caractéristique pour que la trajectoire d'une particule soit déviée significativement. En introduisant de nouveau des macro-particules pour discrétiser l'équation de Vlasov, on retrouve des effets individuels, des collisions, bien que celles-ci soient seulement des artefacts numériques qui n'ont plus rien à voir avec les collisions des particules physiques. Cependant, en adoptant ce point de vue, on peut définir un temps de collision des macro-particules, et par là même un temps de validité de la simulation. Des tests numériques

effectués en 2D par Hockney et Eastwood [67] ont permis d’obtenir l’estimation

$$\frac{\tau_c}{\tau_p} = N_D \left(1 + \frac{W^2}{\lambda_D^2} \right), \quad (17)$$

où $\omega_p = 2\pi/\tau_p$ est la fréquence plasma, N_D est le nombre de macro-particules dans un carré de côté la longueur de Debye λ_D , et W est une mesure de l’étendue des macro-particules régularisées sur le maillage. Ainsi, on voit que le temps de collision augmente linéairement avec le nombre de macro-particules dans la sphère de Debye. On remarque aussi que plus les macro-particules sont étendues, plus le temps de collision est grand. En effet, si on considère, comme plus haut, une particule test plongée au milieu des macro-particules, son orbite sera moins perturbée si elle voit les autres particules comme un milieu plus uniforme. Des macro-particules plus étendues tendent donc à mieux approcher un plasma non collisionnel.

La deuxième source de bruit est la dépendance au maillage, qui est introduit dans la méthode PIC pour calculer les champs électromagnétiques. Poursuivons le parallèle entre un plasma “continu” constitué de particules physiques, et un plasma “discret” constitué de macro-particules numériques. Les forces inter-particulaires qui vont déterminer la dynamique des macro-particules ne dépendent pas seulement de la distance entre les macro-particules, mais aussi de la position des particules par rapport au maillage. Des fluctuations spatiales en résultent. Le passage d’une particule d’une maille à une autre génère également des fluctuations dans le temps qui contribuent au bruit numérique. Ces deux types de fluctuation sont atténués par la représentation plus étendue et régulière des macro-particules à l’aide des fonctions de forme.

Dans l’espace de Fourier, la dépendance au maillage se traduit par le phénomène d’aliasing. Le maillage ne résout qu’un intervalle de nombres d’onde. Selon le critère de Nyquist, une fonction ne peut être représentée exactement sur un maillage de pas Δx que si le support de son spectre est inclus dans l’intervalle $[-\pi/\Delta x; \pi/\Delta x]$. Dans le cas inverse, le phénomène d’aliasing se produit. Il correspond au fait que le maillage en question ne peut pas distinguer, en évaluant la fonction aux noeuds du maillage, les composantes d’ondes décalées d’un multiple de $2\pi/\Delta x$ dans le spectre de Fourier. En effet, il faut bien rappeler que la discrétisation dans l’espace physique induit une périodisation dans l’espace de Fourier. Ainsi, des fluctuations non résolues par le maillage peuvent induire une erreur dans les plus grandes longueurs d’onde dûe à la contribution des alias du spectre de Fourier.

Typiquement, cette source d’erreur devient importante dès que la maille ne résout pas assez bien la longueur de Debye. En effet, la longueur de Debye est la plus petite longueur du plasma étudié, en deçà de laquelle les effets individuels des particules physiques ont été lissés pour aboutir à l’équation de Vlasov. D’après le critère de Nyquist, pour éviter l’aliasing, il faut donc choisir un pas d’espace suffisamment petit par rapport à cette longueur. Comme il est également nécessaire d’utiliser suffisamment de particules par maille, le nombre total de particules peut vite devenir trop grand pour des simulations réalistes. A partir de là, il y a deux possibilités: soit on se limite à des problèmes que l’on

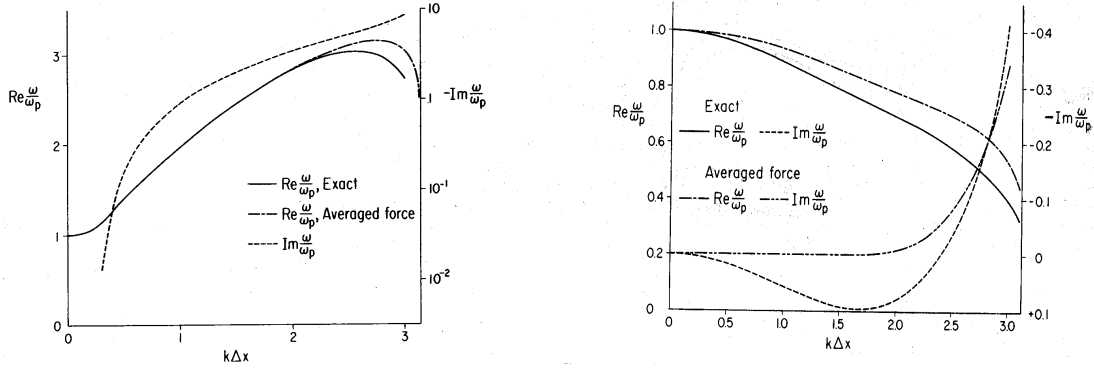


FIG. 1 – Relations de dispersion pour une distribution initiale de particules uniforme en espace et maxwellienne en vitesse, en 1D, avec une résolution PIC (NGP et schéma de Yee). A gauche, le graphe correspond à une largeur de maille égale à la longueur de Debye $\Delta x = \lambda_D$. A droite, le graphe correspond à $\Delta x = 10\lambda_D$.

peut traiter en restant dans les limites de validité de la méthode (mais les simulations en trois dimensions ne sont pas possibles en général); soit on exploite la méthode au-delà de sa limite de validité au risque de voir les effets dûs à la présence du maillage ne plus être négligeables. Cette seconde approche est souvent adoptée dans la communauté de la simulation numérique en physique des plasmas, en essayant de comprendre et de maîtriser les effets numériques [13, 67].

Pour illustrer ce problème d'aliasing, nous donnons des résultats relevés dans [67]. Il s'agit d'une analyse linéaire en 1D pour une distribution initiale uniforme en x et maxwellienne en vitesse. La relation de dispersion est obtenue pour une méthode PIC basée sur le schéma de Yee et des splines d'ordre 0 (méthode NGP: Nearest Grid Point; la charge d'une macro-particule est affectée au noeud le plus proche). Si la largeur de maille est égale à la longueur de Debye $\Delta x = \lambda_D$, on observe sur la courbe de dispersion que l'aliasing n'affecte que les plus courtes longueurs d'onde, typiquement pour $k\Delta x > 2$ (Figure 1-gauche). Si on choisit un maillage plus grossier avec $\Delta x = 10\lambda_D$, la courbe de dispersion numérique suit la même tendance que la courbe exacte, mais toutes les longueurs d'onde sont erronées quantitativement. Pire encore, la fréquence a une partie imaginaire positive pour les grandes longueurs d'onde entraînant une instabilité linéaire, alors que la solution physique est stable (Figure 1-droite). La simulation numérique est fautive qualitativement. Cette instabilité induit un chauffage numérique du plasma.

Nous pouvons combiner ces constatations concernant les fluctuations de f et l'aliasing pour faire la remarque suivante. Lorsque f est décomposée en macro-particules, et ses moments projetés sur le maillage grâce à une fonction de forme, les fluctuations issues de statistiques pauvres correspondent à des oscillations inférieures à la taille de la maille. Donc, elles contribuent au spectre de Fourier de ρ ou \mathbf{J} par l'intermédiaire des alias. Il en résulte que par construction même de la méthode, ρ ou \mathbf{J} n'ont pas des spectres de Fourier à bande limitée et l'aliasing se produit nécessairement. L'importance de ces contributions dépend donc de l'amplitude de ces composantes d'onde dûes

aux fluctuations. Cependant, cette remarque doit être relativisée par rapport au spectre de Fourier des quantités discrétisées, par exemple lorsque l'on considère un faisceau de particules. Un faisceau de particules correspond à une densité donnée par une fonction créneau. Or, une fonction créneau en x a un spectre de Fourier donné par la fonction $\text{sinc}(x) = \sin(x)/x$. Toutes les composantes de Fourier contribuent, et le spectre décroît très lentement vers 0 quand k tend vers l'infini. Pour un maillage de pas d'espace Δx , les composantes $|k| > \pi/\Delta x$ contribuent à l'aliasing et modifient le spectre de Fourier dans la zone résolue. Dans ce cas, cette contribution a de fortes chances d'être plus importante que celle des fluctuations. Cela devient moins vrai si l'on prend peu de particules par maille (entraînant de fortes fluctuations), et une maille qui résout bien λ_D .

Une dernière source de fluctuations est la présence d'une auto-force due à la représentation des macro-particules avec une taille finie. Elle est discutée spécifiquement plus loin.

Réduire le bruit

En résumé, nous avons relevé trois sources de bruit dans la méthode PIC: les fluctuations dues au faible nombre de macro-particules pour représenter la fonction de distribution, la dépendance au maillage et éventuellement l'autoforce.

Bien choisir les paramètres numériques est le premier moyen de réduire le bruit:

- augmenter le nombre de macro-particules améliore les statistiques pour représenter la fonction de distribution. On a vu qu'au bout d'un certain temps, le bruit dû à la décomposition en macro-particules décroît en $1/\sqrt{N}$.
- lorsque les moments de f sont calculés et projetés sur le maillage grâce à une fonction de forme, cela revient à considérer des macro-particules de taille finie. Augmenter la largeur du support des fonctions de forme réduit les fluctuations dynamiques dues au faible nombre de macro-particules dans la sphère de Debye.
- l'effet d'aliasing peut être réduit au minimum en choisissant une taille de maille Δx suffisamment petite pour résoudre la queue du spectre de Fourier des densités de charge et de courant.
- de plus, l'utilisation d'une fonction de forme agit comme un filtre sur ces densités. Par conséquent, plus celle-ci sera régulière, plus son spectre va décroître rapidement vers 0 et donc lisser la queue du spectre des densités qui sont discrétisées. Dans le cas des splines, il faut donc augmenter l'ordre m .
- l'auto-force, si elle est présente, n'a d'influence que si peu de particules par maille sont utilisées. Augmenter le nombre de particules par maille rend sa contribution négligeable par rapport à l'influence des macro-particules voisines.

L'utilisation de filtres est un moyen simple de lisser les courtes longueurs d'onde pour réduire l'aliasing. Ces techniques sont discutées plus bas. Un cas particulier est donné par la méthode dite "quiet Particle-Mesh" de Hockney *et al* [68]. Il s'agit d'ajouter une étape de correction, soit dans le domaine de Fourier, soit dans le domaine physique. Cette correction est réalisée de sorte à améliorer l'erreur pour des petits nombres d'onde par l'intermédiaire de coefficients déterminés empiriquement pour cela. On parle de compensation. Elle permet de corriger notamment une grande partie des erreurs d'anisotropie introduites par le maillage. La correction agit également comme un filtre pour les grands nombres d'onde.

D'après Hockney et Eastwood, le problème majeur des simulations PIC est l'aliasing [67]. En plus de la technique de compensation/filtrage que l'on vient de voir, ils présentent une technique pour éliminer la contribution des alias impairs, nommée "interlacing" (voir leur sections 7-8, p260). L'idée est de profiter de la parité du spectre de Fourier. Considérons une discrétisation de pas Δx où le point 0 est un noeud du maillage. Le spectre de la fonction discrétisée est constituée du spectre de la fonction continue, centré en $k = 0$, et de tous ses alias centrés périodiquement en $k + 2\pi p/\Delta x$ (p entier). Considérons également la même discrétisation mais décalée d'un demi-pas d'espace. Alors, le spectre va être similaire à la différence que les alias impairs ($p = \pm 1, \pm 3, \dots$) sont de signe opposé. En prenant la moyenne de ces deux spectres, les contributions des alias impairs s'annulent. Le phénomène d'aliasing est donc réduit à la contribution des alias $p = \pm 2$ principalement.

Le phénomène d'aliasing est réduit par l'utilisation de maillages irréguliers. En effet, l'aliasing correspond au fait que des composantes de Fourier de longueurs d'onde différentes ne peuvent pas être distinguées sur un maillage uniforme, ce qui est dû à la périodicité de l'échantillonnage de ces ondes sur le maillage. Sur un maillage irrégulier, il est possible qu'une certaine périodicité existe, mais elle est fortement réduite et par là-même l'erreur d'aliasing. Des techniques d'échantillonnage non uniforme se sont d'ailleurs développées en traitement du signal pour réduire, voire éliminer l'aliasing lorsque le signal est sous-échantillonné. Toutefois, pour que ce soit efficace, l'échantillonnage ne doit pas être effectué n'importe comment. Par exemple, modifier un échantillonnage périodique simplement en modifiant la position des noeuds selon des fluctuations aléatoires ne permet pas d'éliminer l'aliasing. L'utilisation d'un échantillonnage pseudo-aléatoire est préconisé.

Réduire les fluctuations statistiques en augmentant N est difficile à cause de la faible décroissance du bruit en $1/\sqrt{N}$. Pour certaines applications, les fluctuations physiques, δf , sont bien plus petites que la fonction de distribution totale $f = f_0 + \delta f$, somme d'une partie moyenne et d'une perturbation. Le bruit numérique peut être grandement réduit si la méthode PIC est appliquée seulement à la perturbation δf . Soit la partie moyenne f_0 est connue (par exemple un état d'équilibre), soit elle est obtenue par une approximation fluide (méthodes hybrides fluide-cinétique). Cette technique permet de réduire le niveau de bruit de plusieurs ordres de grandeur quand elle peut être appliquée. Une présentation de la méthode est donnée par Sydora [114]. Le premier inconvénient de

cette méthode est qu'elle devient inefficace si δf est du même ordre que f_0 . Cela réduit donc son champ d'application pratique (dans la littérature, les applications concernées sont essentiellement des problèmes de fusion magnétique). Le second inconvénient provient de la non-positivité de δf , ce qui nécessite l'utilisation de fonctions de forme non positives.

Aux méthodes générales que l'on vient d'évoquer, il faut ajouter la possibilité d'agir sur la répartition des macro-particules à chaque pas de temps, ou de temps en temps. L'ajout d'une telle étape peut permettre de garder un faible niveau de bruit, mais son coût la rend inopérante en général. Par exemple, si une redistribution des macro-particules était effectuée à chaque pas de temps par une technique d'initialisation "quiet start", on imagine pouvoir conserver un taux de convergence en $1/N$ au cours du temps, contrairement à ce qu'il se passe si on ne le fait qu'au début. Mais, pour définir les quantités aux nouvelles positions des particules, il faut faire une étape d'interpolation à partir des anciennes positions, en plus de la phase de répartition elle-même, le tout étant trop coûteux. Agir sur la répartition des macro-particules peut consister à redistribuer simplement les positions, mais aussi à regrouper des particules proches en une seule ("particles merging") ou au contraire à séparer une particule en plusieurs de poids inférieur ("particle splitting"). Le poids des particules numériques peut aussi varier dans le temps. Les difficultés de ce type de techniques concernent notamment la conservation de la charge, ou le contrôle du poids des particules.

2.2.2 Chauffage numérique

Un des effets du bruit numérique est le chauffage artificiel qu'il peut générer. En effet, la présence du maillage induit un phénomène d'aliasing (pour les valeurs de paramètres numériques utilisés en pratique), lequel entraîne un auto-chauffage non physique du plasma.

Des expériences numériques en 2D (et 2 dimensions pour v), réalisées par Hockney [68], ont permis de mesurer un temps de chauffage caractéristique. Celui-ci est défini comme le temps τ_h pour que la moyenne quadratique de l'augmentation de l'énergie cinétique des particules soit égale à l'énergie thermique, $mv_t^2/2$, où v_t est la vitesse thermique des particules (initialisées par une maxwellienne). Les mesures faites pour un solveur PIC avec les méthodes d'interpolation NGP (spline d'ordre 0) et CIC (spline d'ordre 1) montrent une évolution linéaire en temps de l'énergie cinétique. La méthode CIC a un temps de chauffage 3 fois plus grand que la méthode NGP. A $t = \tau_h$, l'erreur sur l'énergie totale est environ 25% de l'énergie de départ.

Ce chauffage numérique dépend fortement des pas d'espace et de temps. En particulier, une instabilité non physique a été mise en évidence [13] lorsque Δx est trop grand par rapport à λ_D . En effet, liée à la contribution des alias dans le spectre de Fourier, cette instabilité, que l'on a évoquée dans le paragraphe sur le bruit numérique, se caractérise par une augmentation exponentielle de l'énergie interne du plasma. Heureusement, cette

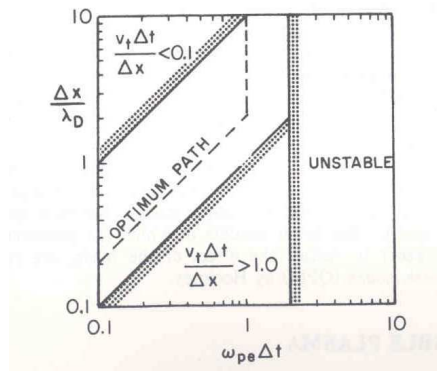


FIG. 2 – Zones de stabilité en fonction des pas de temps et d’espace.

instabilité s’autorégule. En effet, l’augmentation de la température induit une augmentation de la longueur de Debye. Quand elle est de l’ordre du pas d’espace, elle revient dans une zone stable de l’espace des paramètres, et le chauffage redevient linéaire en temps. Toutefois, l’augmentation artificielle de la température peut fausser la simulation, et l’instabilité numérique “temporaire” peut modifier la physique.

Outre cette instabilité, les expériences numériques d’Hockney ont mis en évidence qu’il existe une relation entre le pas d’espace et le pas de temps, telle que le chauffage soit minimisé. La figure 2 présente les zones de stabilité de l’espace de paramètres. La région à droite est instable à cause du schéma en temps; la limite est $\omega_p \Delta t = 2$ sur la figure correspondant à un plasma “froid”, elle devient $\omega_p \Delta t = 1.62$ pour un plasma thermique. Sur le schéma ne figure pas la zone d’instabilité citée ci-dessus, due à l’aliasing. Il faut donc ajouter une frontière à la zone de stabilité, donnée par $\Delta x / \lambda_D \approx 5$. Dans la région $v_t \Delta t / \Delta x > 1$, des particules se propagent sur une distance supérieure à Δx en un pas de temps ce qui limite l’utilisation des grands pas de temps avec de petits pas d’espace (la région $v_t \Delta t / \Delta x < 0.1$ correspond à une zone où des problèmes numériques sont constatés sans qu’une explication ne soit fournie; ceux-ci sont sans doute liés à l’accumulation d’erreurs quand on choisit un pas de temps trop petit par rapport au temps qu’il faut aux particules pour traverser une maille).

Au sein de la région stable, une relation optimale entre le pas d’espace et le pas de temps, $v_t \Delta t = \Delta x / 2$, est observée (jusqu’à $\omega_p \Delta t = 1$). Si on diminue Δx ou Δt seul, le chauffage devient plus important au lieu de se réduire. Nous n’avons pas d’explication complètement satisfaisante du phénomène.

2.2.3 Fonctions d’interpolation

Les fonctions d’interpolation sont les fonctions continues qui permettent d’obtenir une valeur à n’importe quelle position à partir d’une quantité discrète. Comme nous l’avons vu en introduction, les densités de charge et de courant sont définies sur le maillage par l’intermédiaire de fonctions de forme. Ce sont les fonctions d’interpolation des densités

connues à la position des particules et que l'on interpole à la position des noeuds du maillage. On parle de répartition des densités sur le maillage. Concrètement en effet, cette étape revient à affecter une fraction de la charge (ou du courant) d'une macro-particule aux noeuds les plus proches. Dans la présentation faite plus haut en introduction, la même fonction de forme S_i est utilisée pour la charge et le courant, mais elle peut être différente en général. D'ailleurs, si on utilise la même fonction, alors la conservation de la charge n'est pas assurée. L'ordre d'erreur de l'interpolation doit en principe correspondre à l'ordre d'erreur pour le calcul des champs. En effet, si on résout les équations de Maxwell à l'ordre $p > 2$ à partir de sources ρ et \mathbf{J} connues avec une erreur d'ordre 2, on ne peut pas espérer obtenir une erreur sur les champs effectivement d'ordre p .

Ajouté à ce rôle d'interpolant, ces fonctions d'interpolation particules-grille jouent le rôle de représentation de taille finie des macro-particules sur le maillage. Pour cette raison, il faut leur donner une étendue et une régularité les plus grandes possibles pour atténuer les fluctuations dues à la granularité et à l'aliasing. En pratique malheureusement, la limitation en temps de calcul restreint la largeur des macro-particules (c'est-à-dire que l'on ne peut répartir les densités que sur un petit nombre de noeuds du maillage). Un compromis précision/efficacité est donc nécessaire.

Une seconde étape d'interpolation est réalisée pour connaître les champs à la position des particules, une fois que l'on a résolu les équations de Maxwell sur le maillage. C'est l'étape de retour, grille-particules. La même fonction d'interpolation peut être employée mais pas nécessairement. Cependant, si le solveur Maxwell est le schéma de Yee, utiliser la même fonction évite la contribution de l'auto-force (voir ci-dessous). L'ordre d'erreur d'interpolation doit être le même que l'ordre d'erreur sur le calcul des champs. En effet, ce sont les valeurs interpolées qui sont utilisées pour définir les forces qui régissent la dynamique des macro-particules.

Une interpolation linéaire est aisément réalisée que ce soit sur un maillage régulier ou non, assurant une interpolation à l'ordre 2. Nous discutons maintenant la possibilité de monter en ordre. Avant cela, notons néanmoins que la limitation principale d'une montée en ordre est la gestion des bords du domaine physique. En effet, la montée en ordre s'accompagne naturellement de l'élargissement de la macro-particule sur une distance supérieure à une maille. Il faut donc être capable de définir ces interpolations d'ordre élevé sur les mailles de bord, en préservant l'ordre spécifié.

Maillage cartésien uniforme

Le choix des fonctions de forme assignant la charge et le courant sur le maillage est donc le fruit d'un compromis entre la réduction du bruit numérique et la réduction du temps de calcul. Le choix initial pour la méthode PIC correspond à l'affectation de la charge (ou du courant) d'une macro-particule à un seul noeud, le plus proche. C'est la technique NGP, déjà vue plus haut. Elle correspond à une fonction de forme de type créneau, fonction discontinue, non régulière, ce qui induit un fort bruit numérique. Pour

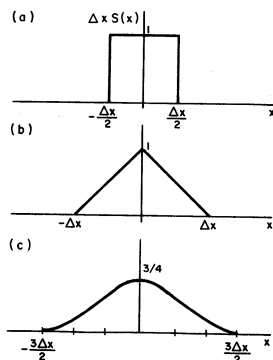


FIG. 3 – Graphe des trois premières splines après application d’un facteur d’échelle lié à la taille de la maille.

améliorer cela, une interpolation linéaire est choisie, dans la plupart des codes PIC classiques. La fonction de forme est la fonction chapeau, qui est continue, mais sa première dérivée n’est pas continue.

Pour continuer à améliorer cette étape d’interpolation sur un maillage régulier, on souhaite augmenter l’ordre d’interpolation, tout en augmentant la régularité de la fonction de forme, l’étendre sur un plus grand nombre de noeuds mais toujours un nombre fini et modéré afin de limiter le temps de calcul.

La famille des splines rassemble les différents avantages, ce qui est bien expliqué dans le livre d’Hockney et Eastwood [67]. La spline d’ordre m est telle que ses $m - 1$ premières dérivées sont continues et la m -ième dérivée est discontinue. La largeur de la fonction de forme est déterminée par un facteur d’échelle à partir des splines standard de sorte que la spline d’ordre m est de largeur $(m + 1)\Delta x$. En plus, les splines ont l’avantage d’être partout positives ce qui est important pour préserver la positivité de f . Ainsi, une extension des méthodes PIC classiques consiste à passer aux splines quadratiques.

Une étude sur l’utilisation des splines d’ordre élevé (jusqu’à $m = 6$) a été effectuée par Abe *et al* [1]. Elle confirme l’avantage qu’elles procurent pour réduire le bruit numérique, en réduisant l’erreur d’aliasing. L’erreur sur l’énergie totale est aussi améliorée. Toutefois, il faut noter que ces résultats sont rapportés pour des systèmes où seuls les phénomènes collectifs, de grande longueur d’onde, sont importants. En effet, la fonction d’interpolation agit comme un filtre, les splines ayant un spectre de Fourier qui tend vers 0 quand k tend vers l’infini d’autant plus rapidement que m est grand. C’est justement ce qui permet de réduire l’aliasing.

Maillage non uniforme

La construction des splines sur un maillage non uniforme est une question ouverte. Il faut donc faire autre chose. L’assignation de la charge (ou du courant) sur le maillage correspond à une étape de projection. Une idée consiste donc à projeter les densités sur

des bases d'éléments finis. En général, une interpolation linéaire est employée, l'interpolation NGP, d'ordre 0, étant trop bruitée. On peut utiliser des éléments finis d'ordre plus élevé, mais la régularité n'augmente pas à la limite du support de la fonction de base: elle est seulement continue.

Jacobs et Hesthaven [73] proposent différentes fonctions de forme pour un code PIC avec un solveur GD d'ordre élevé. Une possibilité est d'utiliser une fonction de forme gaussienne. Il faut noter que c'est la fonction limite des splines quand m tend vers l'infini, assurant la continuité de toutes les dérivées. En pratique, il faut tronquer la gaussienne à une largeur de quelques mailles et compléter par la constante zéro. C'est possible grâce à la convergence exponentielle de la gaussienne qui permet que les discontinuités des dérivées successives à la troncature de la gaussienne soient faibles. Bien que la gaussienne et ses premières dérivées soient non nulles à la troncature, les valeurs sont très proches de zéro (à condition de tronquer la gaussienne suffisamment loin). En pratique, la limitation en temps de calcul restreint la largeur de la gaussienne à trop peu de mailles et en général, ce n'est donc pas une bonne alternative.

Un autre choix de fonctions localement régulières pour effectuer l'interpolation sur un maillage non uniforme est basé sur la fonction cosinus, tronquée également. Mais, les dérivées impaires ne sont pas nulles. Cette fonction ne convient pas. Deux fonctions polynômiales sont alors proposées, qui sont peu coûteuses en temps de calcul. Les comparaisons des auteurs entre ces différentes fonctions d'interpolation mènent à la conclusion que le meilleur choix est la famille de polynômes

$$S_{pol1} = \frac{\alpha + 1}{\pi R^2} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]^\alpha, \quad (18)$$

où $r = |\mathbf{x}|$ est la distance au centre de la particule, R est le rayon d'influence de la fonction (elle est complétée par zéro en dehors) et α est le paramètre qui détermine le degré $m = 2\alpha$ du polynôme. Ces polynômes valent zéro en $r = R$, comme les splines, mais seules les $\alpha - 1 = m/2 - 1$ premières dérivées s'annulent et sont donc continues. A l'instar des splines, S_{pol1} se comporte comme une gaussienne si α est grand. Notons que ces fonctions polynômiales, ainsi que les autres fonctions proposées dans [73], sont toutes isotropes.

Concernant l'étape d'interpolation grille-particules, Jacobs et Hesthaven [73] n'utilisent pas ces fonctions d'interpolation. Se référant à des travaux précédents de Jacobs [74], ils citent la possibilité que cette étape d'interpolation puisse être, dans la plupart des cas, d'ordre inférieur à l'ordre d'approximation des champs. En fait, de nombreux tests leur ont montré qu'il fallait que l'ordre du polynôme d'interpolation corresponde effectivement à l'ordre du polynôme utilisé pour représenter les champs. Par conséquent, ils choisissent d'utiliser l'interpolation locale de leur méthode GD.

2.2.4 Auto-force

L'auto-force est un artefact numérique que nous avons déjà cité comme étant une source éventuelle de fluctuations supplémentaire. Elle correspond à une force générée par une

macroparticule sur elle-même [13], dûe à sa représentation étendue sur le maillage à la place du modèle de particule-point. En effet, puisque la charge d'une macro-particule est répartie sur plusieurs noeuds du maillage, chacun de ces noeuds apporte une contribution à la force de Lorentz agissant sur cette macro-particule.

Cependant, ces contributions peuvent se compenser et annihiler cette auto-force non physique. C'est ce qu'il se passe par exemple lorsque l'on résout Vlasov-Poisson avec un solveur de DF centrées et que l'on utilise la même fonction d'interpolation pour les étapes particules-grille et grille-particules [13].

En revanche, dès que l'on brise cette symétrie dans la résolution, l'autoforce est présente. On n'y échappe donc pas lorsque les équations de Maxwell sont résolues sur des maillages non structurés.

Eventuellement, on peut envisager de représenter les macro-particules par une fonction à support compact qui s'annule en son centre, comme le proposent Grigoryev *et al* [59]. Sur maillage régulier et avec une représentation linéaire, on peut alors complètement éliminer l'autoforce. Les auteurs ne présentent pas de résultats sur maillages non uniformes.

Néanmoins, l'impact de cette auto-force ne semble pas être significatif. En effet, d'un point de vue pragmatique, si suffisamment de particules par maille sont utilisées (comme c'est censé être le cas), la contribution d'une particule est petite devant l'ensemble des autres. En revanche, si peu de particules sont présentes par maille, il semble que ce soit effectivement une source supplémentaire de dépendance au maillage et de fluctuations [13, 59].

Pour la mettre en évidence, théoriquement ou sur un test numérique, il est usuel de considérer une seule particule, initialement au repos, et d'observer son mouvement sous l'action de son propre champ [13, 67, 59]. La particule oscille autour de sa position d'équilibre. La théorie prévoit une oscillation de fréquence $\omega_{self} = C(q^2/\epsilon_0 m \Delta x)^{-1/2}$, pour une particule de charge q et de masse m située dans le vide (de permittivité ϵ_0), sur un maillage de taille Δx . L'amplitude s'avère très petite dans les tests numériques [73, 109]. Cependant, ce type de test, à partir de l'équation de Vlasov qui représente les effets collectifs d'un grand nombre de particules, n'est pas vraiment pertinent.

2.2.5 Effet Cerenkov numérique

La résolution des équations de Maxwell introduit une erreur sur la phase des ondes qui se propagent dans le système. En particulier, les ondes de plus courte longueur d'onde, de l'ordre de la largeur d'une maille, sont mal résolues par la discrétisation. Par exemple avec le schéma de Yee, ces ondes se propagent plus lentement que la vitesse de la lumière

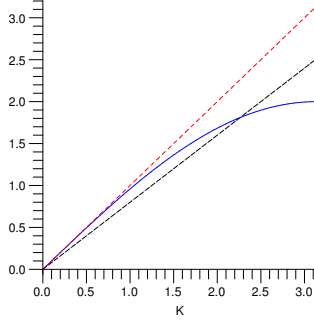


FIG. 4 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$. En rouge (trait pointillé fin): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé; en vert (trait pointillé épais): droite correspondant à une particule chargée se propageant à la vitesse $0.8c$.

physique. On le voit bien si on écrit la relation de dispersion du schéma

$$\frac{1}{c^2\Delta t^2} \sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right)\right]^2, \quad (19)$$

qui approche la relation exacte

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k^2. \quad (20)$$

Cette dispersion numérique n’est pas un problème dans nombre de simulations parce que la physique d’intérêt concerne les grandes longueurs d’onde. Cependant, quand des particules de grande énergie sont présentes, elles peuvent se propager plus rapidement que la vitesse numérique de la lumière, ce qui génère un rayonnement Cerenkov numérique, non physique (voir Figure 4).

Le rayonnement Cerenkov physique se produit lorsqu’une particule se propage dans un diélectrique avec une vitesse supérieure à c/n (vitesse de la lumière dans le milieu, où n est l’indice de réfraction). Dans notre cas, le milieu peut être le vide: c’est la dispersion numérique qui rend possible le fait que la particule “aille plus vite que la lumière”. Asous *et al* mettent en évidence l’instabilité résultante, grâce à une analyse linéaire [7]. L’effet Cerenkov numérique transfère de l’énergie de la particule aux champs. A cause d’interactions non linéaires entre les particules et les champs, cette instabilité haute fréquence se répercute sur les plus grandes longueurs d’onde et fausse la simulation PIC.

Dans un article récent sur le sujet, Greenwood *et al* [58] résument deux méthodes pour éliminer ou atténuer cet artefact numérique. L’idée générale revient toujours à modifier la relation de dispersion. Une première méthode consiste à choisir une discrétisation spatiale des équations de Maxwell avec une courbe de dispersion plus proche de la courbe exacte pour les courtes longueurs d’onde. Pour éviter ce phénomène parasite, la courbe de dispersion doit approcher la courbe exacte par dessus, i.e. la vitesse numérique doit être supérieure à la vitesse de la lumière physique. A défaut, il faut restreindre la pos-

sibilité de ce rayonnement Cerenkov en minimisant l’erreur de dispersion.

Le premier remède proposé dans [58] consiste donc à changer le solveur spatial. Dans le cas des DF, ceci peut être réalisé en utilisant d’autres points que ceux du schéma de Yee pour définir les différences. Dans [7], la méthode d’EF d’Assous [7] est modifiée dans ce but. Ce point de vue est satisfaisant vis-à-vis de l’approximation du problème physique, mais il est difficile à implémenter (notamment pour maintenir les propriétés géométriques du schéma de Yee comme celles qui permettent d’avoir la conservation de la charge).

On préfère utiliser une autre méthode en général, qui évite de changer de solveur de Maxwell. Elle consiste à utiliser un filtre pour atténuer les ondes mal résolues, responsables de l’apparition du rayonnement Cerenkov numérique. Si on introduit un filtre en temps $H(\omega)$ dans une des deux équations de Maxwell dans le domaine de Fourier, la relation de dispersion devient dans le cas du schéma de Yee

$$\frac{1}{H(\omega)c^2\Delta t^2} \sin\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \left[\frac{1}{\Delta x} \sin\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta y} \sin\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta z} \sin\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right)\right]^2. \quad (21)$$

Le filtre ne doit pas altérer la physique d’intérêt. En examinant cette relation de dispersion, il apparaît que le filtre idéal n’est pas un filtre passe-bas (un filtre passe-bas consiste à multiplier dans le domaine de Fourier par une fonction qui s’annule pour les grandes valeurs de k , et vaut 1 pour les petites valeurs de k : les composantes de courtes longueurs d’onde sont donc mises à zéro complètement). Il est caractérisé par une réponse d’amplitude $|H(\omega)|$ constante, à l’inverse d’un filtre passe-bas, laissant passer toutes les longueurs d’onde. La réponse de phase en revanche devrait être nulle pour les grandes longueurs d’onde et augmenter aux courtes longueurs d’onde, afin d’atténuer les ondes qui se propagent trop lentement. En effet, une réponse de phase non nulle introduit une partie imaginaire dans ω , qui avec le bon signe, correspond à une atténuation. Ce filtre idéal n’est donc pas un filtre passe-bas au sens strict mais il a quand même pour rôle d’atténuer les courtes longueurs d’onde au cours du temps.

Le premier filtre discuté dans [58] est le filtre de Godfrey [56]. Il est implémenté comme une modification du schéma en temps. En observant les réponses d’amplitude et de phase pour ce filtre, on observe qu’il est assez éloigné du filtre idéal. En particulier, il a une réponse de phase non nulle à toutes les longueurs d’onde, atténuant les ondes dans la partie du spectre qui a un intérêt physique.

Le second filtre présenté est celui de Friedman [55], qui est plus proche du filtre idéal et a l’avantage de garder un schéma en temps explicite.

Il ressort toutefois de l’article de Greenwood [58] qu’il doit être possible de faire mieux pour se rapprocher des propriétés du filtre idéal mis en évidence. D’un autre côté, il est intéressant de noter que l’utilisation de ce filtre idéal revient à ajouter de la dissipation numérique. La plupart des solveurs Maxwell, comme le schéma de Yee, ne sont pas dissipatifs. Un solveur de Maxwell légèrement dissipatif pourrait donc jouer ce rôle,

sans avoir à faire appel à un filtre externe (cette possibilité est discuté plus en détail p28).

2.2.6 Problème de conservation de la charge

Le problème de la conservation de la charge a été analysé récemment dans la thèse de R.Barthelmé [11]. Dans le cas continu, nous avons rappelé en introduction que si les conditions initiales vérifient les contraintes de divergence, et si l'équation de conservation de la charge

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0, \quad (22)$$

est vérifiée au cours du temps, alors les contraintes de divergence sont automatiquement vérifiées à l'intérieur du domaine et pour tout temps. Dans le cas discret, les contraintes de divergence sont aussi exactement vérifiées si l'équation de conservation de la charge discrète est vérifiée,

$$\frac{\partial \rho_h}{\partial t} + \operatorname{div}_h \mathbf{J}_h = 0. \quad (23)$$

et à condition que les opérateurs discrets vérifient la relation d'algèbre vectorielle

$$\operatorname{div}_h \mathbf{rot}_h = 0. \quad (24)$$

Ces conditions peuvent ne pas être remplies exactement, mais il est nécessaire que les contraintes de divergence soient prises en compte par un moyen ou par un autre, de sorte qu'elles soient vérifiées au moins approximativement au cours de la simulation. Avec le schéma de Yee, les opérateurs discrets vérifient bien cette propriété (24). Ainsi, la conservation de la charge ne dépend que des algorithmes définissant les densités de charge et de courant sur le maillage. Classiquement, la même méthode d'interpolation (spline d'ordre 0 ou 1) est utilisée pour répartir la charge et le courant. Cependant, l'équation de conservation de la charge n'est qu'approximativement satisfaite dans ce cas. En effet, en général, les projections sur les splines ne vérifient pas l'équation de continuité (22). La contrainte de divergence $\nabla \cdot \epsilon \mathbf{E} = \rho$ n'est alors plus assurée, pouvant conduire dans certaines simulations à des résultats non physiques.

Pour illustrer cela, nous reprenons l'argument simple de Munz *et al* [92]. Bien que l'erreur commise à chaque pas de temps soit petite, ces erreurs s'accumulent et des calculs en temps longs deviennent erronés. En effet, $|\operatorname{div} \epsilon \mathbf{E} - \rho|$ peut croître arbitrairement: supposons que $\partial_t \rho + \operatorname{div} \mathbf{J} = a$ pour tout t , où a est une petite constante non nulle. Ceci signifie que l'erreur est petite à chaque pas de temps, mais ne se compense pas en changeant de signe de temps en temps. Alors, en prenant la divergence de l'équation d'Ampère $\operatorname{div}(\epsilon \partial_t \mathbf{E} - \mathbf{rot} \mathbf{H}) = -\operatorname{div} \mathbf{J}$, nous obtenons $\partial_t(\operatorname{div} \epsilon \mathbf{E} - \rho) = -a$. Comme $\nabla \cdot \epsilon \mathbf{E} = \rho$ à $t = 0$, intégrer en temps implique $\operatorname{div} \epsilon \mathbf{E} - \rho = -at$. Donc, même si a est petit, quand t devient assez grand, l'erreur sur la contrainte de divergence peut devenir grande.

Une première méthode pour remédier à cela consiste à utiliser un algorithme de répartition du courant qui assure la conservation de la charge à partir de la répartition de la charge. La thèse de Barthelmé compare différentes méthodes qui appliquent ce principe. La méthode de Villasenor-Buneman [120] est valable pour des splines d'ordre 1 sur un maillage régulier. Barthelmé l'étend à tous les ordres de splines, ainsi qu'à une interpolation linéaire sur maillage non uniforme. Elle présente les méthodes d'Esirkepov [51] et de Umeda [118], qui sont plus récentes, et étend la seconde à l'ordre 2.

Une comparaison des méthodes à l'ordre 1 est effectuée. Les résultats sont similaires pour les trois méthodes et ne permettent pas d'en choisir une en particulier. Le traitement des bords est un problème ouvert pour les méthodes de Villasenor-Buneman et de Umeda quand on veut passer à l'ordre 2. En revanche, pour la méthode d'Esirkepov, le passage à l'ordre deux est possible bien que l'implémentation soit délicate (il faut repasser à l'ordre 1 aux bords). Cette méthode présente également l'avantage de pouvoir être appliquée avec des fonctions d'interpolation de forme quelconque.

Au final, l'utilisation d'un algorithme conservant la charge est possible avec le schéma de Yee car les splines d'ordre quelconque sont connues sur maillage régulier. Mais pour des solveurs de Maxwell d'ordre élevé basés sur des maillages non uniformes, seule la méthode d'Esirkepov peut être utilisée avec des fonctions d'interpolation de forme quelconque.

La seconde méthode consiste à corriger l'équation d'Ampère de sorte que le champ électrique vérifie la loi de Gauss. La première et la plus courante des corrections utilisées dans les solveurs PIC est la correction de Boris [21]. Elle consiste à modifier la partie irrotationnelle de \mathbf{E}

$$\mathbf{E}_{\text{corrigé}} = \mathbf{E} - \mathbf{grad}\phi, \quad (25)$$

où ϕ est défini par

$$\text{div}\epsilon\mathbf{E}_{\text{corrigé}} = \rho \iff \Delta\phi = \text{div}\epsilon\mathbf{E} - \rho, \quad (26)$$

et $\phi = 0$ aux bords du domaine. Cette méthode fonctionne très bien, mais elle nécessite de résoudre un laplacien à chaque pas de temps (ou de temps en temps), ce qui peut être coûteux. Une alternative est la correction de Marder [84]. Elle consiste à introduire un pseudo-courant dans l'équation d'Ampère et à calculer au temps t^{n+1} :

$$\mathbf{E}_{\text{corrigé}}^{n+1} = \mathbf{E}_{\text{corrigé}} + \Delta t \mathbf{grad}[d(\text{div}\epsilon\mathbf{E}^n - \rho^n)], \quad (27)$$

où le paramètre de diffusion d doit satisfaire

$$d \leq \frac{1}{2\Delta t} \left(\frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \right) \quad (28)$$

pour assurer la stabilité de la méthode. Langdon [81] a proposé une amélioration qui tient compte de l'erreur sur la contrainte de divergence à l'instant t^{n+1} au lieu de t^n . Il montre que sa méthode est alors équivalente à effectuer une itération de l'algorithme de

Jacobi pour inverser le laplacien dans la méthode de Boris.

Plus récemment, Munz *et al* [90] ont généralisé cette idée de correction en remarquant que les méthodes de Boris et de Marder correspondaient à une reformulation des équations de Maxwell, avec un multiplicateur de Lagrange généralisé pour la contrainte de divergence sur le champ électrique

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{H} + \nabla \phi = -\mathbf{J}, \quad (29)$$

$$\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (30)$$

$$g(\phi) + \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho, \quad (31)$$

$$\nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) = 0, \quad (32)$$

où g est un opérateur différentiel linéaire. Le multiplicateur de Lagrange ϕ vérifie

$$\frac{\partial g(\phi)}{\partial t} - \Delta \phi = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J}. \quad (33)$$

Ainsi, ϕ est nul lorsque l'équation de conservation de la charge est satisfaite, et on retrouve les équations de Maxwell classiques. La correction de Boris correspond à $g(\phi) = 0$ et celle de Marder à $g(\phi) = \phi/d$. On parle alors respectivement de formulation hyperbolique-elliptique et hyperbolique-parabolique des équations de Maxwell à cause du type d'équation vérifiée alors par ϕ . Les auteurs [90] proposent une formulation purement hyperbolique en choisissant $g(\phi) = \frac{1}{\chi^2} \frac{\partial \phi}{\partial t}$, ϕ vérifiant alors l'équation des ondes, et χ étant un paramètre à choisir. L'implémentation numérique de cette version est toutefois délicate, car il faut laisser s'échapper les ondes contenant l'erreur sur la conservation de la charge, en imposant une condition d'onde sortante aux bords du domaine, par exemple

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (34)$$

Les comparaisons effectuées dans la thèse de R.Barthelmé [11] montrent que les différentes méthodes de prise en compte de la conservation de la charge (sauf la correction hyperbolique qui n'a pas été implémentée) sont effectives pour cela. En revanche, les tests numériques n'ont pas permis de conclure sur une méthode plutôt qu'une autre, les résultats étant quasiment identiques. Il est confirmé que le passage à l'ordre 2 réduit en effet l'erreur. Toutefois, il est constaté que les méthodes calculant le courant en assurant la conservation de la charge ont un bruit numérique un peu plus important.

Jacobs et Hesthaven [73] ont de leur côté choisi de comparer la correction classique de Boris et la correction hyperbolique dans leur méthode PIC avec un solveur GD. Dans le premier cas, l'équation de Poisson est résolue par une méthode GD consistante avec la résolution des champs. Dans le second cas, la correction est incluse dans la résolution des équations de Maxwell par GD, le tout formant un système purement hyperbolique. Les calculs montrent qu'il faut choisir le paramètre χ assez grand pour assurer une approche robuste ($\chi > 10$). Alors, la correction hyperbolique devient plus chère que la correction

elliptique, ce qui limite son intérêt (le coût augmente à cause du pas de temps qui est d'autant plus petit que χ est grand à cause de la condition CFL). Dans le corps de l'article, les auteurs constatent que cette correction améliore la qualité des résultats, par exemple avec $\chi = 10$ (réduction du bruit numérique notamment). Mais ils concluent que les deux corrections donnent une précision comparable et que pour appliquer la correction hyperbolique efficacement, il faudrait utiliser une méthode en temps implicite.

2.2.7 Maillage et raffinement

Il semble important de souligner ici l'importance d'un maillage régulier pour limiter le coût de la méthode PIC. En effet, la souplesse et la flexibilité pour résoudre les équations de Maxwell dans des géométries complexes tendent à nous faire choisir des maillages non structurés. Cependant, on gagne en efficacité en utilisant un maillage régulier ou en couplant avec du structuré quand c'est possible. La première raison à cela est le coût de la localisation des particules dans le maillage non structuré. La deuxième raison concerne les fonctions d'interpolation: un maillage régulier permet l'utilisation de splines d'ordre élevé, alors que l'on ne sait pas les construire pour des maillages non uniformes. On peut alors utiliser moins de particules par maille pour une même précision.

La modélisation de géométries complexes implique également souvent l'utilisation de techniques de raffinement temporel ou spatial pour décrire des détails. Les méthodes de raffinement spatial sont employées pour les solveurs de Maxwell. La difficulté est liée à la représentation des macro-particules sur des maillages raffinés. En effet, l'optimisation des méthodes d'interpolation pour un ordre d'erreur donné sur de tels maillages reste un sujet de recherche.

2.2.8 Filtrages

On a vu que pour éliminer l'effet Cerenkov numérique, une possibilité est de filtrer la solution des équations de Maxwell pour modifier la relation de dispersion. De façon plus générale, l'utilisation de techniques de filtrage est assez répandue dans la communauté de simulation numérique en physique des plasmas.

Il est courant de filtrer les plus courtes longueurs d'onde, qui sont les plus mal résolues à cause de la dispersion numérique. Cela permet également d'atténuer le bruit de la méthode PIC discuté plus haut, ou au moins sa composante haute fréquence. Ce sont donc dans ce cas des filtres passe-bas qui sont choisis. Ils sont appliqués soit directement dans le domaine fréquentiel, soit dans le domaine physique. Dans le deuxième cas, on parle de filtre digital. On peut se référer à Birdsall et Langdon sur ces filtres [13].

Ces filtres sont des moyens d'optimisation empirique des simulations. Ils reviennent finalement à supprimer ou atténuer les hautes fréquences soit en seuillant (de façon régulière) ces composantes dans le domaine de Fourier, soit en leur ajoutant de la dissipation. Le point de vue pragmatique de ceux qui utilisent de tels filtres peut être résumé

comme suit. L'équation de Vlasov est obtenue en lissant les effets individuels et de petite échelle pour ne s'intéresser qu'aux effets collectifs. La physique d'intérêt se situe donc aux grandes longueurs d'onde. L'introduction du maillage dans la méthode PIC a également pour conséquence de lisser les phénomènes de taille inférieure à la maille. L'application des fonctions de forme pour répartir la charge et le courant des macro-particules sur le maillage correspond également à un filtrage passe-bas. Par conséquent, l'utilisation d'un filtre supplémentaire ne dénature pas la modélisation et les approximations effectuées. Elle cherche simplement à nettoyer la solution en réduisant le bruit de manière artificielle. Le filtrage réalisé par les fonctions de forme va dans ce sens, mais n'est pas le meilleur. L'application d'un filtre spécifique est plus efficace. Celui-ci doit réduire au minimum l'erreur qu'il introduit aux grandes longueurs d'onde, et quasiment éliminer les plus courtes longueurs d'onde.

Si les filtres les plus courants consistent à seuilier les grands nombres d'onde, plus ou moins régulièrement dans le spectre de Fourier, d'autres techniques peuvent être envisagées. En particulier, seuilier dans une base d'ondelettes permet d'atténuer les plus petites échelles dans des zones localisées du domaine. L'utilisation de filtres stochastiques est une autre possibilité.

Le filtre doit être appliqué de préférence aux sources ρ et \mathbf{J} des équations de Maxwell, plutôt qu'aux champs électrique et magnétique. La première raison est que pour espérer obtenir des solutions de Maxwell avec un ordre élevé d'erreur, il faut que les sources soit suffisamment régulières. La seconde raison est que dans nombre d'applications (dont les faisceaux de particules), il existe des régions de l'espace vides de particules et où peut apparaître un champ électromagnétique hautes fréquences. Si on filtre les champs, on risque de filtrer au passage des phénomènes physiques. Il vaut mieux donc filtrer les sources.

2.2.9 Analyses et tests numériques de convergence

Analyses de convergence

Nous n'allons pas chercher ici à faire le point sur les études réalisées à ce jour. Pour cela, nous renvoyons le lecteur à la thèse de R.Barthelmé [11] et aux références qu'elle donne. Leur intérêt pratique est modéré. En effet, les résultats sont obtenus pour des situations qui ne correspondent pas à l'utilisation pratique de ces méthodes PIC. De plus, les ordres d'erreur font apparaître des constantes susceptibles d'être grandes. Toutefois, il est intéressant de discuter un peu la forme des résultats obtenus.

Par exemple, Cottet et Raviart [40] ont traité le cas de Vlasov-Poisson en une dimension d'espace et de vitesse avec des conditions aux limites périodiques, et lorsque les particules sont initialement réparties uniformément dans l'espace des phases. On applique leur résultat avec une spline d'ordre m comme fonction de forme. La résolution de l'équation de poisson est supposée exacte. Le support de la spline est de largeur $\epsilon = (m + 1)\Delta x$,

où Δx est la taille de la maille du solveur Poisson. Si on note β la distance entre les particules dans l'espace des phases (elles sont réparties uniformément au départ), l'erreur sur les trajectoires et sur le champ électrique est plus petite qu'une quantité de la forme

$$C(\epsilon^2 + \frac{\beta^{m+1}}{\epsilon^m}). \quad (35)$$

Pour nous permettre de faire quelques commentaires, nous supposons ce résultat optimal, bien qu'il ne le soit certainement pas. Tout d'abord, on voit qu'il faut que les deux paramètres ϵ et β soient tous les deux petits, c'est-à-dire que la taille de la maille tende vers 0 et que le nombre de macro-particules tende vers l'infini. Mais il faut aussi que le rapport β/ϵ reste borné pour obtenir la convergence. En fait, l'idée sous-jacente est que si on raffine le maillage, il faut ajouter des macro-particules de sorte à avoir au moins toujours autant de particules par maille. Si le nombre de particules par maille diminue, on n'a pas forcément la convergence. Si le nombre de particules pour un maillage fixé augmente, l'erreur diminue jusqu'à atteindre un plateau. Donc, pour un maillage donné, il existerait un nombre de particules par maille optimal, au delà duquel la méthode coûte plus cher pour une erreur du même ordre (conclusion à modérer par le fait qu'augmenter ce nombre de particules par maille doit permettre de réduire le bruit quand même).

Une autre remarque que nous pouvons faire est que si l'ordre de la spline est augmentée au-delà de deux, le deuxième terme, seulement, diminue. Ceci est dû à l'utilisation des splines et leur propriété de positivité. De façon plus générale, l'utilisation de fonctions de forme positives conduit à cette limitation.

Ce résultat théorique soulève donc une question: l'ordre global d'erreur est-il limité à l'ordre 2 lorsque l'on utilise des splines d'ordre élevé? Et, concernant la résolution des équations de Maxwell, il en résulte que l'on peut légitimement se demander s'il est bien utile de chercher à monter en ordre au-delà de 2 (qui est obtenu par le schéma de Yee). Comme on l'a dit, ces résultats théoriques doivent être considérés avec recul. Quoiqu'il en soit, même si l'ordre global d'erreur est limité à 2, la montée en ordre pour le solveur Maxwell est quand même bénéfique grâce à la réduction de la dispersion numérique. De même, la montée en ordre pour les étapes d'interpolation est bénéfique car le bruit numérique est atténué [1]. Une limitation plus grande en pratique sur l'ordre des fonctions d'interpolation est la gestion des bords du domaine.

Tests numériques

R.Barthelmé a effectué quelques tests numériques de convergence que nous résumons [11]. Le problème résolu est Maxwell-Vlasov (non relativiste) en 4D (2D spatial, 2D vitesse) avec conditions aux limites périodiques. La fonction de distribution initiale est uniforme en espace et bi-maxwellienne en vitesse. Le méthode PIC utilise le schéma de Yee sur un maillage régulier et les fonctions de forme sont des splines d'ordre 1 ou 2. Elle est initialisée par une méthode "quiet start".

A l'ordre 1, comme à l'ordre 2, et pour un maillage fixé, l'erreur sur la densité de courant

décroît en $N^{-0.86}$, où N est le nombre total de macro-particules. L'erreur est mesurée à un temps petit. On constate que le taux de convergence est intermédiaire entre le taux $1/N$ du “quiet start” initial, et $1/\sqrt{N}$ correspondant à une dépendance stochastique. Ce test indique que le passage à la spline d'ordre 2 n'améliore pas la vitesse de convergence, mais l'erreur devient un peu plus faible.

Un deuxième test sur cet exemple a consisté, pour un nombre fixé de particules par maille, à raffiner le maillage. On observe que l'erreur moyenne ne diminue pas, alors que l'on utilise un plus grand nombre total de particules. En revanche, les fluctuations sont plus faibles pour un maillage plus fin. Ce test confirme le rôle déterminant du nombre de particules par maille. A l'instar des résultats théoriques précédents, retenons qu'il ne suffit pas de rajouter des particules mais qu'il faut conjointement raffiner le maillage pour diminuer l'erreur moyenne.

2.3 Conclusions sur le solveur PIC en vue du choix du solveur Maxwell

En conclusion à cette section sur le solveur PIC, nous résumons les points discutés en vue du choix du solveur Maxwell.

La méthode PIC produit des résultats bruités. Le bruit numérique a une forte composante aléatoire (introduite soit dès l'initialisation, soit au cours de la dynamique des macro-particules). Il trouve essentiellement sa source dans la discrétisation de la fonction de distribution en masses de Dirac d'une part (macro-particules), et la dépendance des macro-particules au maillage d'autre part. Pour limiter la première source de bruit, il n'y a pas grand chose d'autre à faire que d'augmenter le nombre de macro-particules. Pour réduire la dépendance au maillage, qui se traduit en partie par le phénomène d'aliasing, l'utilisation de maillages irréguliers est un avantage par rapport aux maillages réguliers plus sensibles à l'aliasing. A l'opposé, un maillage régulier a l'avantage d'autoriser l'emploi de la famille des splines pour effectuer les étapes d'interpolation. On peut ainsi augmenter l'ordre des splines pour réduire l'aliasing.

Cependant, l'aliasing peut et doit surtout être réduit en choisissant convenablement les paramètres numériques pour discrétiser la fonction de distribution du problème qui nous intéresse. En particulier, le choix d'un pas d'espace trop grand par rapport à la longueur de Debye peut mener à une instabilité numérique induisant un fort chauffage numérique. Si c'est le cas, une augmentation exponentielle de l'énergie cinétique se produit temporairement car le chauffage entraîne l'augmentation de la longueur de Debye et le “plasma numérique” se stabilise. En situation stable, l'énergie cinétique augmente linéairement avec le temps. La plupart des solveurs Maxwell conservent une énergie électromagnétique discrète. Donc, pour eux, l'énergie totale devrait augmenter linéairement en temps. L'emploi d'un solveur Maxwell légèrement dissipatif (de façon contrôlée) peut venir seulement compenser la perte d'énergie cinétique, de sorte à mieux conserver l'énergie totale. De plus, l'ajout de la dissipation peut contribuer à diminuer le bruit numérique.

Cependant, pour des applications où il existe des régions de l'espace ne contenant pas de particules, l'ajout de cette dissipation sur le calcul des champs peut être néfaste. Dans ces régions, on préfère avoir un solveur qui conserve l'énergie, il faut donc pouvoir choisir la présence ou non de dissipation dans le solveur Maxwell selon la région de l'espace. Quoiqu'il en soit cela ne peut pas remplacer l'emploi d'un filtre pour lisser les sources ρ et \mathbf{J} des équations de Maxwell. En effet, effectuer le calcul des champs à partir de données bruitées ne peut que se répercuter sur les champs. Il est indispensable de "nettoyer" les sources pour espérer obtenir un ordre d'erreur élevé sur les champs.

Le choix d'un solveur Maxwell d'ordre élevé permet de réduire l'erreur de dispersion. Avoir des sources débruitées et régularisées est une condition nécessaire pour obtenir l'ordre élevé sur l'erreur globale. Mais il faut aussi que les étapes d'interpolation soient du même ordre d'erreur pour que l'ensemble "dynamique des particules et calcul des champs" soit consistant à cet ordre. Or, le passage à des interpolations d'ordre élevé reste un sujet de recherche à poursuivre, notamment sur des maillages quelconques, même si des solutions existent déjà. Il est indispensable en particulier de préserver l'ordre élevé aux bords du domaine, avec une implémentation efficace. Par conséquent, il ne faut pas s'attendre à ce que le choix d'un solveur Maxwell d'ordre élevé améliore nettement la précision globale à court terme. En revanche, la réduction de la dispersion apporte un avantage certain.

L'absence d'autoforce lorsque l'on utilise le solveur DF de Yee et des étapes d'interpolation identiques n'est pas un critère déterminant. En effet, bien que cette autoforce existe a priori sur un maillage non uniforme, sa contribution est faible par rapport aux autres sources d'erreur du moment que l'on utilise suffisamment de particules par maille.

L'effet Cerenkov numérique doit être pris en compte pour des applications où des particules très rapides se propagent. L'idéal pour l'éviter est le choix d'un solveur ayant une courbe de dispersion qui approche la courbe exacte par dessus. Sinon, une méthode d'ordre élevé repousse quoiqu'il arrive le risque en réduisant l'erreur de dispersion. En revanche, si on choisit une méthode d'ordre peu élevé (comme le schéma de Yee) qui approche la courbe par-dessous (les ondes électromagnétiques calculées se propagent moins vite que la lumière), l'emploi d'un filtre approprié est possible mais il reste à déterminer si on ne veut pas qu'il agisse trop sur les phénomènes physiques d'intérêt.

La conservation de la charge a un impact essentiel sur la dynamique des particules. Par conséquent, il est indispensable de la vérifier. Certains solveurs Maxwell la vérifient exactement. Dans ces cas, il peut suffir de choisir un algorithme pour répartir le courant sur le maillage qui conserve la charge. Encore une fois, c'est une étape difficile dès que l'on veut monter en ordre et/ou utiliser un maillage quelconque. Un moyen plus général consiste à corriger les champs pour que la conservation soit satisfaite. Cela revient à résoudre les équations de Maxwell dans une formulation généralisée, qui prend en compte la condition sur la divergence du champ électrique par l'intermédiaire d'un multiplicateur de Lagrange. En conclusion, dans une méthode PIC, il faut nécessairement

faire quelque chose pour forcer la conservation de la charge quelque soit le solveur Maxwell: ce n'est donc pas un critère discriminant pour le choix du solveur.

L'efficacité des différentes étapes sur un maillage cartésien est loin d'être négligeable. Ceci est renforcé par l'efficacité du solveur de Yee pour Maxwell. Il en résulte que la possibilité de se coupler aisément avec le schéma de Yee sur un maillage structuré est un avantage à prendre en compte pour le solveur Maxwell. A plus long terme, si toutes les étapes peuvent effectivement être d'ordre élevé et que le raffinement de maillage est bien géré pour le solveur Maxwell comme le solveur PIC, alors cette conclusion pourra être mise en balance. En effet, une méthode d'ordre élevé permet de choisir de plus grandes mailles et peut revenir à un coût similaire ou meilleur qu'une méthode d'ordre peu élevé sur un maillage plus fin (c'est évidemment vrai pour Maxwell seul, mais plus difficile pour Maxwell-Vlasov car les mailles ne peuvent pas être trop grandes par rapport à la longueur de Debye).

3 Présentation des différentes méthodes de résolution des équations de Maxwell

3.1 Méthodes de différences finies

3.1.1 Schéma de Yee

Le papier original de Yee date des années 60 [125]. Ce schéma a été très largement employé, d'une part à cause de ses qualités, décrites dans le paragraphe "propriétés principales" ci dessous, et de sa facilité d'utilisation. Une référence assez complète sur l'utilisation et les développements de la méthode est l'ouvrage de Taflove [115].

Formulation

Le schéma discrétise les équations de Maxwell (4)-(5), écrites sous la forme d'un système du premier ordre en temps. Les contraintes de divergence ne sont pas traitées explicitement, mais le schéma discret les préserve au cours du temps.

Maillage

Le maillage est structuré et orthogonal dans la méthode initiale (des maillages composés de rectangles en 2D ou de parallélépipèdes en 3D).

Discrétisation spatiale

Les inconnues du problème sont les composantes des champs en certains points de deux maillages décalés d'un demi-pas d'espace dans chaque direction. Les composantes du champ électrique \mathbf{E} sont calculées au centre des arêtes du premier maillage, tandis que les composantes du champ magnétique \mathbf{H} sont calculées au centre des faces du maillage

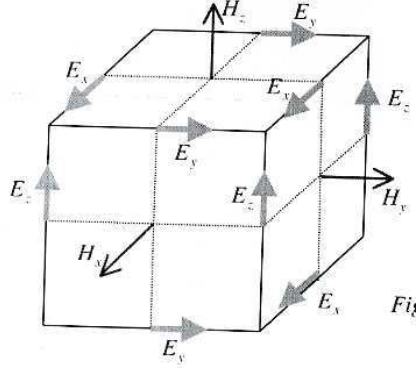


FIG. 5 – Degrés de liberté pour les DF de Yee.

décalé. La configuration des degrés de liberté en 3D est représentée sur la Figure 5.

Chacune des équations scalaires du système (4)-(5) est discrétisée en remplaçant les dérivées partielles par des différences finies basées sur les inconnues décrites ci-dessus. Par exemple, la première de ces équations discrétisées s'écrit

$$\epsilon \frac{\partial (E_x)_{i+1/2,j,k}}{\partial t} - \frac{1}{\Delta y} \left((H_z)_{i+1/2,j+1/2,k} - (H_z)_{i+1/2,j-1/2,k} \right) + \frac{1}{\Delta z} \left((H_y)_{i+1/2,j,k+1/2} - (H_y)_{i,j,k-1/2} \right) = -(J_x)_{i+1/2,j,k}, \quad (36)$$

où les indices (i,j,k) correspondent aux inconnues évaluées à la position $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ du premier maillage.

Discrétisation temporelle

Comme pour la discrétisation en espace, le schéma en temps consiste à remplacer les dérivées en temps par des différences finies de type saute-mouton. La version complètement discrétisée de l'équation précédente s'écrit donc

$$\frac{\epsilon}{\Delta t} \left((E_x)_{i+1/2,j,k}^{n+1} - (E_x)_{i+1/2,j,k}^n \right) - \frac{1}{\Delta y} \left((H_z)_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - (H_z)_{i+1/2,j-1/2,k}^{n+1/2} \right) + \frac{1}{\Delta z} \left((H_y)_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - (H_y)_{i,j,k-1/2}^{n+1/2} \right) = -(J_x)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}, \quad (37)$$

où l'exposant n indique que la fonction est évaluée à l'instant $n\Delta t$.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites sont implémentées en approchant les opérateurs de dérivée par leur équivalent discret.

Les conditions absorbantes type PML (Perfectly Matched Layer) ont été définies initialement pour les différences finies (voir [115] pour différentes implémentations).

Propriétés principales

L'erreur de la méthode est d'ordre deux en espace et en temps.

Elle est stable sous une condition CFL. En particulier, le schéma conserve une énergie électromagnétique discrète dans le cas de conditions aux limites de type conducteur parfait.

L'expression de la dispersion numérique a été donnée dans la section sur l'effet Cerenkov numérique (équation (19)). L'erreur est d'ordre 2 dans la limite des faibles nombres d'onde. Un développement limité de la relation de dispersion numérique en 3D s'écrit

$$\omega^2 = |\mathbf{k}|^2 c^2 \left(1 + |\mathbf{k}|^2 \Delta x^2 \left(\frac{\nu^2}{36} - \frac{1}{12}\right) + O(|\mathbf{k}|^4 \Delta x^4)\right), \quad (38)$$

pour des ondes se propageant le long des axes du maillage cartésien (le paramètre ν est le rapport $\Delta t/\Delta x$). C'est la direction où l'erreur est la plus grande. A l'opposé, pour une diagonale cubique, un développement limité donne

$$\omega^2 = |\mathbf{k}|^2 c^2 \left(1 + |\mathbf{k}|^2 \Delta x^2 \left(\frac{\nu^2}{36} - \frac{1}{36}\right) + O(|\mathbf{k}|^4 \Delta x^4)\right). \quad (39)$$

En particulier, l'erreur est d'ordre 4 pour le nombre de Courant optimal $\nu = 1$, correspondant à la limite de stabilité. Si on choisit un pas de temps plus petit, l'erreur de dispersion augmente. Une erreur d'anisotropie est donc présente (l'erreur de dispersion dépend de la direction des ondes). En revanche la méthode n'est pas dissipative.

Elle respecte exactement les contraintes de divergence si celles-ci sont vérifiées à l'instant initial et si les sources vérifient l'équation de conservation de la charge. Ceci est dû notamment au fait que les opérateurs différentiels discrets associés à ce schéma vérifient l'équivalent discret de la propriété d'algèbre vectorielle

$$\operatorname{div}_h \mathbf{rot}_h = 0. \quad (40)$$

Le schéma est explicite et ne nécessite donc pas d'inverser un système linéaire à chaque pas de temps.

De plus, l'utilisation de maillages cartésiens évite les difficultés et le coût associés à la gestion du maillage. En particulier, la localisation des particules est très rapide.

3.1.2 Variantes et extensions

On peut construire des méthodes d'ordre supérieur, qui utilisent des molécules de DF ayant plus d'inconnues pour représenter les dérivées [35]. La difficulté réside alors dans la gestion des conditions aux bords.

L'une des principales limitations de la méthode provient d'une mauvaise représentation des frontières lorsque celles-ci ne sont pas dans une des directions du maillage. La

représentation en marches d’escalier d’une diagonale ou d’une courbe entraîne la perte de l’ordre 2 de la méthode. Pour remédier à cela, une première technique consiste à raffiner pour améliorer la description de la frontière. Mais le raffinement conduit à un nombre très important de degrés de liberté, faisant perdre à la méthode son avantage en efficacité. Par exemple, des maillages en $\lambda/40$ sont couramment utilisés. Une autre technique a été développée pour résoudre ce problème. Il s’agit d’une interpolation spécifique sur les mailles de bord qui permette de garder l’ordre de la méthode [48]. Cette technique est employée par exemple dans les codes commerciaux comme Microwave Studio [85] ou Magic [57].

Il a été prouvé que le schéma de Yee reste d’ordre deux sur des rectangles ou des parallépipèdes [87]. De façon plus générale, il est possible d’étendre la méthode à des maillages non orthogonaux, tout en respectant les propriétés géométriques présentes dans le schéma de Yee. Les travaux d’Hyman et Shashkov [70] parlent de “Mimetic Finite Difference”. Cet axe de recherche permet de construire des méthodes de DF respectant l’algèbre vectorielle, et dont le schéma de Yee serait un cas particulier.

Une extension importante pour regagner de la souplesse consiste à raffiner localement le maillage en espace et/ou en temps. C’est notamment l’objet du travail de thèse de Fouquet [54].

Notons enfin la possibilité d’utiliser des DF qui ne sont pas contraintes d’avoir la même compatibilité géométrique que le schéma de Yee pour vérifier les contraintes de divergence. En effet, en utilisant une formulation au second ordre obtenue dans [76], Ricci *et al.* [105] ont développé un code Maxwell-Vlasov avec un solveur DF implicite.

3.2 Méthodes de volumes finis

3.2.1 Méthode de Hermeline

C’est une extension du schéma de Yee pour des maillages non orthogonaux. La méthode est décrite en détail dans l’article original de Hermeline [62].

Formulation

Nous présentons la formulation en 2D, pour le mode transverse électrique. La méthode s’étend aussi au 3D, mais les difficultés liées au maillage la restreignent en pratique au 2D. Etant donné un maillage primal en triangles et son maillage dual orthogonal, dits de Delaunay-Voronoi, nous considérons le flux de l’équation d’Ampère à travers la frontière des triangles de Delaunay ∂D du maillage primal, nous intégrons l’équation de Faraday sur les polygones de Voronoi V du maillage dual, et nous intégrons l’équation de Gauss pour \mathbf{E} sur les triangles de Delaunay D

$$\int_{\partial D} \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \mathbf{n}_D dl - \int_{\partial D} \nabla \times H_z \cdot \mathbf{n}_D dl = - \int_{\partial D} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_D dl, \quad (41)$$

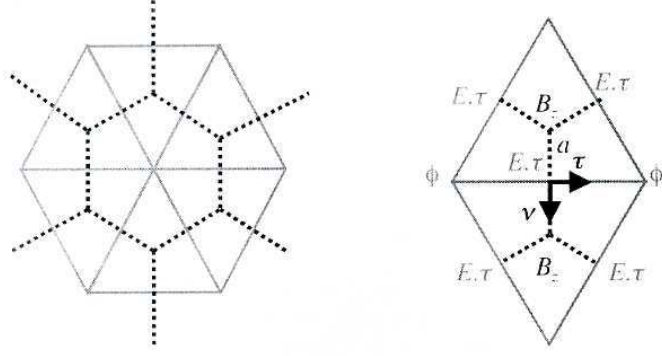


FIG. 6 – Maillage Delaunay-Voronoi et maille des VF de Hermeline.

$$\int_V \mu \frac{\partial H_z}{\partial t} dx + \int_V \nabla \times \mathbf{E} dx = 0, \quad (42)$$

$$\int_D \nabla \cdot \epsilon \mathbf{E} dx = \int_D \rho dx, \quad (43)$$

où $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$ et $\nabla \times H_z = (\frac{\partial H_z}{\partial y}, -\frac{\partial H_z}{\partial x})$. A l'aide des formules de Stokes et d'Ostrogradskii et en tenant compte du fait que le vecteur normal \mathbf{n}_D pour D correspond au vecteur tangentiel $\boldsymbol{\tau}_V$ pour V , nous obtenons la formulation

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\partial D} \epsilon \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_V dl \right) - \int_{\partial D} \nabla H_z \cdot \boldsymbol{\tau}_D dl = - \int_{\partial D} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_D dl, \quad (44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \mu H_z dx \right) + \int_{\partial V} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_V dx = 0, \quad (45)$$

$$\int_{\partial D} \epsilon \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_V dx = \int_D \rho dx. \quad (46)$$

Si l'équation de conservation de la charge est vérifiée au niveau discret, l'équation de Gauss discrète est une conséquence de la loi de Faraday discrétisée; elle peut alors être retirée. De plus, nous ne considérons que des coefficients ϵ et μ constants par maille de Voronoï.

Maillage

Un maillage primal constitué de triangles est complété par son maillage dual où les sommets sont les intersections des médiatrices des triangles du maillage primal. Ce type de maillage est dit Delaunay-Voronoi (voir Figure 6).

Discretisation spatiale

La discrétisation consiste à prendre comme inconnues les composantes tangentielles du champ électrique $\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\tau}_V = \mathbf{E} \cdot \mathbf{n}_D$ considérées constantes sur les arêtes associées aux maillages primal et dual, ainsi que la moyenne de H_z sur les polygones du maillage dual.

Discrétisation temporelle

Le schéma saute-mouton est utilisé comme pour le schéma de Yee.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites de type conducteur parfait sont prises en compte aisément dans la formulation intégrale. Une condition absorbante simple (absorption des ondes normales à la frontière) peut être implémentée sans rien faire de particulier, comme présentée dans [62]. Puisque la méthode se ramène au schéma de Yee sur un maillage cartésien, une condition PML peut très bien être utilisée.

Propriétés principales

La méthode est d'ordre deux dans les expériences numériques, mais seul l'ordre un est prouvé.

Elle est stable sous une condition CFL. En particulier, le schéma conserve une énergie électromagnétique discrète dans le cas de conditions aux limites de type conducteur parfait.

Pour un maillage primal rectangulaire, la méthode redonne le schéma de Yee. L'analyse de dispersion sur maillage régulier est donc la même.

Elle respecte exactement les contraintes de divergence.

Elle est explicite et ne nécessite donc pas d'inverser un système linéaire à chaque pas de temps.

La formulation nécessite que les normales et les tangentes des côtés des différentes mailles correspondent. C'est pour cette raison qu'il faut que les maillages soient Delaunay-Voronoi. Une évolution récente de la méthode permet d'éviter cette contrainte, au prix de la résolution simultanée de deux systèmes discrets de Maxwell, obtenus en inversant le rôle des maillages primal et dual [63].

3.2.2 Méthode de Remaki

Cette méthode est simplement l'application de méthodes classiques de VF au système (4)-(5), vu comme une loi de conservation. Nous la nommons ainsi du fait de l'application de telles méthodes pour les équations de Maxwell par Remaki à l'Inria [104].

Formulation

Les lois de Faraday et d'Ampère sont écrites en faisant apparaître un opérateur de

divergence à la place du rotationnel

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (-\mathbf{e}_i \times \mathbf{H}) = -\mathbf{J}, \quad (47)$$

$$\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathbf{e}_i \times \mathbf{E}) = 0, \quad (48)$$

$$(49)$$

où les \mathbf{e}_i sont les vecteurs unitaires de la base cartésienne. En intégrant ces équations sous forme conservative sur chaque maille et après une intégration par parties, nous obtenons

$$\int_K \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} dx - \int_{\partial K} (\mathbf{H} \times \mathbf{n}) ds = - \int_K \mathbf{J} dx, \quad (50)$$

$$\int_K \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} dx + \int_{\partial K} (\mathbf{E} \times \mathbf{n}) ds = 0. \quad (51)$$

Notons qu'une autre façon d'obtenir cette formulation est de multiplier les équations de Maxwell par une fonction test, d'intégrer, d'effectuer une intégration par parties pour passer le rotationnel sur la fonction test, puis de choisir comme fonction test la fonction caractéristique de la maille.

Maillage

Le maillage peut être quelconque.

Discrétisation spatiale

Les inconnues sont les moyennes des champs sur chaque maille. Elles sont localisées au centre des mailles. Aux frontières inter-éléments, il faut donc faire un choix pour bien définir les termes de bords de la formulation: le choix du flux numérique détermine la méthode VF. Une possibilité est d'utiliser le schéma de Godunov, qui consiste à résoudre de façon approchée un problème de Riemann à chaque interface [104]. D'autres choix sont possibles, comme le schéma centré ou le schéma décentré amont.

Discrétisation temporelle

Elle est au choix parmi les méthodes classiques dont les schémas d'Euler, Runge-Kutta ou saute-mouton par exemple.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites de type conducteur parfait ou les conditions absorbantes de type Silver-Muller s'écrivent facilement en termes de flux à travers les frontières des mailles de bord. La difficulté peut provenir alors de la résolution d'un demi problème de

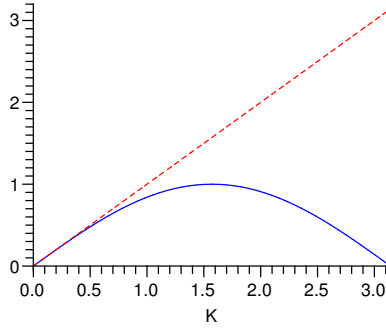


FIG. 7 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$ pour la méthode de Remaki avec des flux centrés. En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Seul le cadran positif est montré; on obtient les autres courbes par simples symétries par rapport aux deux axes.

Riemann à la frontière [104]. On peut implémenter également une condition PML avec des VF centrés par maille [107].

Propriétés principales

Sur un maillage régulier, le schéma centré est d'ordre deux. Les schémas décentré et de Godunov sont d'ordre un.

Tous ces schémas sont stables sous une condition CFL. Le schéma centré conserve l'énergie électromagnétique discrète.

L'erreur de dispersion est d'ordre deux. La courbe de dispersion pour le schéma centré est donnée à la figure 7. Pour le schéma décentré, l'erreur de dispersion est dominée par l'erreur de dissipation (d'ordre 1): la méthode est alors diffusive.

Les contraintes de divergence ne sont pas prises en compte explicitement par la méthode. Elles sont vérifiées à l'ordre d'erreur de la méthode.

La méthode est explicite et ne nécessite donc pas d'inverser un système linéaire à chaque pas de temps.

3.2.3 Variantes et extensions

La méthode VF de Hermeline, basée sur un maillage spécifique, ne peut pas être étendue à des ordres supérieurs. On peut en revanche monter en ordre pour la méthode VF de Remaki. Un point de vue naturel consiste à considérer cette méthode comme un cas particulier de méthodes GD, qui sont analysées dans la suite.

Une variante de VF, outre ces deux références, est la méthode de Munz et ses collabo-

rateurs [89]. De façon générale, les variantes sont toutes les méthodes VF que l'on peut appliquer aux lois de conservation (par exemple [12]).

3.3 Méthodes d'éléments finis

3.3.1 Méthode d'Assous et al

Formulation

L'article [6] décrit cette méthode en détail. On part de la formulation des équations de Maxwell au second ordre en temps

$$\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} + \nabla \times (\epsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{H}) = \nabla \times (\epsilon^{-1} \mathbf{J}), \quad (52)$$

$$\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E}) = -\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}, \quad (53)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho, \quad (54)$$

$$\nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) = 0. \quad (55)$$

L'idée est alors de prendre en compte les contraintes de divergence par l'intermédiaire de multiplicateurs de Lagrange (qui s'annulent avec les équations exactes avec une condition de Dirichlet nulle au bord). La formulation variationnelle qui en découle consiste à chercher (\mathbf{H}, p_H) , et (\mathbf{E}, p_E) dans $H(\mathbf{rot}) \cap H(\text{div}) \times L^2$, pour toutes les fonctions tests ϕ, ψ dans les mêmes espaces, tels que

$$\int_{\Omega} \mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \cdot \phi dx + \int_{\Omega} \epsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \phi) dx + \int_{\Omega} p_H \nabla \cdot \mu \phi dx = \int_{\Omega} \epsilon^{-1} \mathbf{J} \cdot \nabla \times \phi dx, \quad (56)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) q_H dx = 0, \quad (57)$$

$$\int_{\Omega} \epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \cdot \psi dx + \int_{\Omega} \mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \psi) dx + \int_{\Omega} p_E \nabla \cdot \epsilon \psi dx = - \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \cdot \psi dx, \quad (58)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) q_E dx = \int_{\Omega} \rho q_E dx. \quad (59)$$

Plutôt que d'utiliser cette formulation pour la discrétisation, une formulation augmentée d'un terme symétrique pénalisant la divergence est employée. Lorsque l'espace $H(\mathbf{rot}) \cap H(\text{div})$ correspond à H^1 (c'est le cas quand le domaine n'a pas de coin rentrant) et considérant μ et ϵ constants, le système peut s'écrire sous une forme convenant à une résolution par EF nodaux, conformes dans H^1

$$\begin{aligned} \mu \int_{\Omega} \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \cdot \phi dx + \epsilon^{-1} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{H} : \nabla \phi dx + \epsilon^{-1} \sum_{i=1}^3 \int_{\Gamma} (\nabla \mathbf{H}_i \times \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{e}_i \times \phi) \\ + \mu \int_{\Omega} p_H \nabla \cdot \phi dx = \epsilon^{-1} \int_{\Omega} \nabla \times \mathbf{J} \cdot \phi dx + \epsilon^{-1} \int_{\Gamma} (\mathbf{J} \times \mathbf{n}) \cdot \phi dx, \end{aligned} \quad (60)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{H} q_H dx = 0, \quad (61)$$

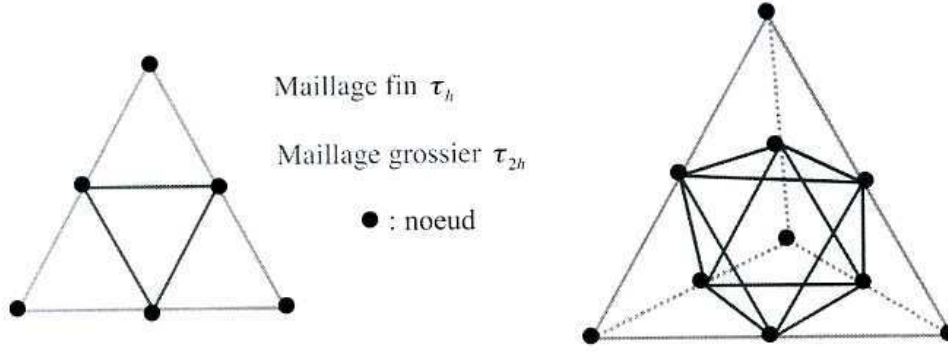


FIG. 8 – Maillages pour les EF de type Taylor-Hood 2D et 3D.

$$\begin{aligned} & \epsilon \int_{\Omega} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \cdot \boldsymbol{\psi} dx + \mu^{-1} \int_{\Omega} \nabla \mathbf{E} : \nabla \boldsymbol{\psi} dx \\ & + \mu^{-1} \sum_{i=1}^3 \int_{\Gamma} (\nabla \mathbf{E}_i \times \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{e}_i \times \boldsymbol{\psi}) + \epsilon \int_{\Omega} p_E \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} dx = - \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \boldsymbol{\psi} dx, \end{aligned} \quad (62)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{E} q_E dx = \int_{\Omega} \rho q_E dx. \quad (63)$$

L'indice i désigne la composante des vecteurs décomposés dans une base cartésienne donnée par les \mathbf{e}_i , et les double points représentent le produit contracté de deux tenseurs.

Maillage

Le maillage est constitué de tétraèdres. Deux niveaux de maillage sont utilisés: un niveau grossier pour le multiplicateur de Lagrange, et un niveau fin défini à partir du premier maillage en découpant chaque tétraèdre en huit (Figure 8).

Discrétisation spatiale

Les EF choisis sont les éléments de Taylor-Hood. Ils correspondent simplement aux EF continus de Lagrange de degré un (linéaires) sur le maillage fin pour les champs, et sur le maillage grossier pour les multiplicateurs de Lagrange, assurant une compatibilité nécessaire pour la convergence.

Les intégrations sont exactes sauf les matrices de masse. En effet, celles-ci sont évaluées à l'aide d'une quadrature numérique (exacte pour les polynômes de degré un) qui permet d'obtenir une matrice de masse diagonale.

Discrétisation temporelle

Un schéma saute-mouton est également employé.

La prise en charge des contraintes pour le système discret est faite par l'algorithme d'Uzawa, qui consiste simplement à utiliser la contrainte discrétisée pour obtenir un système discret uniquement pour le multiplicateur de Lagrange, avant d'injecter cette solution dans l'équation discrétisée donnant le champ.

Prise en compte des conditions aux limites

La prise en compte d'une condition aux limites de type conducteur électrique parfait est dualisée, au lieu d'être incluse dans l'espace d'approximation. Cela consiste à ajouter un terme et un multiplicateur de Lagrange \tilde{p}_E à la formulation variationnelle (62)

$$+ \int_{\Gamma} \tilde{p}_E \cdot (\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{n}) dx, \quad (64)$$

et à prendre en compte cette nouvelle contrainte par l'équation supplémentaire

$$\int_{\Gamma} (\mathbf{E} \times \mathbf{n}) \cdot \tilde{q}_E dx = 0, \quad (65)$$

exactement de la même manière que la contrainte de divergence.

L'implémentation d'une condition de Silver-Muller ajoute simplement des intégrales sur la frontière concernée.

Propriétés principales

La méthode est d'ordre deux en espace et en temps.

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il conserve une énergie électromagnétique discrète.

En 1D, on s'aperçoit que la discrétisation spatiale dégénère comme les DF centrées du schéma de Yee. Dans ce cas, l'erreur de dispersion est d'ordre deux. A priori, cette méthode, comme les autres méthodes qui conservent une énergie électromagnétique discrète, a une dispersion d'ordre 2. Nous n'avons pas dérivé la relation de dispersion en 2D qui tient compte de la discrétisation du multiplicateur de Lagrange.

Les contraintes de divergence sont prises en compte dans la formulation faible.

La méthode est explicite. Elle nécessite néanmoins d'inverser un système linéaire à chaque pas de temps pour le calcul du multiplicateur de Lagrange dans l'algorithme d'Uzawa.

3.3.2 Éléments finis d'arête (Raviart-Thomas-Nédelec)

Formulation

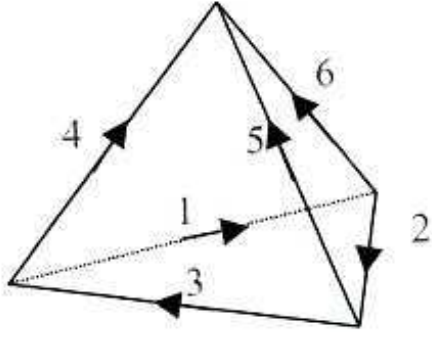


FIG. 9 – Degrés de liberté pour les EF de Nédelec.

Les travaux de bases sur ces éléments sont notamment ceux de Nédelec [95]. La formulation au second ordre en temps des équations de Maxwell est utilisée. En multipliant par une fonction test, en intégrant sur les éléments, puis en transférant l'opérateur rotationnel sur la fonction test, on obtient

$$\int_K \epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_K \mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E} \cdot \nabla \times \boldsymbol{\phi} dx = - \int_K \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx, \quad (66)$$

$$\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{E}. \quad (67)$$

En général, le champ magnétique est déduit du champ électrique grâce à la seconde équation. Pour éviter de perdre un ordre de précision dû à la dérivation, on peut résoudre de façon analogue l'équation au second ordre pour \mathbf{H} .

Maillage

Le maillage est composé de tétraèdres en général. La méthode de Cohen-Monk décrite au paragraphe suivant est une variante de ces méthodes basée sur des hexaèdres.

Discretisation spatiale

Au plus bas ordre, les degrés de liberté de ces EF sont les composantes tangentielles sur les arêtes de chaque élément [95] (Figure 9). De façon plus générale, ce sont des EF conformes dans $H(\mathbf{rot})$, qui assurent donc la continuité des composantes tangentielles entre deux éléments, tandis que les composantes normales sont discontinues.

Discretisation temporelle

Le schéma de Newmark est utilisé.

Prise en compte des conditions aux limites

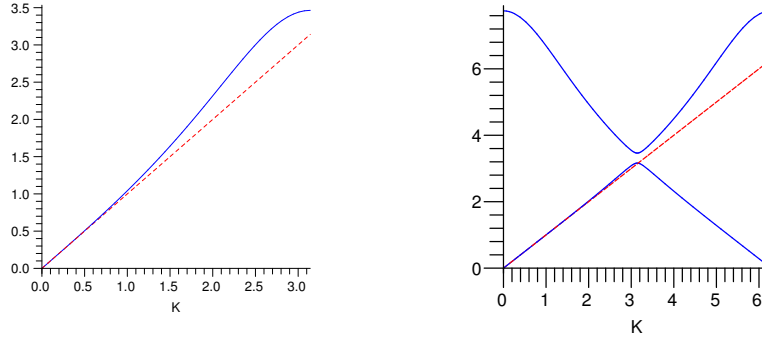


FIG. 10 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$ pour la méthode des EF d’arête ($p = 1$ à gauche; $p = 2$ à droite). En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Seul le cadran positif est montré; on obtient les autres courbes par simples symétries par rapport aux deux axes. Notons que pour $p = 2$, l’intervalle de nombres d’onde résolu est deux fois plus grand, et qu’il existe deux valeurs de ω possibles pour une valeur de k (voir la discussion p82 en annexe, sur la relation de dispersion des méthodes d’ordre élevé, et des explications sur les diverses courbes obtenues).

Les conditions aux limites de type conducteur parfait sont prises en compte aisément dans la formulation intégrale. Ces EF se réduisant au schéma de Yee sur maillage cartésien, l’implémentation d’une couche PML est naturelle.

Propriétés principales

La méthode est d’ordre un en général pour les éléments de Nédélec (EF d’arête de bas ordre). Elle est d’ordre deux sur maillage régulier (se ramène au schéma de Yee). Plusieurs familles d’EF d’arête d’ordre élevé existent. Nous donnons des références dans la sous-section consacrée aux extensions.

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il conserve une énergie électromagnétique discrète.

La relation de dispersion en plusieurs dimensions se déduit de la relation de dispersion 1D pour l’équation des ondes, par la formule $\omega_{2D}(k_x, k_y)^2 = \omega_{1D}(k_x)^2 + \omega_{1D}(k_y)^2$. Ce résultat est montré pour les éléments de Nédélec de bas ordre, ainsi que pour la famille d’ordre élevé de Ainsworth et Coyle [2]. L’ordre d’erreur de dispersion est $2p$ pour une méthode d’ordre p . En 1D pour l’équation des ondes, les EF d’arête correspondent aux EF nodaux (sans condensation de masse). On peut calculer la relation de dispersion dans ce cas: les courbes pour $p = 1$ et $p = 2$ sont présentées aux graphes de la Figure 10.

Comme pour le schéma de Yee, cette méthode satisfait au niveau discret la relation d’algèbre vectorielle $\text{div}_h \mathbf{rot}_h = 0$. Les contraintes de divergence sont donc prises en

compte implicitement, à condition que les sources vérifient l'équation de conservation de la charge discrète.

La méthode n'est pas explicite a priori. Des efforts ont été entrepris pour obtenir la condensation de la matrice de masse. A l'ordre 1, c'est possible [80]. A l'ordre 2, un élément a été construit dans ce but dans [50], mais on ne sait pas le faire de façon générale pour les EF d'arête d'ordre élevé.

3.3.3 Eléments finis de Cohen-Monk

Formulation

La méthode est détaillée dans [37]. La formulation variationnelle pour cette méthode est basée sur les équations d'Ampère et de Faraday écrites au premier ordre en temps. Les champs sont cherchés dans $H_0(\mathbf{rot}) \times L^2$ pour une condition aux limites de type conducteur parfait, tels que

$$\int_K \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_K \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\phi}) dx = - \int_K \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\phi} dx, \quad (68)$$

$$\int_K \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\psi} dx + \int_K \nabla \times \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\psi} dx = 0, \quad (69)$$

pour toutes fonctions tests $\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{\psi}$ dans $H_0(\mathbf{rot}) \times L^2$. En fait, on peut obtenir la même approximation à partir de la formulation au second ordre en temps [99].

Maillage

La méthode est construite pour des hexaèdres (éventuellement déformés).

Discrétisation spatiale

Les EF conformes dans $H_0(\mathbf{rot})$ choisis sont ceux de la deuxième famille de Nédélec [96]. Ils assurent la continuité tangentielle du champ aux interfaces inter-éléments. Alors que les éléments de la première famille de Nédélec sont d'ordre 1, les éléments de la deuxième famille de Nédélec sont d'ordre 2. Une approximation cubique a aussi été construite, et formellement des éléments d'ordre quelconque.

Le deuxième point important est l'utilisation d'une quadrature numérique basée sur les points de Gauss-Lobatto pour calculer la matrice de masse, ce qui permet de la rendre diagonale par blocs [99, 34]. On peut voir un exemple de degrés de liberté sur la Figure 11.

Discrétisation temporelle

Le schéma saute-mouton est utilisé.

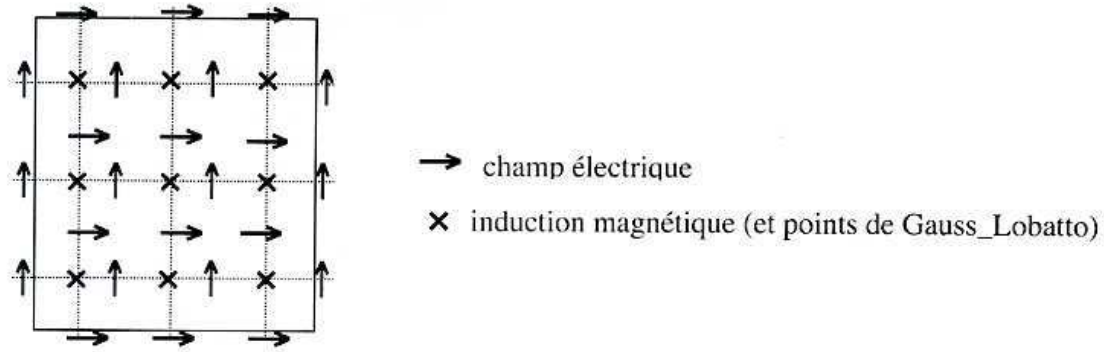


FIG. 11 – Degrés de liberté pour l’EF rectangulaire de Cohen-Monk d’ordre 2.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites de type conducteur parfait sont prises en compte aisément dans la formulation intégrale. La méthode est appliquée à des conditions PML.

Propriétés principales

La méthode est d’ordre deux et quatre en espace, pour les approximations respectivement linéaire et cubique (qui sont celles implémentées et présentées dans le papier original).

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il conserve une énergie électromagnétique discrète.

A l’instar de la méthode d’EF d’arête précédente, l’étude de la relation de dispersion en plusieurs dimensions se réduit à celle de l’étude 2D pour l’équation des ondes, avec la relation $\omega_{2D}(k_x, k_y)^2 = \omega_{1D}(k_x)^2 + \omega_{1D}(k_y)^2$. Cependant, la discrétisation correspond dans ce cas en 1D à des EF avec condensation de masse pour l’équation des ondes. Les courbes de dispersion pour $p = 1$ et $p = 2$ sont présentées à la figure 12. L’erreur de dispersion est d’ordre $2p$.

Comme les autres EF d’arête, les contraintes de divergence sont prises en compte implicitement dans la formulation, à condition que la charge soit conservée au niveau discret.

La méthode est explicite grâce à la condensation de masse induite par l’utilisation de la quadrature numérique de Gauss-Lobatto.

3.3.4 Variantes et extensions

La construction d’EF d’ordre élevé n’est pas aussi simple que pour les EF nodaux “classiques”. Les éléments de Nédelec considérés ici sont conformes dans $H(\mathbf{rot})$. Ils font

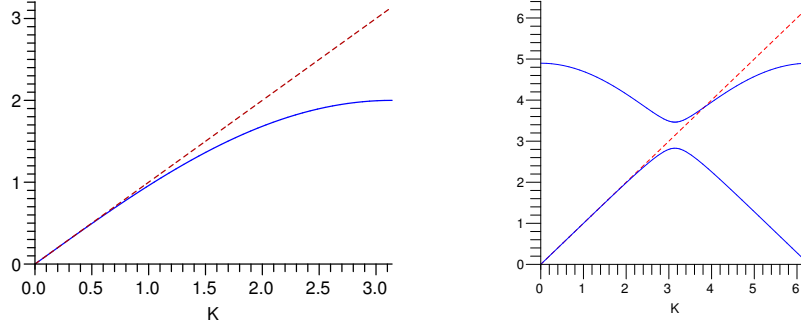


FIG. 12 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$ pour la méthode des EF de Cohen-Monk ($p = 1$ à gauche; $p = 2$ à droite). En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Seul le cadran positif est montré; on obtient les autres courbes par simples symétries par rapport aux deux axes.

partie d'une séquence, qui vérifie au niveau discret, le même diagramme de De Rham que les quantités continues (voir discussion en annexe sur les modes parasites). Des EF d'ordre élevé vérifiant la même séquence ont été construits. Les discrétisations proposées par Demkowicz et Vardepetyan [45], Rachowicz et Demkowicz [102], Ainsworth et Coyle [3], Schöberl *et al* [108] ont l'avantage d'être hiérarchiques, ce qui permet l'adaptativité.

Ces éléments d'ordre élevé réduisent l'erreur de dispersion, mais le raffinement en h est indispensable pour les détails géométriques. En combinant correctement les deux types de raffinement, on peut obtenir une convergence exponentielle [41].

3.4 Méthodes de Galerkin discontinues

3.4.1 Méthode de Ferrières-Cohen-Pernet

Formulation

C'est une méthode établie sur les mêmes idées que la méthode EF de Cohen-Monk présenté précédemment, mais qui n'impose pas la continuité tangentielle [34, 99]. Pour tous les éléments K d'un maillage, les champs vérifient les équations intégrales suivantes

$$\int_K \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_K (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \alpha \int_{\partial K} [[\mathbf{H} \times \mathbf{n}]] \cdot \boldsymbol{\phi} ds = - \int_K \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\phi} dx, \quad (70)$$

$$\int_K \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx + \int_K (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \gamma \int_{\partial K} [[\mathbf{E} \times \mathbf{n}]] \cdot \boldsymbol{\phi} ds = 0. \quad (71)$$

Des termes de bord ont été ajoutés à la formulation intégrale des équations de Maxwell pour pénaliser la continuité des composantes tangentielles (les doubles crochets signifient que l'on prend le saut de la quantité à la frontière de l'élément K). Le choix des paramètres $\alpha = -1/2$, $\gamma = 1/2$ pour les faces inter-éléments, et $\alpha = 0$, $\gamma = 1$ pour les

faces du bord, est fait pour que les solutions conservent une énergie discrète. Un autre choix de α et γ permet d'avoir de la dissipation.

Maillage

Le maillage est constitué d'hexaèdres (éventuellement déformés).

Discrétisation spatiale

Le choix des paramètres établit la façon dont sont définies les valeurs des champs aux frontières des éléments, à savoir un flux centré ici obtenu comme la moyenne des valeurs aux deux éléments voisins.

Des polynômes d'interpolation de Lagrange de degré p (de 1 à 5) sont utilisés pour définir les champs à l'intérieur de chaque élément. Etant une variante ou extension de la méthode d'EF de Cohen-Monk, une quadrature numérique effectuée aux points de Gauss permet d'avoir une matrice de masse diagonale par blocs de 3×3 .

Discrétisation temporelle

Le schéma saute-mouton est utilisé.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites pour un conducteur parfait sont prises en compte sans difficulté. Une couche PML peut être utilisée.

Propriétés principales

La méthode est d'ordre $p + 1$ en espace.

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il conserve une énergie électromagnétique discrète.

Comme la version en EF continu, la relation de dispersion en plusieurs dimensions a la propriété d'être donnée par la somme des relations 1D. La courbe pour $p = 1$ est donnée à la figure 13. L'erreur de dispersion est d'ordre $2p + 2$ si p est pair, et $2p$ si p est impair.

Les contraintes de divergence ne sont pas prises en compte dans la formulation et sont donc laissées à l'ordre d'erreur du schéma.

La méthode est explicite.

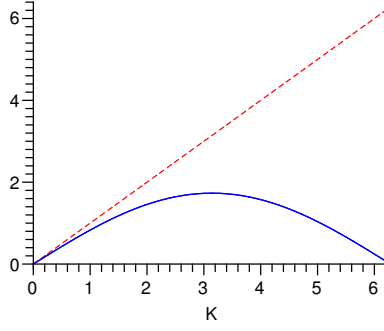


FIG. 13 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$ pour la méthode GD de Ferrières $p = 1$. En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Pour GD, $p = 1$ correspond à 2 degrés de liberté par maille, l'intervalle de nombres d'onde résolu est plus grand, comme pour les EF $p = 2$. Seul le cadran positif est montré; on obtient les autres courbes par simples symétries par rapport aux deux axes.

3.4.2 Méthode de Sonnendrücker

Formulation

La méthode est décrite en détail dans le rapport [111]. La formulation s'obtient de façon classique pour des problèmes hyperboliques. Après avoir multiplié par une fonction test et intégré sur le domaine, une intégration par parties fait apparaître un terme de bord. Pour définir les champs pour ce terme de bord, il faut définir un flux numérique à partir des valeurs des champs dans chacun des éléments voisins. Après une nouvelle intégration par parties, et pour un flux numérique hybride entre un flux centré et décentré amont, la formulation choisie s'écrit

$$\begin{aligned} & \int_K \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_K (\nabla \times \mathbf{H}) \cdot \boldsymbol{\phi} dx \\ & - \int_{\partial K} \frac{1}{2} (\mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{H} \rrbracket - \alpha \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} \mathbf{n} \times \mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{E} \rrbracket) \cdot \boldsymbol{\phi} ds, = - \int_K \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\phi} dx \quad (72) \\ & \int_K \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx + \int_K (\nabla \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_{\partial K} \frac{1}{2} (-\mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{E} \rrbracket \\ & - \alpha \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}} \mathbf{n} \times \mathbf{n} \times \llbracket \mathbf{H} \rrbracket) \cdot \boldsymbol{\phi} ds = 0. \quad (73) \end{aligned}$$

Discrétisation spatiale

La première approximation consiste donc à choisir le flux numérique parmi la famille paramétrée par α , qui va d'un flux centré avec $\alpha = 0$ à un flux décentré amont avec $\alpha = 1$.

Au sein de chaque élément, les champs sont déterminés par une interpolation de Lagrange basée sur un ensemble de points spécifique aux tétraèdres (un choix d'un en-

semble de points pour une interpolation optimale a été établi jusqu'aux polynômes de degré 10, mais l'optimalité n'est pas prouvée théoriquement [65]; en particulier, sur chaque face d'un tétraèdre, les points choisis définissent l'interpolation de Lagrange 2D correspondante).

Maillage

Le maillage est composé de tétraèdres.

Discrétisation temporelle

Un schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 est utilisé pour $\alpha > 0$, et le schéma saute-mouton sinon.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites ne posent pas de difficulté particulière.

Propriétés principales

La méthode est d'ordre $p + 1$ pour une approximation en polynômes de degré p .

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il est dissipatif si $\alpha > 0$. Si $\alpha = 0$, il conserve une énergie électromagnétique discrète.

Pour GD en général, la relation de dispersion multi-dimensions n'est pas donnée simplement à partir de la relation de dispersion 1D. La figure 14 présente la courbe de dispersion en 1D pour $p = 1$ et des flux centrés, qui ne correspond donc qu'à la propagation des ondes le long des axes du maillage. L'erreur de dispersion, avec des flux centrés, est d'ordre $2p + 2$ si p est pair et $2p$ si p est impair.

Les contraintes de divergence ne sont pas prises en compte dans la formulation.

La méthode est explicite.

3.4.3 Méthode de Piperno

Formulation

Nous présentons une méthode étudiée par Piperno [25, 26], construite sur les mêmes principes mais avec un choix différent de base polynomiale. Le point de départ est le même que la méthode précédente, à savoir une intégration par parties qui fait apparaître

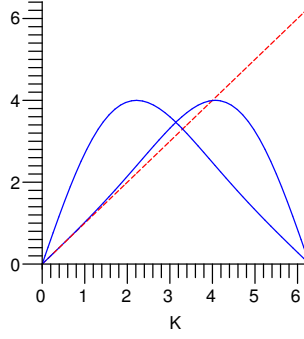


FIG. 14 – Relation de dispersion $\frac{\omega\Delta x}{c}$ en fonction de $K = k\Delta x$ pour la méthode GD de Sonnendrucker avec flux centrés $p = 1$. En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Pour GD, $p = 1$ correspond à 2 degrés de liberté par maille, l'intervalle de nombres d'onde résolu est plus grand, comme pour les EF $p = 2$. Seul le cadran positif est montré; on obtient les autres courbes par simples symétries par rapport aux deux axes.

un terme de bord. Pour tous les éléments K d'un maillage, on a

$$\int_K \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx - \int_K \mathbf{H} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\phi}) dx + \int_{\partial K} ([\mathbf{H}] \times \boldsymbol{\phi}) \cdot \mathbf{n} ds = - \int_K \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\phi} dx, \quad (74)$$

$$\int_K \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \cdot \boldsymbol{\phi} dx + \int_K \mathbf{E} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\phi}) dx - \int_{\partial K} ([\mathbf{E}] \times \boldsymbol{\phi}) \cdot \mathbf{n} ds = 0, \quad (75)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho, \quad (76)$$

$$\nabla \cdot (\mu \mathbf{H}) = 0. \quad (77)$$

Maillage

Le choix du maillage s'est porté sur des hexaèdres orthogonaux, avec la possibilité d'utiliser des éléments non conformes (c'est-à-dire qu'une arête peut joindre l'élément voisin au milieu d'une de ses arêtes).

Discrétisation spatiale

Les termes de bord sont définis à l'aide d'un flux centré pour \mathbf{E} et \mathbf{H} .

Au sein de chaque élément, des approximations polynômiales avec des bases à divergence nulle sont choisies. Des bases de polynômes de degré 1 et 2 ont été implémentées.

Les permittivité et perméabilité sont considérées constantes par élément.

Discrétisation temporelle

Le schéma saute-mouton est utilisé.

Prise en compte des conditions aux limites

Les conditions aux limites ne posent pas de difficulté particulière.

Propriétés principales

La méthode est d'ordre 2 et 3 en espace pour les polynômes de degré 1 et 2 respectivement.

Le schéma est stable sous une condition CFL. Il conserve une énergie électromagnétique discrète.

L'erreur de dispersion est d'ordre 2 pour la base P_{div}^1 [25].

Les contraintes de divergence sont prises en compte dans l'espace d'approximation. En fait, la loi de Gauss pour une charge non nulle n'est pas prise en compte par cette base. Ce sont les sauts aux interfaces inter-éléments qui permettent d'avoir une charge non nulle.

La méthode est explicite.

3.4.4 Variantes et extensions

A l'instar des méthodes de VF pour lois de conservation, il est possible de choisir une des méthodes GD existantes dans ce cadre. On peut voir [32] pour des références sur ces possibilités.

Notons que pour résoudre les équations de Maxwell harmoniques (système elliptique), différentes formulations GD ont été proposées. Elles consistent à pénaliser différemment les sauts aux frontières inter-éléments, et éventuellement à pénaliser également par un terme assurant les contraintes de divergence de façon faible [66, 100, 24].

Enfin, il existe une méthode de post-traitement des solutions permettant d'améliorer l'ordre d'erreur [106].

4 Critères d'appréciation des solveurs Maxwell

4.1 Précision - robustesse

4.1.1 Précision et propriétés numériques (I)

Ce critère regroupe les propriétés liées à la précision de la méthode. On doit pouvoir monter en ordre (au minimum l'ordre 2, si possible mieux) et avoir des bonnes propriétés

de la solution numérique.

compatibilité géométrique (I-1) : ce critère correspond au fait que certaines discrétisations respectent exactement des propriétés vectorielles vérifiées par les champs. Cela inclut notamment la relation $\text{div}_h \mathbf{rot}_h = 0$. Ce point est abordé p74-75, au cours de la discussion sur les modes parasites.

ordres en temps et en espace; montée en ordre (I-2) : ordres d'erreur de la méthode en espace et en temps, et possibilité de monter (aisément) en ordre.

dispersion numérique (I-3) : erreur de phase en fonction de la longueur d'onde et de la direction (anisotropie) des ondes modélisées par le schéma. L'erreur de phase est visualisée par la courbe de dispersion des équations discrètes. L'erreur d'anisotropie est particulièrement présente sur les maillages cartésiens. Elle est atténuée sur des maillages en triangles et tétraèdres. L'effet de la non uniformité des maillages le cas échéant est mal connu.

dissipation numérique / conservation énergie (I-4) : tendance à atténuer les ondes modélisées par le schéma, ou au contraire à conserver une énergie discrète. La plupart des méthodes présentées conservent une énergie électromagnétique, et ne sont donc pas dissipatives. Pour les méthodes de Remaki, de Ferrières et de Sonnendrücker, on peut choisir un flux centré qui conduit à la conservation d'une énergie, comme pour les autres méthodes, simplement en spécifiant un paramètre. La conservation de l'énergie n'est donc pas un critère déterminant puisqu'il est vérifié par toutes les méthodes. En revanche, le choix d'un flux (partiellement) décentré rend les trois méthodes citées dissipatives. La possibilité d'avoir une méthode dissipative de façon contrôlée est choisie, ici, comme étant un avantage, dans la mesure où on garde la possibilité de conserver l'énergie avec la même méthode.

4.1.2 Artefacts numériques (II)

L'utilisation de méthodes numériques peut conduire dans le cas général, et particulièrement dans le présent contexte, à l'apparition d'artefacts numériques qui rendent la méthode inconsistante ou instable. A défaut de pouvoir les éviter complètement pour certains, il faut les minimiser tant que possible pour avoir confiance dans les simulations effectuées, ou bien les connaître suffisamment pour savoir dans quelles circonstances et jusqu'à quand on peut avoir confiance.

modes parasites (II-1) : solution numérique du problème spectral associé qui n'approche pas un mode physique du problème de Maxwell. Nous avons rassemblé un certain nombre d'informations sur ce sujet et proposé une discussion en annexe. En particulier, il s'avère que les modes parasites qui ont été constatés lors de l'utilisation des EF classiques (EF nodaux par opposition aux EF d'arête) ont deux origines distinctes. La première est liée aux contraintes de divergence que doivent vérifier les champs. La seconde est

liée à la capacité de la discrétisation à bien résoudre les courtes longueurs d'onde. On parlera de modes parasites respectivement du premier type et du second type dans la suite.

coins rentrants (II-2) : possible convergence de la méthode vers une solution fautive en présence de coins rentrants dans le domaine induisant des singularités des champs. Ce point est également brièvement discuté dans l'annexe (p71).

effet Cerenkov numérique (II-3) : radiation non physique induite par la présence de particules chargées se propageant plus rapidement que la vitesse de la lumière numérique (due à la forte dispersion numérique aux grands nombres d'onde).

sensibilité au bruit inhérent à la méthode PIC (II-4) : la méthode PIC fournit des sources ρ et \mathbf{J} bruitées aux équations de Maxwell. Ce bruit numérique est essentiellement hautes fréquences, et peut être plus ou moins excité ou atténué selon le solveur.

4.2 Flexibilité

4.2.1 Formulation (III)

On veut pouvoir utiliser la même méthode numérique pour différentes applications et hypothèses sans grands changements.

formulation 2D/3D/axi (III-1) : capacité de la méthode à traiter aisément les trois formulations 2D, 3D ou axisymétrique.

différents matériaux (III-2) : possibilité d'avoir différents matériaux composant le domaine.

4.2.2 Géométrie (IV)

traitement des frontières (IV-1) : capacité à prendre en compte des domaines de géométrie complexe sans perdre en précision.

4.2.3 Maillage (V)

La gestion du maillage conditionne grandement la qualité des simulations numériques.

génération (V-1) : possibilité d'avoir facilement un maillage approprié à la méthode.

raffinement (V-2) : possibilité de raffiner le maillage pour augmenter la précision localement.

4.3 Efficacité

4.3.1 Complexité de calcul (VI)

Il s'agit du nombre d'opérations élémentaires nécessaires à l'obtention de la solution.

4.3.2 Parallélisation (VII)

Le code doit être assez facilement et efficacement parallélisable pour envisager de grosses applications.

4.3.3 Facilité de mise en œuvre (VIII)

On tient compte ici du temps de développement de la méthode ou des ajustements nécessaires à une méthode existante pour satisfaire le plus grand nombre des critères énoncés.

4.3.4 Couplage à du structuré (IX)

Un point d'efficacité non négligeable si on se restreint à une méthode d'ordre deux est la possibilité de pouvoir se ramener au schéma de Yee sur une portion du domaine, dans un couplage simple avec la méthode utilisée sur le reste du domaine.

4.4 Retour d'expérience (X)

Les informations concernant le développement et l'utilisation des différentes méthodes qui peuvent être obtenues auprès des personnes concernées s'avèrent souvent un critère important. Un écart peut être observé entre les capacités d'une méthode prévues a priori ou théoriquement et la réalité.

5 Tableau d'évaluation des solveurs selon les critères choisis

Savoir si une méthode vérifie tel ou tel critère n'a pas forcément une réponse évidente. En particulier, pour obtenir une conclusion, nous nous appuyons essentiellement sur les travaux présentés dans la littérature. L'idéal serait de pouvoir effectuer des tests numériques afin de vérifier la pertinence de ces conclusions. Cependant, nous ne pouvons disposer de tous les différents codes, ce qui nous aurait permis d'effectuer des comparaisons plus poussées.

La vérification ou non des différents critères par chacune des méthodes est présentée de façon synthétique dans la table 1. La signification des symboles est la suivante: ++ si le critère est vérifié pour la méthode en l'état; + si le critère est vérifié mais moins qu'une autre méthode ou s'il peut être vérifié grâce à des modifications mineures; +/- s'il peut être vérifié mais au prix de modifications relativement importantes; - si le critère est une

réelle limitation de la méthode.

6 Discussion plus détaillée pour chaque méthode

6.1 Méthode DF de Yee

Robustesse-précision

Cette méthode s'est imposée grâce à la compatibilité géométrique qu'elle assure avec les relations d'algèbre vectorielle qui sont vérifiées par les champs électromagnétiques (I-1). En effet, cela permet d'éliminer les modes parasites de type 1 (II-1). La méthode est d'ordre deux, mais s'étend difficilement aux ordres supérieurs (I-2), justement lorsque l'on veut conserver ces propriétés de compatibilité géométrique qui ont fait son succès. Elle introduit naturellement de la dispersion numérique d'ordre deux, qu'il est également difficile de réduire puisque l'on ne peut pas monter en ordre aisément. En particulier, l'instabilité de Cerenkov numérique peut se développer si des particules très rapides sont présentes (II-3). En revanche, la courbe de dispersion est monotone et ne donne pas lieu à des modes parasites du second type décrits en annexe (II-1). Elle est donc dépourvue de modes parasites. Remarquons que l'utilisation de DF sur grilles non décalées conduit au contraire à la présence des deux types de modes parasites. La présence de coins rentrants ne pose pas de problème de consistance (II-2). En revanche, pour atteindre une précision suffisante pour bien décrire la singularité, il faut raffiner le maillage localement.

Le schéma conserve une énergie électromagnétique, et ne contient donc pas de dissipation numérique (I-4). Cela le rend sensible au bruit de la méthode PIC (II-4). La régularité du maillage implique une périodicité de la discrétisation spatiale qui provoque l'aliasing, ce qui contribue également à la sensibilité au bruit numérique.

Flexibilité

S'adaptant aux formulations 2D/3D/axi sans difficultés (III-1), il est possible de considérer plusieurs matériaux, mais rien n'est fait en général pour tenir compte de la discontinuité des composantes normales dans ce cas (III-2). Un inconvénient majeur de la méthode (de base) concerne la représentation des frontières du domaine (IV-1). A cela s'ajoute la représentation des détails géométriques pour lesquels il faudrait raffiner localement. Or, le raffinement local est délicat pour les méthodes de DF, notamment si on veut conserver les propriétés du schéma de Yee (V-2).

Ce problème de représentation des frontières n'apparaît pas seulement pour la description des détails, mais de façon générale pour toute frontière droite ou courbe qui ne suit pas les axes du maillage. En effet, la frontière est alors décrite en marches d'escalier (staircasing). S'il n'est pas catastrophique pour les simulations, ce problème fait perdre l'ordre 2 de la méthode. En fait, la combinaison du staircasing et l'absence d'imposition des bonnes conditions de saut en présence de matériaux différents peut même produire

	Critères	DF Yee	VF Hermeline	VF Remaki	EF Assous	EF Nédelec	EF Cohen	GD Ferrières	GD Sonnen- drücker	GD Piperno
I-1	Compatibilité géométrique	++	++	-	+	++	++	-	-	-
I-2	Montée en ordre	+/-	-	+	+	+	+	+	++	++
I-3	Dispersion numérique	+/-	+/-	+/-	+	+	+	+	+	+
I-4	Dissipation numérique	-	-	+	-	-	-	+	++	-
II-1	Modes parasites	++	++	+/-	+	++	+	+	+	+
II-2	Coins rentrants	+	+	+	+/-	+	+	+	+	+
II-3	Cerenkov numérique	+/-	+/-	+/-	+/-	+	+/-	+	+	+
II-4	Sensibilité bruit PIC	+/-	+/-	+	+/-	+/-	-	-	+	+/-
III-1	Formulations 2D/3D/axi	++	+	++	++	++	++	++	++	++
III-2	Multi-matériaux	+/-	++	++	+	++	++	++	++	++
IV-1	Frontières du domaine	+/-	++	++	++	++	++	++	++	++
V-1	Génération de maillage	++	-	++	+	++	+/-	+/-	++	++
V-2	Raffinement de maillage	+	-	++	+	+	+	++	++	++
VI	Complexité de calcul	++	+/-	+/-	+	+/-	+	+	+	+
VII	Parallélisation	++	+	+	+	+/-	+/-	++	++	++
VIII	Facilité mise en œuvre	++	+/-	++	+/-	+/-	+/-	+	+	+
IX	Couplage au structuré	++	++	++	++	++	++	++	++	++
X	Retour d'expérience	++	+	+/-	+	+	+	+/-	+/-	+/-

TAB. 1 – vérification des critères par les différentes méthodes. La signification des symboles est la suivante: ++ si le critère est vérifié pour la méthode en l'état; + si le critère est vérifié mais moins bien que pour une autre méthode ou s'il peut être vérifié grâce à des modifications mineures; +/- s'il peut être vérifié mais au prix de modifications relativement importantes; - si le critère est une réelle limitation de la méthode.

une approximation non convergente [48]. Pour résoudre le staircasing, des techniques d'interpolation spécifiques pour les bords existent [115]. En particulier, Ditkowski, Dridi et Hesthaven [48] proposent une modification du schéma de Yee, qui prenne en compte les frontières courbes ainsi que les conditions de saut correctes aux interfaces entre matériaux (technique appelée “immersed” or “embedded interface method”). Ils fournissent une analyse et des tests numériques prouvant que la méthode reste d'ordre 2. La principale source de complication comparé au schéma de Yee réside dans la phase de pré-traitement où des “molécules de DF” spécifiques sont construites. Une fois que c'est fait, le coût est essentiellement le même à chaque pas de temps. Les codes commerciaux Magic [57] et Microwave studio [85] ont également implémenté de telles techniques pour éviter le staircasing et assurent que l'ordre deux de la méthode est préservé.

Efficacité

Le schéma de Yee est un schéma simple à implémenter (VIII). Basé sur des maillages réguliers (IX), le coût de la localisation des particules est faible. La méthode se parallélise bien (VII). Le nombre d'opérations à effectuer à chaque pas de temps est faible (VI). L'efficacité est donc un point fort de cette méthode.

Retour d'expérience

C'est la méthode de base que ce soit pour résoudre Maxwell seul ou au sein de la méthode PIC. Les retours d'expérience sont évidemment très nombreux (X). C'est une méthode efficace, qui permet de mailler plus fin si on souhaite plus de précision. Mais son manque de flexibilité a poussé les différentes équipes de recherche à développer des méthodes alternatives. En effet, pour des études académiques où l'utilisation de maillages cartésiens suffit souvent, elle convient bien. Mais, pour des applications où la prise en compte de géométries complexes avec des détails est primordiale, elle montre des limites sérieuses.

6.2 Méthode VF de Hermeline

Robustesse-précision

Etant une extension du schéma de Yee pour des maillages non uniformes, elle a des propriétés de précision similaires. Elle se distingue surtout par un gain en flexibilité, mais au prix d'une perte en efficacité.

La compatibilité géométrique est bien assurée (I-1), et la montée en ordre n'est pas possible (I-2). Le schéma se réduit au schéma de Yee sur maillage régulier, donc l'analyse de dispersion sur de tels maillages est identique (I-3, I-4). Si on prend en compte la non uniformité du maillage, l'ordre 2 de la méthode est constaté, mais n'est pas démontré.

Elle n'est pas concernée par les modes parasites pour les mêmes raisons que le schéma de Yee (II-1). La présence d'un coin rentrant génère un problème de précision qui ne

peut être géré que par raffinement (II-2). L'effet Cerenkov numérique (II-3) est susceptible d'être présent. La sensibilité aux bruit de courtes longueur d'onde est similaire. En revanche, la réduction de la périodicité des noeuds du maillage réduit l'influence de l'aliasing (II-4).

Flexibilité

La méthode n'a été appliquée que pour les équations de Maxwell en coordonnées cartésiennes. Son application en formulation axisymétrique n'est pas une extension directe, et l'utilisation en 3D est conditionnée à une bonne génération du maillage (III-1). En revanche, des matériaux différents peuvent être considérés (III-2). Le passage à un maillage non uniforme permet donc de modéliser des frontières quelconques (IV-1). Cependant, la création de ce maillage est un point faible de la méthode, puisqu'il doit être Delaunay-Voronoi avec son dual, ce qui est difficile voire impossible en 3D (V-1). Si cette propriété n'est pas vérifiée, les diverses qualités de précision du schéma (ordre 2, compatibilité géométrique) sont perdues [38]. Une conséquence immédiate est la difficulté à raffiner localement (V-2). On peut seulement le faire de façon très progressive, avec la difficulté de préserver la propriété requise pour les maillages. Une extension récente a été proposée par F.Hermeline pour s'affranchir de ces maillages Delaunay-Voronoi [63].

Efficacité

Le nombre d'opérations à effectuer à chaque itération en temps est plus grand que pour le schéma de Yee, notamment pour la variante sur maillages quelconques puisqu'il faut résoudre simultanément les équations de Maxwell sur les deux maillages duaux (VI). Il existe une version parallèle (VII). Le schéma 2D a déjà été inclus dans une méthode PIC, mais pas la version récente de Hermeline dont la mise en œuvre est à faire (VIII).

Retour d'expérience

Il y a un retour d'expérience non négligeable sur cette méthode (X). Le succès de la méthode en 2D est démontrée, mais sa dépendance à la contrainte de maillages Delaunay-Voronoi est confirmée dans les faits. En revanche, la variante pour maillages quelconques est trop récente pour disposer d'un retour d'expérience.

6.3 Méthode VF de Remaki

Robustesse-précision

Cette méthode résout les équations d'évolution de Maxwell, sans prendre en compte les contraintes de divergence qui sont laissées à l'approximation du schéma. L'utilisation d'une technique de correction pour conserver la charge au cours de la simulation PIC, comme nous l'avons discuté dans la section 2, relativise cet inconvénient (I-1). Susceptible d'autoriser la présence de modes parasites ne vérifiant pas la loi de Gauss pour \mathbf{E} lors de la résolution des équations de Maxwell classiques, l'utilisation d'une formulation

généralisée (29-32), correspondant à une correction permettant de satisfaire la conservation de la charge, doit suffire à les éviter (II-1). Une façon de monter en ordre mène typiquement à une méthode GD comme celle de Hesthaven (I-2). L'erreur de dispersion est d'ordre 2 comme le schéma de Yee (I-3). La relation de dispersion numérique en 1D (figure 7) est la même que pour des DF sur grilles non décalées. Comme on le voit sur la courbe qui n'est pas monotone, cette méthode est donc également concernée par les modes parasites du deuxième type (II-1). Ceci est vrai surtout pour la version utilisant un flux centré qui permet de conserver une énergie discrète (I-4). En revanche, avec un flux décentré, la méthode est diffuse. L'erreur de dissipation domine l'erreur de dispersion et les modes parasites ne sont pas un problème dans ce cas.

En revanche, comme pour le schéma de Yee, la courbe de dispersion approche la courbe exacte par dessous, ce qui la rend sujette à l'effet Cerenkov numérique (II-3). La présence de coins rentrants ne cause pas de problème particulier (II-2). La possibilité de choisir un flux légèrement dissipatif peut réduire la sensibilité au bruit de la méthode PIC (II-4).

Flexibilité

La méthode s'applique indifféremment en 2 ou 3 dimensions. A priori, le changement en coordonnées cylindriques ne doit pas changer le caractère hyperbolique, et la méthode devrait s'appliquer de la même manière (III-1). La présence de différents matériaux est possible sans difficultés (III-2). Les frontières du domaine peuvent être parfaitement modélisées (IV-1), grâce à l'utilisation de maillages quelconques qui sont faciles à générer (V-1). Le raffinement de maillage est plus aisé que pour les DF (V-2).

Efficacité

Facile à mettre en œuvre (VIII), la méthode se parallélise bien (VII), mais la complexité de calcul est assez conséquente par rapport au schéma de Yee (VI). On peut aisément l'utiliser avec une partie du domaine maillé en structuré. La coupler avec Yee sur du maillage structuré n'est pas naturel cependant (IX).

Retour d'expérience

Ce type de méthodes est très utilisé pour les systèmes hyperboliques en général, notamment les systèmes non linéaires. En revanche, l'expérience de l'INRIA sur le sujet les a semble-t-il conduit à monter en ordre et à passer à du GD (X). Au sein d'une méthode PIC, ces méthodes ont été utilisées par Munz *et al* [91].

6.4 Méthode EF d'Assous

Robustesse-précision

La méthode est construite sur deux maillages hiérarchiques qui lui permettent d'assurer une compatibilité géométrique minimum (I-1). En effet, l'approximation du gradient d'un scalaire défini sur le maillage grossier correspond justement à l'approximation sur

le maillage fin. Cependant, en général, la compatibilité géométrique s'arrête là, et la propriété d'algèbre vectorielle (24) n'est pas vérifiée sur des maillages non uniformes. On peut certainement monter en ordre selon la même idée initiale, mais ce n'est pas immédiat (I-2). Sur maillage régulier en 1D, la discrétisation spatiale correspond à celle du schéma de Yee. Les propriétés de dispersion sont donc les mêmes pour les ondes se propageant selon les axes du maillage (I-3). La méthode conserve une énergie discrète (I-4).

L'utilisation d'un multiplicateur de Lagrange pour prendre en compte la contrainte de divergence correspond à la correction de Boris (voir paragraphe sur la conservation de la charge en section 2). La méthode est donc construite sur une formulation et une discrétisation qui permettent d'éviter la mauvaise approximation des champs de gradient et l'apparition de modes parasites du premier type, contrairement aux EF nodaux utilisés de façon classique (II-1). Ces EF nodaux classiques ont également la mauvaise propriété d'avoir une relation de dispersion non monotone pour les ondes se propageant selon les diagonales du maillage. On ne sait pas si les éléments avec multiplicateur de Lagrange ont également une relation de dispersion non monotone. Donc, notre conclusion est réservée concernant le deuxième type de mode parasite (II-1).

Pour éviter l'effet Cerenkov numérique, les auteurs de la méthode ont proposé une variante en modifiant le schéma en temps qui donne une courbe de dispersion située au-dessus de la courbe exacte pour la plupart des longueurs d'onde [7] (II-3). L'inconvénient principal de la méthode est la nécessité de faire quelque chose lorsque le domaine a un coin rentrant. En effet, les EF conformes dans H^1 , dont ceux utilisés dans cette méthode, ne convergent pas vers la bonne solution en présence d'un coin rentrant [39]. En 2D, la méthode du complément singulier peut être utilisée [5], mais c'est difficile, si ce n'est impossible, en 3D, car il faut déterminer la forme exacte de la singularité, ce que l'on ne sait pas faire en général. La possibilité d'utiliser des formulations augmentées des équations de Maxwell a été proposée [39, 30], mais en pratique, reste encore un sujet de recherche actif (II-2).

La méthode n'est pas spécifiquement sensible au bruit PIC, mais elle conserve une énergie discrète et n'est pas dissipative (II-4).

Flexibilité

La méthode a été développée en formulation axisymétrique [4], mais son application en 3D est problématique à cause des coins rentrants (III-1). La prise en compte de matériaux différents est possible et décrite dans [8]. Toutefois, elle n'est pas immédiate puisque des conditions d'interface sont établies et prises en compte explicitement dans la formulation variationnelle (III-2). Les frontières du domaine sont bien représentées (IV-1). Le maillage quelconque est facilement généré (V-1). Le raffinement de maillage est rendu difficile par la compatibilité géométrique recherchée (V-2).

Efficacité

La condensation de masse étant possible, la méthode est explicite en temps, ce qui évite de trop augmenter sa complexité de calcul. En revanche, les conditions aux limites dualisées dans la formulation variationnelle fournissent autant de termes supplémentaires à assembler qui augmentent le coût (VI). La mise en œuvre est assez compliquée, en particulier s'il faut prendre en compte des matériaux inhomogènes et un domaine avec coins rentrants (VIII). La méthode se couple bien avec le schéma de Yee sur un maillage cartésien (IX).

Retour d'expérience

A l'instar des VF de Hermeline, ces EF ont été implémentés dans un code au CEA, où la méthode a été étudiée et utilisée depuis plus de 10 ans. Les problèmes des domaines à coins rentrants est sérieuse. Cela reste un élément pénalisant de cette méthode en 3D (X).

6.5 Méthode EF de Raviart-Thomas-Nédelec

Robustesse-précision

Ces EF assurent une compatibilité géométrique similaire à celle du schéma de Yee, lequel peut être vu comme un cas particulier d'EF d'arête. Les propriétés satisfaites par les champs électromagnétiques se retrouvent satisfaites par leurs approximations. En particulier, la relation (24) est vérifiée (I-1). Considéré comme difficile jusqu'à récemment, la montée en ordre est désormais mieux comprise. Plusieurs familles d'EF d'arête hiérarchiques sont apparus. Ils peuvent être construits de façon automatique à l'aide d'un logiciel de calcul formel comme Maple (I-2).

Si la dispersion numérique est celle du schéma de Yee sur un maillage cartésien, l'utilisation des EF d'arête sur des maillages tétraédriques quelconques améliore les propriétés de dispersion [124]. En effet, alors que les EF nodaux et les EF d'arête sur hexaèdres fournissent une erreur de phase qui est toujours de même signe quelle que soit la direction de l'onde par rapport au maillage, les EF d'arête sur tétraèdres produisent une erreur de phase qui peut être de signe variable. Ainsi, les erreurs peuvent se compenser partiellement, et l'erreur globale est donc plus faible (I-3).

La méthode n'est pas dissipative (I-4). L'absence de modes parasites pour les EF de Nédelec de la première famille sur maillages en tétraèdres ou en hexaèdres, et pour les EF de Nédelec de la seconde famille pour les tétraèdres a été démontrée (II-1). Les éventuels coins rentrants du domaine sont relativement peu gênants grâce notamment au fait que seule la continuité tangentielle est imposée aux bords des éléments. La discontinuité normale à la singularité est donc autorisée par la discrétisation. Il faut toutefois utiliser le raffinement pour pouvoir bien capter le champ intense à cet endroit (II-2). L'apparition de l'effet Cerenkov numérique n'est pas exclue, mais son éventualité est réduite car la courbe de dispersion est au-dessus de la courbe exacte pour certaines directions de propagation par rapport au maillage (II-3). Comme pour le schéma de

Yee ou les VF de Hermeline, cette méthode est sensible aux erreurs de la méthode PIC dans la mesure où cela perturbe les sources des équations de Maxwell et que l'on n'a pas forcément la conservation de la charge. On a vu dans la section 2 que sur maillage régulier, il était possible de construire un algorithme de répartition du courant conservant la charge. Sinon, et c'est le cas général, la compatibilité géométrique de ces solveurs Maxwell ne suffit pas à assurer la conservation de la charge (et il faut utiliser une des méthodes de correction présentées). Dans ce sens là, la méthode est sensible au bruit PIC (idem pour le schéma de Yee et les VF de Hermeline). Cela s'ajoute à l'absence de dissipation numérique (II-4).

Flexibilité

La flexibilité de ces EF d'arête est un atout. On peut les appliquer aux diverses formulations (III-1). Ils permettent surtout de modéliser naturellement des matériaux différents puisqu'ils n'assurent que la continuité tangentielle, juste ce que la physique demande (III-2). Des maillages quelconques peuvent être facilement réalisés (V-1), permettant de bien modéliser les frontières (IV-1). Le raffinement est possible, et avec les familles hiérarchiques d'éléments d'ordre élevé, on peut faire efficacement du raffinement hp (V-2). Le maillage doit cependant rester conforme. Donc le raffinement en h doit être progressif.

Efficacité

La faiblesse de la méthode est le temps de calcul à cause de l'absence de condensation de masse pour ces EF en général. Pour les éléments de plus bas ordre, la condensation de masse a pu être obtenue [80], ainsi que pour un élément d'ordre 2 particulier [50]. Mais, il n'y a pas de méthode générale qui s'applique pour les EF d'ordre élevé. Il en résulte une complexité de calcul accrue par l'inversion d'un système linéaire à chaque pas de temps, puisque le schéma en temps ne peut pas être rendu explicite (VI).

La méthode est relativement difficile à mettre en œuvre (VIII). Elle n'est pas aisément et efficacement parallélisable car il n'y a pas que des opérations locales à effectuer comme pour le schéma de Yee. La parallélisation dépend notamment de l'inversion de la matrice de masse. Celle-ci peut être effectuée grâce aux travaux sur la parallélisation des solveurs creux (VII). En revanche, elle s'accorde parfaitement avec le schéma de Yee sur un maillage cartésien (IX).

Retour d'expérience

Les EF d'arête sont très utilisés pour résoudre les équations de Maxwell. Ils ont été intégré dans la méthode PIC du code PALAS au CEA. Les qualités théoriques de cette méthode ont été confirmées, tout comme la limitation en temps de calcul. Ainsi, l'obtention de la condensation de masse pour des éléments quelconques reste un sujet de recherche ouvert. Toutefois, ce point de vue doit être relativisé dans le contexte d'un code PIC car le temps de calcul n'est pas forcément dominé par la résolution des équations

de Maxwell (cela dépend des applications). Une avancée importante est l'utilisation d'éléments d'ordre élevé. Ceux-ci sont en cours d'implémentation dans le code PALAS. Le retour d'expérience est donc réduit aux conclusions d'équipes internationales les ayant déjà utilisés [123] (X).

6.6 Méthode EF de Cohen-Monk

Robustesse-précision

Faisant partie des EF d'arête, mais ceux de la seconde famille de Nédelec, ces EF de Cohen-Monk ont une compatibilité géométrique similaire (I-1). La montée en ordre est possible (I-2). Les propriétés de dispersion du schéma de Yee se retrouvent sur maillage régulier (I-3). Une énergie discrète est conservée (I-4). Définie sur des maillages en hexaèdres, cette méthode ne bénéficie pas des compensations d'erreurs comme sur des tétraèdres.

La théorie pour les EF d'arête prévoit que ces EF de Cohen-Monk sont justement susceptibles d'en avoir (II-1). En fait, ce n'est pas tout à fait vrai: la théorie s'applique à des méthodes pour lesquelles le calcul des matrices est exact. Il se trouve que l'utilisation d'une quadrature numérique comme c'est le cas dans cette méthode améliore les choses. En effet, la courbe de dispersion montrée à la figure 12 reste monotone en 1D, et comme en multi-D, il est prouvé que la relation de dispersion est la somme des relations 1D, on constate l'absence du problème des modes parasites du deuxième type pour cette méthode (II-1). En revanche, des solutions parasitées par des oscillations ont été obtenues sur des maillages déformés [99]. On ne sait pas les expliquer pour l'instant. Les coins rentrants ne posent pas un problème particulier (II-2), au contraire de l'effet Cerenkov numérique qui peut se produire (II-3). La sensibilité au bruit PIC est similaire aux EF d'arête précédents (II-4).

Flexibilité

Ces EF s'adaptent aux différentes formulations 2D/3D/axi (III-1), à la présence de matériaux (III-2) et approchent bien les frontières (IV-1). En revanche, obtenir un maillage hexaédrique pour une géométrie quelconque n'est pas trivial. La solution retenue consiste à mailler en tétraèdres et à redécouper en hexaèdres, ce qui peut mener à des éléments très déformés par endroits (V-1). Le raffinement est contraint par la nécessité d'avoir un maillage en hexaèdres et conforme (V-2).

Efficacité

Cette méthode a été expressément construite pour pouvoir obtenir la condensation de masse. C'est d'ailleurs pour cela, que les maillages doivent être composés d'hexaèdres. La complexité de calcul s'en trouve améliorée, et le temps de calcul en général (VI). Sinon, elle partage avec les EF d'arête précédents les difficultés d'implémentation (VIII) et de parallélisation (VII), et la possibilité de coupler avec du structuré (IX).

Retour d'expérience

La méthode a été développée à l'ONERA, mais elle n'a pas été introduite dans un code PIC. Le retour d'expérience est donc limité. Notons que les auteurs ont bifurqué vers une version GD basée sur les mêmes ingrédients que cette méthode d'EF.

6.7 Méthode GD de Cohen-Ferrières

Robustesse-précision

Cette méthode, tout comme les autres méthodes GD et la méthode VF de Remaki, font partie des solveurs qui n'assurent pas de compatibilité géométrique particulière aux quantités discrétisées (I-1). En particulier, la vérification des contraintes de divergence est laissée à l'ordre d'erreur du schéma.

La convergence d'une norme de la divergence est d'ailleurs observée dans [99], norme définie par Cockburn *et al* [33]. Un des avantages des méthodes GD est la facilité de monter en ordre, puisqu'il suffit d'augmenter l'ordre de l'approximation polynômiale, localement pour chaque élément (I-2). La dispersion numérique est d'ordre $2p$ pour une approximation locale d'ordre p (I-3). La méthode n'est pas dissipative (I-4). Notons toutefois la possibilité de choisir des coefficients pour les termes de bords correspondant à des flux non centrés. Dans ce cas, la dispersion numérique est meilleure, d'ordre $2p + 2$, et la méthode est dissipative, d'ordre $2p + 1$.

Les analyses des méthodes d'EF destinées à prouver l'absence de modes parasites pour les EF d'arête ont été étendues aux méthodes GD [24]. Comme la version EF décrite précédemment, cette méthode GD fait partie de celles susceptibles de générer des modes parasites, mais encore une fois l'utilisation des quadratures numériques ne permet pas de conclure car la théorie n'inclut pas ces cas. En revanche, la courbe de dispersion (figure 13) n'est pas monotone. On peut donc s'attendre à la présence des modes parasites du deuxième type pour certaines applications (II-1). La présence de coin rentrant dans le domaine n'a pas d'implication particulière (II-2). Au contraire, les méthodes GD en général permettent plus facilement un raffinement local pour améliorer l'approximation de la singularité. Par ailleurs, il est possible d'envisager une base locale appropriée à la singularité pour les éléments en contact avec elle, puisque les approximations sont complètement locales au sein de chaque élément. L'effet Cerenkov numérique est réduit par l'utilisation aisée d'une méthode d'ordre élevé (II-3). La sensibilité au bruit PIC est comme la plupart des autres méthodes présente du fait de la conservation d'une énergie discrète et l'absence de dissipation numérique (II-4). La discontinuité des champs aux interfaces entre éléments participe également aux fluctuations lors du passage des particules à travers ces interfaces. Mais ce point est à relativiser car la discontinuité est faible, de l'ordre d'erreur de la méthode qui peut être un ordre élevé comme on l'a vu. Du coup, cette source de fluctuations est faible par rapport aux autres sources de fluctuations décrites dans la section 2.

Flexibilité

La souplesse d'utilisation des méthodes GD est un de leurs atouts. Ainsi, l'application de la méthode aux formulations 2D/3D/axi ne pose pas de problème (III-1), ni la présence de matériaux différents (III-2) ou la représentation des frontières (IV-1). La génération du maillage est en revanche conditionnée à une technique particulière comme pour les EF de Cohen-Monk: redécouper en hexaèdres un maillage généré initialement en tétraèdres (V-1). Le raffinement de maillage est en revanche facilité par l'aspect local des opérations dans GD (V-2).

Efficacité

Pour un ordre d'approximation donné, le nombre de degrés de liberté est plus grand que la méthode EF correspondante puisqu'aucune continuité n'est imposée entre les éléments. Il en résulte une complexité de calcul supérieure, mais le schéma en temps est explicite avec une matrice de masse diagonale par blocs (VI). Si les méthodes GD sont faciles à mettre en œuvre, cette méthode particulière est plus complexe à implémenter à cause notamment de la prise en compte de la déformation des éléments et les quadratures numériques de Gauss utilisées (VIII). Ces méthodes GD conviennent bien à la parallélisation (VII), et le couplage avec du structuré ne pose pas de problème (IX).

Retour d'expérience

Le retour d'expérience est faible (X). La méthode a été implémentée à l'ONERA, mais elle n'a pas été associée à un solveur PIC.

6.8 Méthode GD de Sonnendrücker

Robustesse-précision

Les contraintes de divergence ne sont pas imposées par la méthode. Celle-ci n'assurant pas de compatibilité géométrique comme la vérification de la relation (24), elles sont laissées à l'ordre d'erreur du schéma (I-1). Cela n'est pas trop gênant grâce à la possibilité de monter en ordre aisément (I-2). La dispersion numérique est améliorée également en montant en ordre (I-3). De plus, la méthode peut contenir de la dissipation numérique de façon contrôlée par le choix approprié d'un paramètre (I-4).

La théorie pour GD concernant les modes parasites indique l'absence de problèmes pour cette méthode GD dès lors que l'on utilise un terme de pénalisation sur les sauts tangentiels (II-1). Sans ce terme en revanche, on observe que la courbe de dispersion n'est pas monotone, indiquant la possibilité des modes parasites du second type (figure 14). Ce terme de pénalisation est également préconisé de façon générale pour obtenir des résultats d'approximation optimaux. Il est toutefois possible de se passer de ce terme de bord supplémentaire en faisant le choix d'une méthode dissipative (flux décentré): les modes parasites sont alors dissipés. Concernant l'absence de compatibilité

géométrique, conduisant à la présence éventuelle de modes parasites du premier type pour la méthode présentée ici (sans pénalisation), il se trouve qu'en 2D, le problème est évité, au contraire du 3D. Comme pour les modes parasites du premier type, l'ajout du terme de pénalisation ou le choix d'une méthode dissipative arrange les choses.

Comme indiqué pour la méthode GD précédente, la présence de coin rentrant peut être bien gérée grâce à la souplesse de la méthode concernant le raffinement de maillage (que ce soit en diminuant localement la taille de la maille ou en augmentant l'ordre d'approximation) et la possibilité de choisir une base permettant de capter la singularité exactement (sujet de recherche à long terme) (II-2). La courbe de dispersion a l'avantage d'approcher la courbe exacte par le dessus pour certaines directions et pour les plus grandes ondes; c'est justement la propriété requise pour éviter l'effet Cerenkov numérique. Cependant, dans sa forme actuelle (sans pénalisation), la courbe de dispersion n'est pas monotone; la méthode est donc forcément concernée par cet effet Cerenkov numérique, même si c'est pour les très courtes longueurs. Ce n'est plus le cas avec le terme de pénalisation puisqu'ainsi la théorie montre l'absence de modes parasites, ce qui implique une relation de dispersion monotone (II-3). La sensibilité au bruit PIC est réduite par la possibilité de choisir un schéma légèrement dissipatif pour atténuer les courtes longueurs d'onde (II-4).

Flexibilité

La flexibilité est très bonne pour cette méthode GD sur tétraèdres (III-1,III-2,IV-1,V-1,V-2). Eventuellement, la discontinuité inter-éléments autorise même les maillages non conformes ce qui peut faciliter le raffinement.

Efficacité

La complexité de calcul accrue des méthodes GD (VI) est compensée par l'adaptivité en raffinement (de maillage et d'ordre local d'approximation) et par une très bonne parallélisation, avec un gain supérieur à 90% (VII). L'implémentation, si elle n'est pas aussi simple que le schéma de Yee, est d'accès plutôt aisé pour une méthode d'ordre élevé (VIII). Le couplage avec du structuré est parfaitement autorisé (IX).

Retour d'expérience

Le retour d'expérience est limité, récent mais pas inexistant (X). En effet, l'application de ces méthodes GD pour systèmes hyperboliques est assez récente en électromagnétisme. Cependant, différentes équipes ont convergé vers cette solution ce qui souligne ses qualités d'évolution qui en font une méthode d'avenir dans la mesure où aucun obstacle majeur n'est apparu. Développée par Hesthaven pour Maxwell, puis associée à un solveur PIC avec Jacobs, à l'Université de Brown aux Etats-Unis, elle a été implémentée par l'équipe de S.Piperno à l'INRIA à la suite des travaux sur des méthodes de VF. Plus récemment, E.Sonnendrücker et M.Sesquès ont développé ce type de méthode pour les inclure dans des codes PIC. Les premiers résultats de toutes ces équipes sont très en-

courageants. En particulier, le point faible annoncé qu'est le temps de calcul est modéré par les avantages suivants: la matrice de masse est diagonale par blocs et donne lieu à un schéma explicite en temps; l'approximation peut être localement adaptée soit par raffinement du maillage, soit par augmentation de l'ordre du polynôme; la parallélisation est très efficace.

6.9 Méthode GD de Piperno

Robustesse-précision

Cette méthode est assez proche de la précédente et beaucoup de critères sont vérifiés de la même manière. Nous soulignons seulement les aspects qui sont différents. Construite sur le choix de bases locales à divergence nulle, la montée en ordre n'est pas aussi directe. La méthode est présentée pour les deux premiers ordres. A priori et suivant les travaux de Karakashian [10] et Cockburn [33], les bases pour les ordres élevés peuvent être aussi construites (I-2). Le choix d'un flux centré implique une dissipation numérique nulle contrairement à la méthode précédente (I-4,II-4). Le choix d'une base locale à divergence nulle n'implique pas la vérification des contraintes de divergence globalement, même en l'absence de charge. En particulier, c'est la discontinuité inter-éléments qui permet justement de prendre en compte $\text{div}\epsilon\mathbf{E} = \rho$, avec ρ non nul.

Flexibilité

La flexibilité est quasiment aussi bonne. Le choix de maillages en hexaèdres qui peuvent être non conformes assure une souplesse pour la génération et le raffinement similaire aux maillages en tétraèdres choisis précédemment. Une bonne représentation de la frontière du domaine nécessite en revanche de raffiner localement, pour limiter l'erreur liée à la représentation en marches d'escalier, comme pour le schéma de Yee (IV-1).

Efficacité

Ces bases locales permettent d'avoir moins de degrés de liberté pour un ordre donné, ce qui réduit la complexité de calcul (VI).

Retour d'expérience

Le retour d'expérience est faible (X). Développée par l'équipe de S.Piperno à l'INRIA, cette méthode constitue une variante de la précédente, qui peut s'avérer mieux appropriée pour certaines applications, par exemple sur un domaine "cartésien" et en l'absence de charge.

7 Conclusion

L'objectif final de ce rapport est le choix d'un solveur Maxwell afin de le coupler à une méthode PIC pour résoudre le système de Maxwell-Vlasov. Pour y parvenir, nous avons décrit les principales caractéristiques de la méthode PIC, ainsi que diverses possibilités d'évolution de cette méthode. Puis, nous avons présenté plusieurs méthodes de résolution des équations de Maxwell parmi les grandes familles de discrétisation spatiale que sont les méthodes de différences finies, les méthodes d'éléments finis, les méthodes de volumes finis et les méthodes Galerkin discontinues.

Après avoir décrit les critères choisis pour comparer qualitativement ces méthodes, nous avons discuté des avantages et inconvénients de chacune. Nous concluons à présent en mettant en avant simplement la (ou les) raison(s) principale(s) pour laquelle une méthode nous apparaît moins bonne dans le contexte qui nous intéresse. Ce contexte, en résumé, concerne la résolution des équations de Maxwell couplée à une méthode PIC dans des *géométries complexes et des situations pouvant être diverses*. Ainsi, la souplesse d'une méthode, que ce soit en termes de flexibilité ou de capacité d'évolution, est essentielle et nous l'avons prise en compte de manière prépondérante.

Notre revue de méthodes et de critères a confirmé la bonne réputation du schéma de Yee, lorsqu'il est utilisé dans de bonnes conditions. C'est en revanche l'exemple type d'une méthode peu souple, au sens que l'on vient d'évoquer. Au final, pour une géométrie complexe contenant des détails fins, elle peut devenir moins efficace tant il faut raffiner pour obtenir une précision acceptable.

La méthode VF de Hermeline améliore la flexibilité concernant la géométrie du domaine, mais on perd en flexibilité concernant le maillage. En particulier, celui-ci doit avoir la propriété d'être de Delaunay-Voronoi ce que l'on ne sait pas obtenir en général en 3D. Elle ne permet pas non plus de monter en ordre.

Les méthodes VF "classiques", telles que celles utilisées par Remaki, présentent de bonnes qualités de flexibilité, mais un des enjeux étant de pouvoir monter (arbitrairement) en ordre, il est préférable de les considérer comme des méthodes GD avec $p = 0$, et de choisir directement de travailler sur du GD.

L'application des EF nodaux aux équations de Maxwell pose un certain nombre de problèmes, et bien que la méthode d'Assous ait réussi à surmonter la plupart des difficultés au fur et à mesure, elle reste confrontée au problème des coins rentrants en 3D.

Finalement, et d'un point de vue général, deux familles de discrétisation rassemblent beaucoup de qualités en termes de montée en ordre et de souplesse qui sont les critères essentiels de notre choix: les EF d'arête et les méthodes GD. Cependant, les qualités de ces approximations sont différentes. Les EF d'arête sont compatibles avec les équations de Maxwell. Avec la possibilité récente de monter en ordre en gardant cette adéquation, on peut légitimement penser obtenir un très bon solveur de Maxwell avec ces éléments.

Cependant, dans un contexte Maxwell-Vlasov et pour un code de calcul aux applications complexes et variées, les inconvénients de ces EF sont déterminants: leur complexité, la difficulté à les implémenter, le problème de la matrice de masse non diagonale, un raffinement qui doit rester conforme (et progressif) et une parallélisation non optimale sont autant de points qui s'ajoutent pour conclure que le temps, de développement et de calcul, est un facteur limitatif.

Dans le cas particulier des EF de Cohen-Monk, le problème de la condensation de masse est résolu, mais la nécessité d'utiliser des maillages hexaédraux réduit la souplesse de la méthode.

En termes de facilité de montée en ordre, de flexibilité et de capacité d'évolution, les méthodes GD s'avèrent donc les mieux placées. On peut notamment faire le choix de la méthode de Sonnendrücker avec des bases nodales, construites à partir des polynômes de Lagrange, comme on le fait dans les codes d'EF nodaux, l'assemblage global des matrices en moins. De plus, le caractère local de ces méthodes GD facilite nettement l'implémentation, ainsi que les questions du raffinement et de la parallélisation, ce qui compense l'augmentation du nombre de degré de liberté (d'ailleurs, certains partisans de GD ne voient pas le nombre plus élevé de degré de liberté comme un défaut parce que, selon eux, tous sont utilisés pour approcher les équations, par opposition aux EF où une contrainte de continuité est implicitement imposée). L'absence de compatibilité géométrique ne mène pas forcément à des problèmes, comme les modes parasites. En effet, l'ajout d'un terme de pénalisation des sauts tangentiels (qui peut s'avérer quoiqu'il en soit nécessaire pour obtenir des résultats optimaux d'approximation) ou simplement l'utilisation d'un flux numérique produisant une méthode dissipative suffit à éviter ces ennuis de modes parasites. Une autre qualité de souplesse concerne une certaine liberté de choix des flux numériques aux interfaces des mailles et des bases locales d'approximation. Ainsi, on peut tout aussi bien choisir un flux centré et conserver une énergie électromagnétique discrète, que choisir d'avoir de la dissipation, que l'on pourrait ajuster en fonction des besoins. Le choix de la base est également possible. Par simplicité, on peut choisir une base nodale, comme indiqué précédemment, pour construire un code GD initial. On pourra alors toujours faire le choix de bases plus particulières, comme celle de la méthode de Ferrières ou celle à divergence nulle de Piperno, si celles-ci (ou d'autres) s'avèrent vraiment meilleures pour un compromis précision/efficacité.

En résumé, concernant la plateforme Brennus, nous préconisons le développement d'un code GD (sur le principe de la méthode de Sonnendrücker), favorisant les possibilités d'évolution futures qu'offre cette technique. Les évolutions et les choix (de base et de flux numérique) pourront notamment dépendre des applications particulières. Dans un premier temps, ces choix correspondraient simplement au choix du paramètre déterminant le flux numérique (entre les flux centrés et complètement décentrés), et de l'ordre du polynôme d'approximation. A moyen terme, des comparaisons avec d'autres choix de bases, voire d'autres flux empruntés aux VF, pourront être effectuées pour étendre les fonctionnalités de la plateforme et optimiser ses performances.

8 Annexe: les modes parasites

8.1 Introduction

Un préalable pour obtenir des simulations fiables de particules chargées est d’avoir un bon solveur Maxwell. Or, depuis la méthode de Yee [125] basée sur des différences finies, aucune méthode ne s’est vraiment autant imposée dès lors que l’on veut monter en ordre sur des géométries complexes. En particulier, la méthode des EF a progressé lentement, par opposition à son application dans d’autres champs disciplinaires, à cause de l’observation de solutions parasites longtemps restées mal identifiées. Cette annexe tente d’éclairer ce point, notamment grâce aux travaux d’équipes italiennes (Boffi and co, Caorsi and co) qui ont apporté une clarification mathématique à l’une des principales difficultés. Nous faisons également le lien avec des sujets connexes.

Le problème concerne la pollution du spectre de la solution discrète par des modes parasites, au sens de modes qui n’ont pas de signification physique.

La pollution du spectre discret correspond généralement à des valeurs propres supplémentaires qui s’intercalent parmi les fréquences physiques. Leur caractère non-physique apparaît car les modes propres associés ne vérifient pas une des lois physiques. La pollution peut également être due à une mauvaise multiplicité d’une fréquence physique dans le cas où une valeur propre parasite se superpose à une valeur physique (autrement dit, c’est le cas d’un mode numérique supplémentaire pour une fréquence physique). Par ailleurs, on peut dire aussi par extension que le spectre est pollué si certaines valeurs propres ou certains modes propres ne peuvent pas être approchés par le schéma numérique (dans ce cas, il est pollué par manque plutôt que par présence parasite).

Le problème sous-jacent est évidemment le système de Maxwell en régime harmonique, que nous discutons donc en premier. La section qui suit concerne l’implication des conclusions obtenues sur la résolution du problème d’évolution. Ensuite, et bien que le problème soit généralement associé aux méthodes d’EF, nous discutons cette question pour d’autres méthodes numériques qui sont également concernées, notamment les méthodes de GD. Enfin, nous en tirons les conséquences possibles pour le choix du solveur Maxwell au sein d’une résolution des équations de Maxwell-Vlasov.

8.2 Difficultés pour l’analyse de la discrétisation par méthode d’EF du problème aux valeurs propres: Maxwell harmonique

Le plan proposé pour y voir plus clair est le suivant. Tout d’abord, nous décrivons les modes parasites observés, sans tenter dans un premier temps d’apporter des éléments de réponse. Il ne s’agit pas non plus de faire une revue exhaustive de la littérature faisant état de tels modes parasites. Nous cherchons simplement à décrire les diverses formes qu’ils peuvent prendre. Puis, nous présentons directement la clarification proposée par Boffi *et al* [14]-[19], et Caorsi *et al* [27, 28] notamment, concernant le principal problème,

longtemps sujet à polémique. Nous poursuivons en discutant des problèmes connexes qui ont alimenté la confusion. Enfin, nous concluons cette section en résumant quelles sont les formulations possibles.

8.2.1 Modes parasites observés

Des références classiques faisant état de tels modes parasites sont les travaux de Cendes et Silvester [29] ou Davies *et al* [42]. D'autres références peuvent être trouvées dans [22, 113, 76].

Ceux qui approchent la fréquence nulle

Un premier type de fréquences parasites consiste en des fréquences numériques censées approcher la fréquence nulle. En effet, certaines formulations du problème continu admettent la fréquence nulle comme solution, mais pour laquelle il est possible d'avoir une mauvaise approximation. Lorsque c'est le cas, ces fréquences parasites montent dans le spectre, se confondant avec les vraies fréquences approchées.

Elles sont notamment observées lors de l'utilisation des EF nodaux (approximation polynomiale de Lagrange) sur des maillages non structurés (voir par exemple [18]).

Les autres

D'autres fréquences parasites ont été observées, qui semblent approcher une fréquence non nulle, mais qui n'existent pas dans le spectre discret. Eventuellement, cette fréquence non nulle se confond avec une fréquence physique, mais le mode propre associé est faux. Ce type de solutions parasites est particulièrement gênant car il n'y a pas un moyen simple de les distinguer des vraies fréquences.

On peut les obtenir avec des EF nodaux sur certains maillages particuliers [18]. Notons que l'équipe de D.Boffi a mis en évidence un exemple explicite de ces modes parasites, pour un problème mixte qui a le même type de difficultés que les équations de Maxwell [17].

Un troisième type de modes parasites relevés concerne les degrés de liberté supplémentaires dans une méthode d'EF d'ordre élevé. Ceux-ci sont de nature bien différente des précédents, et ne rentrent pas, a priori, dans la clarification qui va suivre (en tout cas, le lien n'est pas fait s'il existe). En revanche, ils sont peu gênants car ils correspondent à des modes propres, seulement excités à l'ordre d'erreur du schéma d'approximation [36, 88].

8.2.2 Clarification

Cette section est en partie la traduction de passages de l'article de Boffi *et al* [19] et de celui de Caorsi *et al* [27].

Considérons comme problème modèle une cavité résonante composée de matériaux homogènes éventuellement différents sans perte de charge et avec des frontières parfaitement conductrices. Le domaine Ω est supposé être un polyèdre borné et simplement connexe de vecteur normal \mathbf{n} . Nous considérons les champs électrique et magnétique respectivement sous la forme $Re(\mathbf{E} \exp j\omega t)$ et $Re(\mathbf{H} \exp j\omega t)$ avec $\omega \in \mathbb{R}$ la fréquence angulaire. Le problème de Maxwell s'écrit pour des permittivité électrique ϵ et perméabilité magnétique μ vérifiant des hypothèses appropriées:

$$\begin{aligned}
(i) \quad & \nabla \times \mathbf{E} = -j\omega\mu\mathbf{H} \quad \text{dans } \Omega, \\
(ii) \quad & \operatorname{div}(\epsilon\mathbf{E}) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\
(iii) \quad & \nabla \times \mathbf{H} = j\omega\epsilon\mathbf{E} \quad \text{dans } \Omega, \\
(iv) \quad & \operatorname{div}(\mu\mathbf{H}) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\
(v) \quad & \mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \delta\Omega, \\
(vi) \quad & \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \delta\Omega.
\end{aligned} \tag{78}$$

Donc, nous cherchons un triplet $(\omega, \mathbf{E}, \mathbf{H})$ tel que \mathbf{E} et \mathbf{H} ne s'annulent pas identiquement. Notons que la fréquence zéro, $\omega = 0$, n'est pas solution de ce problème. Il est classique de réduire le problème en éliminant un des deux champs. Par exemple, nous éliminons le champ magnétique et obtenons le problème aux valeurs propres équivalent:

$$\begin{aligned}
(i) \quad & \nabla \times (\mu^{-1}\nabla \times \mathbf{E}) = \omega^2\epsilon\mathbf{E} \quad \text{dans } \Omega, \\
(ii) \quad & \operatorname{div}(\epsilon\mathbf{E}) = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\
(iii) \quad & \mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \delta\Omega.
\end{aligned} \tag{79}$$

La formulation variationnelle de (79) consiste à trouver $\omega \in \mathbb{R}$ tel qu'il existe \mathbf{E} non nul dans l'espace $H_0(\mathbf{rot}; \Omega) \cap H(\operatorname{div}^0; \Omega; \epsilon)$ (c'est-à-dire les vecteurs de composantes dans $L^2(\Omega)$ dont le rotationnel est aussi dans L^2 avec la condition aux bords imposée, et qui vérifient la contrainte de divergence nulle) solution de

$$(\mu^{-1}\nabla \times \mathbf{E}, \nabla \times \mathbf{E}') = \omega^2(\epsilon\mathbf{E}, \mathbf{E}') \quad \forall \mathbf{E}' \in H_0(\mathbf{rot}; \Omega) \cap H(\operatorname{div}^0; \Omega; \epsilon). \tag{80}$$

Grâce au fait que la forme bilinéaire au membre de gauche est symétrique, continue, et coercive sur l'espace choisi et grâce à l'injection compacte de cet espace dans $[L^2(\Omega)]^3$, l'opérateur associé avec ce problème (80) est compact et auto-adjoint. Il s'ensuit que le problème admet un ensemble dénombrable de valeurs propres réelles positives et que chaque espace propre est de dimension finie. De plus, toutes les fonctions propres peuvent être choisies réelles, de sorte que toute l'analyse peut être effectuée avec des espaces réels. Nous observons que $\omega^2 = 0$ n'est toujours pas une valeur propre du problème (80).

Par ailleurs, nous constatons que pour $\omega^2 \neq 0$, l'équation (79ii) est une conséquence de (79i). On peut alors retirer la contrainte (79ii) et, de façon équivalente, chercher \mathbf{E} dans $H_0(\mathbf{rot}; \Omega)$ pour le problème (80). Cependant, de cette manière, $\omega^2 = 0$ est ajoutée au spectre de l'opérateur; l'espace propre correspondant est de dimension infinie et coïncide avec les champs à rotationnel nul, c'est-à-dire les champs de gradient. La compacité de

l'opérateur résolvant est perdue. De plus, ce nouvel espace propre n'a aucune signification physique. En revanche, les vecteurs propres correspondant aux fréquences non nulles restent les mêmes.

Dans une approximation par EF de (80), il y a pourtant deux bonnes raisons d'effectuer cette manipulation, et d'écarter a posteriori les modes de fréquence nulle. Tout d'abord, le traitement numérique de cette contrainte est difficile (voir Brezzi, Fortin notamment [23]); ensuite, même si on y parvient, la même approche ne s'étend pas aux problèmes stationnaires et d'évolution, rendant les comparaisons plus difficiles. Par conséquent, les approximations par EF de problèmes de cavité résonante sont très souvent basées sur le problème variationnel suivant: trouver $\omega \in \mathbb{R}$ tel qu'il existe \mathbf{E} non nul dans l'espace $H_0(\mathbf{rot}; \Omega)$ vérifiant

$$(\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{E}, \nabla \times \mathbf{E}') = \omega^2 (\epsilon \mathbf{E}, \mathbf{E}') \quad \forall \mathbf{E}' \in H_0(\mathbf{rot}; \Omega). \quad (81)$$

A ce point, nous n'avons fait que poser plus précisément le problème. Ceci dit, cela clarifie déjà la question. En effet, les difficultés trouvent leur origine dans la perte d'une propriété essentielle du problème initial, lors d'une simplification de la formulation. De façon évidente, une première difficulté réside dans une bonne approximation des modes propres associés à la fréquence nulle ajoutée. L'espace propre associé étant de dimension infinie, il n'est pas possible d'espérer le décrire entièrement. Peu importe puisqu'il n'a pas de signification physique: ce qu'il faut, c'est que les valeurs propres numériques qui approchent cette fréquence nulle le fassent suffisamment bien pour ne pas polluer le reste du spectre, c'est-à-dire qu'elles soient bien séparées pour pouvoir être écartées aisément de la solution. Comme indiqué plus haut, les EF nodaux ne fournissent pas de bons résultats (exceptés sur des maillages particuliers). A l'opposé, les EF d'arête se sont avérés bien se comporter pour cela.

Afin de pouvoir utiliser les EF nodaux, plus simples à mettre en œuvre, il a été proposé de les utiliser sur des maillages particuliers leur permettant de bien séparer les solutions correspondant à la fréquence nulle des autres solutions. Cependant, la perte de compacité a des implications plus fines, et d'autres problèmes peuvent apparaître. En tout cas, l'utilisation des EF ne peut plus s'appuyer sur la théorie classique pour les opérateurs compacts (voir [9] pour les problèmes aux valeurs propres). Et en effet, avec les EF nodaux utilisés sur des maillages particuliers permettant de bien approcher la fréquence nulle, des modes parasites semblant converger vers des fréquences non nulles (physiques ou pas) apparaissent. C'est là une conséquence insidieuse et fâcheuse qui rend l'exploitation de résultats obtenus avec de telles méthodes sujettes à caution. Afin d'obtenir une preuve de la convergence d'une méthode d'EF pour le problème aux valeurs propres (81), il a donc fallu définir précisément ce que l'on entendait par modes parasites et méthodes qui en soient dépourvues, puis trouver des conditions nécessaires et suffisantes pour être capable de dire qu'une méthode d'EF est dépourvue ou non de modes parasites.

Suivant la présentation de Caorsi *et al* dans [27], une approximation est spectralement correcte si elle vérifie les quatre conditions suivantes: toutes les valeurs propres doivent

pouvoir être approchées (complétude du spectre discret); il n’y a pas de valeur propre en plus des valeurs propres physiques et zéro pour un maillage assez fin (non pollution du spectre); tous les vecteurs propres doivent pouvoir être approchés (complétude des espaces propres); il n’y a pas de mode propre en plus des modes physiques pour un maillage assez fin (non pollution des espaces propres). Ce type de définition est général et concerne tout problème spectral que l’on cherche à discrétiser, et dont l’étude de la convergence pour les valeurs propres et les vecteurs propres est un problème évidemment plus difficile que la convergence du problème avec source. La théorie est connue dans le cas plus habituel où l’opérateur résolvant est compact [9]. Dans le cas où ce dernier n’est pas compact, la théorie a également été développée dans un cadre général par Descloux, Nassif et Rappaz [46, 47]. Malheureusement, cela n’a pas empêché la confusion de s’installer dans la communauté électromagnétique. Cette confusion est certainement née du double problème causée par la manipulation sur la formulation variationnelle, à savoir de bien approcher la fréquence nulle artificiellement ajoutée aux solutions du problème, et d’obtenir une approximation spectralement correcte qui dans le cas d’un opérateur résolvant non compact requiert plus de conditions.

En effet, cette définition d’une approximation spectralement correcte assure seulement, pour la formulation (81), que les seules solutions non-physiques possibles sont confinées dans un voisinage de zéro pour un maillage suffisamment fin. La seule manière de pouvoir écartier facilement ces fréquences qui peuvent avoir zéro comme point d’accumulation, est de demander qu’elles soient une approximation exacte de la fréquence nulle avec un vecteur propre exactement irrotationnel (il faut que la fréquence nulle soit un point isolé de l’union de tous les spectres discrets quelque soit la taille du maillage). Cette requête implique d’autres conditions pour la méthode de discrétisation.

Avec cette double nécessité d’avoir une approximation spectralement correcte, ainsi que l’isolement de la fréquence nulle dans le spectre discret, Caorsi *et al* ont été en mesure de donner des conditions nécessaires et suffisantes pour que la solution du problème (81) soit une bonne approximation du problème (79).

Historiquement et pratiquement, les difficultés à approcher la fréquence nulle ont été prépondérantes. Cela a conduit une partie de la communauté électromagnétique à penser qu’il suffisait d’isoler la fréquence nulle pour que la méthode d’EF soit bonne. Ainsi, la théorie la plus courante, avant toute cette clarification, consistait à s’assurer des deux conditions suivantes:

- tout vecteur de $H_0(\mathbf{rot})$ doit pouvoir être approché par une suite d’éléments de l’espace d’approximation;
- tout vecteur de $H_0(\mathbf{rot})$ à rotationnel nul (les champs de gradient) doit pouvoir être approché par une suite d’éléments à rotationnel nul de l’espace d’approximation. L’approximation d’un champ de gradient par une discrétisation sur un maillage doit être elle-même un champ de gradient sur ce maillage.

Ceci permet en effet de bien séparer les solutions non-physiques liées à la fréquence nulle

des vraies solutions, mais ça ne suffit pas à assurer une approximation spectrale correcte au sens rappelé ci-dessus. En fait, une troisième condition est nécessaire pour être assuré d’avoir une approximation spectrale correcte et sans mode parasite. Celle-ci a été introduite selon le point de vue de l’analyse de convergence des méthodes d’EF pour les problèmes aux valeurs propres. Cette condition supplémentaire, dite propriété de compacité discrète et introduite par Kikuchi [78], est le chaînon manquant, qui permet de récupérer la convergence forte des suites d’approximation à partir de la convergence faible, à l’instar du problème continu, ingrédient qui permet de compléter la théorie de convergence du problème spectral sans modes parasites.

Avec le développement de ces théories, il a ”suffi” de s’assurer que certains EF d’arêtes vérifiaient les différentes hypothèses, pour conclure à la convergence de la méthode d’EF associée. De même, des contre-exemples ont permis de confirmer le mauvais comportement des EF nodaux pour cette formulation.

Différentes preuves de convergence

L’analyse mathématique a donc pu trouver son épilogue et montrer rigoureusement pourquoi les EF d’arêtes fonctionnent bien. Finalement, plusieurs preuves de convergence existent (voir l’ouvrage de Monk notamment [86] pour des références) pour des méthodes ne donnant pas de modes parasites (dites “spurious-free”).

Suivant la discussion de Demkowicz dans [43], on peut résumer les développements sur ce sujet de la façon suivante: à cause de l’absence d’ellipticité, le problème n’est pas couvert par la théorie standard de la méthode des EF pour les équations elliptiques. A la fin des années 80, Kikuchi [78] a introduit la notion de compacité discrète qui s’avère une condition suffisante pour une analyse de convergence des valeurs propres de Maxwell. Plus récemment, Caorsi *et al* [27] ont démontré que, dans un certain sens, la compacité discrète n’était pas seulement suffisante mais aussi nécessaire pour assurer de bonnes propriétés de convergence. En retour, Boffi [14] a lié la compacité discrète avec la commutativité du diagramme de De Rham montrant, essentiellement, que les deux étaient équivalents. Le diagramme de De Rham pour les quantités

continues de l’électromagnétisme est
$$H^1 \xrightarrow{\text{grad}} H(\mathbf{rot}) \xrightarrow{\mathbf{rot}} H(\text{div}) \xrightarrow{\text{div}} L^2,$$
 qui signifie qu’un élément d’un des espaces est envoyé dans l’espace qui le suit par l’opérateur différentiel, et que le noyau de l’opérateur correspond exactement avec l’espace qui précède. Par exemple, le rotationnel d’un élément de $H(\mathbf{rot})$, comme le champ électrique, est un élément de $H(\text{div})$, comme le champ magnétique (ce qui correspond bien aux équations de Maxwell). L’équivalent discret de ce diagramme doit être vérifié, ce que réalisent les EF de Nédélec X et de Raviart-Thomas Y qui font partie de la séquence
$$Q \xrightarrow{\text{grad}_h} X \xrightarrow{\mathbf{rot}_h} Y \xrightarrow{\text{div}_h} P$$
 où P et Q sont les espaces d’approximation classiques pour L^2 et H^1 . Dire que les diagrammes continu et discret doivent commuter signifie qu’à chaque niveau de la séquence, on doit avoir l’égalité si, à un élément d’un des espaces continus, on applique successivement l’opérateur différentiel

puis la projection sur l'espace d'approximation, ou si on projette d'abord et que l'on applique ensuite l'opérateur différentiel discret. Par exemple, en notant π_{rot} et π_{div} les opérateurs de projections de $H(\mathbf{rot})$ dans X et de $H(\text{div})$ dans Y , on veut que pour tout élément \mathbf{u} de $H(\mathbf{rot})$, on ait $\mathbf{rot}_h(\pi_{rot}(\mathbf{u})) = \pi_{div}(\mathbf{rot}(\mathbf{u}))$.

Ces considérations mathématiques restent assez abstraites, même sans rentrer dans les détails, et ne permettent pas forcément d'établir un lien concret avec l'utilisation pratique des méthodes. Dans les sous-sections suivantes, on passe en revue des arguments divers qui ont été proposés au cours du temps pour ces modes parasites. Cela nous permet de faire le point sur les croyances communes et d'apporter des éléments de réponse plus pragmatiques que précédemment.

8.2.3 Autres explications de l'origine des modes parasites

Au cours des premières tentatives d'utiliser une méthode d'EF, plusieurs explications ont été avancées pour tenter de clarifier ce problème des modes parasites. Nous discutons des plus communes d'entre elles. Certaines sont clairement fausses, d'autres sont pertinentes mais ne concernent qu'un seul type de modes parasites.

Argument 1 : la méthode mime certaines propriétés de l'algèbre vectorielle

A l'instar de la méthode de DF de Yee [125], il a été naturel de penser que choisir des EF vérifiant certaines propriétés géométriques vérifiées dans le cas continu suffirait à obtenir une bonne approximation. En particulier, les modes parasites approchant la fréquence nulle ont été repérés car ils étaient à divergence non nulle pour des problèmes sans charges, assurant donc leur caractère non-physique.

D'après [19], une croyance commune, maintenant reconnue comme fausse, était que les EF d'arêtes sont bons parce qu'ils forcent implicitement la contrainte de divergence nulle. Ce fait est notamment discuté et réfuté dans [113]. Cette croyance trouve son origine dans le travail original de Konrad [79] qui a spéculé que les modes parasites étaient causés par le fait de ne pas imposer explicitement le caractère solénoïdal (ie à divergence nulle) du flux (électrique pour la formulation présentée ci-dessus). Certains chercheurs ont alors cherché des éléments finis imposant cette non divergence du flux [61, 122, 98]. En fait, comme expliqué précédemment, l'équation habituellement utilisée (79i) implique que soit la fréquence est nulle, soit le flux est à divergence nulle, c'est-à-dire les solutions de (79i) sont statiques ou bien ont un flux solénoïdal. Donc, la contrainte de divergence nulle est, par construction, inscrite dans cette équation (79i), pour toutes les solutions sauf les solutions statiques. Sun *et al* [113] en concluent que la source des modes parasites doit être plutôt cherchée du côté des solutions statiques.

Pour contredire définitivement cet argument 1, Sun *et al* s'appuient finalement sur le fait que des EF d'ordre élevé ont été construits. Ceux-ci n'ont pas donné lieu à des modes parasites, tout en n'étant pas à divergence nulle. En fait, même l'EF d'arête de plus

bas ordre, dont les degrés de liberté sont constitués des composantes tangentielles sur les arêtes, est à divergence nulle à l'intérieur de chaque élément, mais l'approximation globale n'est pas à divergence nulle (c'est d'ailleurs ce qui permet de considérer la loi de Gauss avec charge non nulle).

Si cette explication n'était donc pas satisfaisante, un courant de pensée plus général lui est lié. En effet, les équations de Maxwell ont des propriétés géométriques dont certains pensent qu'elles doivent être exactement respectées au niveau discret. Pour d'autres, il n'est pas indispensable qu'elles le soient exactement, du moment qu'elles le sont de manière approchée, de l'ordre d'erreur du schéma d'approximation. En particulier, il se trouve que les EF d'arête ont justement de bonnes propriétés de ce point de vue. C'est sans doute ce qui leur permet de réaliser les conditions suffisantes à une bonne approximation des problèmes de Maxwell harmonique ou transitoire. Mais cela n'est pas nécessaire a priori et d'autres types d'EF peuvent convenir.

Argument 2 : la méthode doit fournir une bonne approximation des champs de gradient

Cette idée de bonne approximation d'un point de vue "géométrique" n'est pas anodine. En effet, par exemple pour le schéma de Yee, l'approximation des dérivées est telle que l'approximation du rotationnel de \mathbf{E} correspond à la grille de \mathbf{H} . C'est également le type de propriétés que l'on a pour les extensions de schémas de DF à des ordres plus élevés, ou des schémas de VF (voir VF de Hermeline). Dans la même logique, les EF d'arête reproduisent au niveau discret le comportement des champs continus (diagramme de De Rham). Enfin, une certaine compatibilité géométrique, c'est ce que l'on obtient à un degré moindre pour les EF nodaux sur des maillages ayant une structure particulière impliquant cette ressemblance géométrique avec les champs continus. Une conséquence particulière de ce type de propriété des schémas discrets est justement la bonne approximation des champs de gradient, bonne au sens où ces champs de gradient correspondent à une bonne séparation des solutions à rotationnel nul et des solutions à divergence nulle.

Par conséquent, on voit qu'un des enjeux d'une approximation ayant une certaine compatibilité géométrique avec les champs continus est d'éviter les modes parasites du premier type, ceux approchant mal la fréquence nulle. On s'aperçoit aussi que l'on peut distinguer des degrés différents de compatibilité. Un des avantages des EF d'arête est donc leur très grande compatibilité avec les équations de Maxwell.

En revanche, cela n'assure pas que l'approximation soit "spectralement correcte", tel que défini plus haut. En particulier, cela n'empêche pas l'apparition de modes parasites du deuxième type.

Argument 3 : la méthode est basée sur une bonne formulation, qui tient compte des contraintes de divergence

En marge de ceux qui pensaient que la source du problème était d'ordre numérique, il y

avait ceux pour qui seule la formulation pouvait éviter l’obtention de modes parasites. Tel que nous l’avons présenté précédemment, il est clair que la première origine de la difficulté est la simplification de la formulation qui permet d’éviter d’imposer la contrainte de divergence nulle.

C’est le point de vue défendu par Jiang *et al* [76]. Ces derniers montrent en effet que les équations de Maxwell, avec les conditions de compatibilité (contraintes sur la divergence) et des conditions aux limites appropriées, forment un système bien déterminé, elliptique en espace. Bien que le système puisse sembler sur-déterminé ayant plus d’équations que d’inconnues, ils montrent que les contraintes de divergence nulle ne sont pas redondantes avec les lois de Faraday et d’Ampère, et ils dérivent une formulation au second ordre qui tient bien compte de ces contraintes.

En fait, il est clair que la formulation choisie est une clé du problème spécifique des modes parasites pour les équations de Maxwell. Mais pas seulement: l’apparition d’ondes parasites est aussi un problème numérique, non forcément lié à ces équations particulières, comme nous allons le discuter dans le paragraphe suivant.

Argument 4 : seule la discrétisation choisie est responsable des modes parasites

Une autre croyance était que la source des modes parasites était uniquement numérique. On a vu que cela n’était pas tout à fait vrai: une source de modes parasites (ceux du premier type) provient de la mauvaise approximation des solutions (champs de gradient) associées à la fréquence nulle; or, ces solutions font bien partie des solutions du fait de l’oubli volontaire des contraintes de divergence. On peut donc éviter ces modes parasites en n’effectuant pas cette simplification de la formulation, et en tenant compte explicitement des contraintes de divergence.

En revanche, les modes parasites du deuxième type sont effectivement d’origine numérique. De façon générale, lorsqu’une approximation n’est pas spectralement correcte, elle est susceptible de fournir des modes numériques en plus de ceux approchant les modes physiques (ou d’en manquer). On rappelle que la théorie de l’approximation des problèmes aux valeurs propres par les EF est présentée dans [9, 46, 47].

L’exemple typique de tels modes parasites est celui des ondes de courte longueur d’onde et basse fréquence. L’observation de la relation de dispersion du schéma est un point de vue plus pragmatique que la théorie, qui va nous permettre de mieux comprendre ces modes parasites. Ils apparaissent notamment lorsque la relation de dispersion du schéma n’est pas monotone, alors que la relation exacte est monotone [119, 83]. Considérons par exemple l’équation d’advection $\partial_t u + c\partial_x u = 0$. Sa relation de dispersion est monotone $\omega = ck$. Si on discrétise en espace par des DF centrées sur un maillage de pas h , on obtient la relation $\omega(k_h) = c \sin(kh)/h$. Quand $h \rightarrow 0$, toute fréquence peut être approchée. En revanche, on remarque qu’à une basse fréquence donnée correspond deux nombres d’onde différents pour $kh \in [0; \pi]$, l’intervalle (positif) résolu par le maillage (Figure 15).

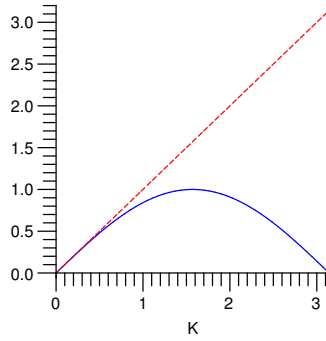


FIG. 15 – Relation de dispersion $\frac{\omega h}{c}$ en fonction de $K = kh$ pour l'équation d'advection résolue par des DF centrées. En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé.

Le premier correspond à l'approximation de la solution physique, le second à une onde parasite de courte longueur d'onde et de basse fréquence. Par exemple, quelque soit h , la fréquence $\omega = 0$ correspond toujours aux modes propres de nombre d'onde $k = 0$ et $kh = \pi$ (ie de longueur d'onde $\lambda = 2h$).

Il est connu que l'erreur de dispersion due au schéma discret peut générer des ondes parasites [117]. On parle de pollution spectrale ou d'effet de pollution de la relation de dispersion [71]. Dans un milieu dispersif, les ondes courtes ne se propagent pas à la bonne vitesse, et éventuellement pas dans le bon sens! En effet, un milieu est dispersif lorsque la vitesse de phase des ondes dépend de la longueur d'onde. Cependant, les ondes se propagent sous la forme de paquets d'ondes qui vont à la vitesse de groupe $c_g = \partial\omega/\partial k$, qui est la vitesse de propagation de l'énergie. Pour une relation de dispersion non monotone associée à un schéma discret, la vitesse de groupe des modes parasites est négative. Donc, ces ondes parasites de courte longueur et de basse fréquence se caractérisent par le fait qu'elles se propagent dans la direction opposée aux ondes physiques. Tout cela a été développé par Vichnevetsky dans les années 70-80 [119].

Lorsque l'on cherche les fréquences et modes propres d'un problème harmonique, une relation de dispersion non monotone peut conduire à l'apparition de modes supplémentaires. Ces modes parasites du deuxième type sont donc un phénomène intrinsèque à la méthode numérique utilisée pour un problème continu donné.

8.2.4 Sujets connexes

Les EF d'ordre élevé

Un troisième type de modes parasites apparaît lorsque l'on utilise des EF d'ordre élevé. En effet, lorsque l'on augmente le nombre de degrés de liberté pour un noeud du maillage, l'analyse en ondes planes pour un maillage régulier conduit, pour chacun de ces degrés

de liberté, à une branche différente de la relation de dispersion [83, 36]. Ainsi, des EF quadratiques ont deux degrés de liberté par maille. Ils ont donc deux branches $\omega_1(k)$ et $\omega_2(k)$ sur l'intervalle (positif) $kh \in [0; \pi]$. La solution du problème discret correspondant à une telle relation de dispersion est la somme de deux contributions correspondant à chacune des branches. Dans [36], les contributions respectives ont été estimées, dans le contexte de l'approximation de l'équation des ondes 1D par des EF de Lagrange avec condensation de masse. Ils ont montré que la seconde branche correspondait à des valeurs propres parasites, qui sont en h^{-2} , donc tendent vers l'infini quand on réduit la taille h de la maille. De plus, l'amplitude de ces modes s'avèrent du même ordre de grandeur que celui de l'erreur du schéma. Donc, seule une branche contribue réellement à la solution.

Cependant, nous n'avons là qu'une vision limitée de ce qui se passe. Pour aller plus loin, regardons justement la relation de dispersion pour la méthode étudiée dans [36] pour l'équation des ondes en 1D. Elle s'écrit sous la forme générale et implicite suivante

$$\cos(kh) = \frac{\left(\frac{\omega h}{c}\right)^4 - 22\left(\frac{\omega h}{c}\right)^2 + 48}{2\left(\frac{\omega h}{c}\right)^2 + 48}. \quad (82)$$

Les diverses branches solutions de cette équation en $(\omega h/c, kh)$, périodique en kh de période 2π , sont présentées à la figure 16 sur une période $kh \in [0; 2\pi]$. La relation de dispersion exacte pour l'équation des ondes est $\omega^2 = c^2 k^2$. Elle est constituée de deux branches correspondant aux ondes se propageant aux vitesses c et $-c$. La relation de dispersion est périodique en kh , mais le maillage restreint l'intervalle de nombres d'onde résolu par le schéma. Pour les EF quadratiques en question, l'intervalle résolu est $kh \in [0; 2\pi]$, et pas seulement $kh \in [0; \pi]$. Le raisonnement dans [36] s'appuie sur des asymptotiques $kh \rightarrow 0$, donc il ne concerne que les branches de l'intervalle $[0; \pi]$. En fait, si on cherche les contributions respectives des deux branches positives de l'intervalle $[\pi; 2\pi]$, on trouve que la branche supérieure (celle qui suit la branche exacte) est celle qui contribue le plus à la solution. Toutefois, pour $kh \approx \pi$ notamment, la contribution du terme correspondant à la branche parasite n'est plus négligeable.

En résumé, les branches excitées sont bien celles qui approchent, plus ou moins bien, la courbe exacte $\omega = ck$. Les deux autres branches correspondent à des ondes parasites de faible amplitude, notamment pour kh petit. L'utilisation des EF d'ordre élevé permet donc bien de réduire l'erreur de dispersion dans la limite des grandes longueurs d'onde, tout en résolvant des ondes plus courtes (inférieures à $2h$).

Ces conclusions corroborent celles de Thompson et Pinsky [116] et Mulder [88]. Toutefois, leurs études ne soulignent pas l'existence des branches parasites. Comme pour notre exemple, ils trouvent des relations de dispersion ayant une discontinuité en $kh = \pi$. Cette discontinuité correspond en fait à des solutions de la relation de dispersion avec k complexe [116]. Cela signifie que pour les fréquences ω situées dans cet intervalle, les modes propres associés ne sont pas purement propagatifs, mais sont atténués spatialement sur le maillage. C'est le même phénomène que pour les fréquences qui sont au-dessus des deux courbes: ces fréquences ne peuvent être résolues par le maillage qui

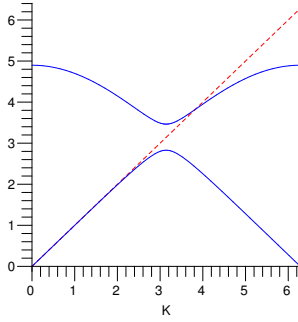


FIG. 16 – Relation de dispersion $\frac{\omega h}{c}$ en fonction de $K = kh$ pour l'équation des ondes 1D résolue par la méthode des EF ($p = 2$) avec condensation de masse. En rouge (trait pointillé): problème continu; en bleu (trait plein): problème discrétisé. Par symétrie et périodicité, on retrouve l'ensemble des branches à partir de celles-ci.

a un nombre d'onde de coupure à $k_c h = 2\pi$ pour notre exemple. Donc, les ondes de très hautes fréquences ne se propagent pas sur le maillage car elles correspondent à un nombre d'onde complexe $k = 2\pi + i\text{Im}(k)$. Comme $\text{Im}(k) < 0$, ces solutions sont dissipées spatialement. Ce phénomène a également été étudié par Vichnevetsky [119]. Les méthodes d'EF d'ordre élevé ont donc la propriété d'avoir des "trous" (stopping bands) parmi les fréquences résolues, lesquelles correspondent à des solutions dissipées spatialement (notons que ce sont des ondes de longueur de l'ordre de la taille de la maille, $2h$ dans notre exemple).

Concernant l'existence des branches de modes parasites, il semble qu'elle n'empêche pas les théories évoquées précédemment de s'appliquer. En particulier, les EF d'arête d'ordre élevé ont aussi de telles branches supplémentaires dans leur relation de dispersion. Pourtant, des preuves que certains EF d'arête sont des approximations spectralement correctes avec l'isolement de la fréquence nulle sont établies. Cela est certainement dû au fait que ces théories fournissent des résultats dans la limite $h \rightarrow 0$.

Les coins rentrants

Au cours du temps, une autre difficulté est venu occulter le problème des modes parasites, tout en alimentant une certaine confusion. En effet, la résolution des équations de Maxwell sur un domaine avec coins rentrants peut mener à une convergence lente ... vers une mauvaise solution! La présence d'un coin génère un champ électromagnétique localement intense lié à la singularité géométrique. Un des avantages des EF d'arête est qu'ils permettent, moyennant des techniques de raffinement de maillage appropriées, de représenter cette singularité et d'atteindre des erreurs d'approximation raisonnables. Au contraire, l'utilisation d'une approximation continue par EF nodaux (conformes dans H^1) ne convient pas: l'espace fonctionnel sur lequel est basé l'approximation n'est pas dense dans l'espace $H_0(\mathbf{rot}; \Omega) \cap H(\text{div}; \Omega; \epsilon)$ dans lequel on cherche le champ électrique, mais dense dans H^1 . Au contraire même, la partie manquante

est de dimension infinie. En l'absence de coins rentrants, il n'y a pas de problème car $H_0(\mathbf{rot}; \Omega) \cap H(\text{div}; \Omega; \epsilon) = H^1$.

Pour remédier à cela, plusieurs méthodes ont été proposées, discutées notamment dans l'article récent de Ciarlet [30]. La première consiste à garder cette formulation mais en utilisant la méthode du complément singulier [5, 20]. Une autre idée consiste à chercher des espaces fonctionnels pour lequel on retrouve la densité de l'espace d'approximation dans l'espace des solutions. En particulier, Costabel et Dauge [39] ont introduit des espaces à poids ayant des bonnes propriétés qui permettent d'obtenir une approximation convergente en utilisant les EF nodaux.

8.2.5 Conclusion

Le problème spectral de Maxwell est obtenu lorsque l'on cherche les fréquences et modes propres d'une cavité où les champs électrique et magnétique sont supposés harmoniques en temps. La difficulté à satisfaire les contraintes de divergence du système de Maxwell a conduit la plupart des gens à opter pour une formulation "réduite" semblant bien appropriée pour obtenir une formulation variationnelle en vue d'une résolution par EF.

En effet, en tenant compte de conditions de compatibilité des conditions initiales, des conditions aux limites et des termes sources, on peut dériver une équation au second ordre, en éliminant un des deux champs, qui peut se passer de la contrainte de divergence que doit vérifier le champ inconnu. Malheureusement, retirer cette équation a deux conséquences: un ensemble infini de solutions, correspondant à la fréquence zéro et des modes propres associés qui sont des champs de gradient, est ajouté aux solutions du problème spectral; de plus, l'opérateur résolvant n'est plus compact.

Malgré cela, si on veut utiliser cette formulation "réduite", il est indispensable de bien approcher les champs de gradient. "Bien approcher les champs de gradient" signifie qu'il faut que la méthode ne donne, comme approximation du couple 'fréquence nulle/champ de gradient', que des solutions qui soient exactement à fréquence nulle. Dans le cas contraire, les fréquences obtenues approchent plus ou moins bien zéro, et par un mécanisme de résonance, polluent le spectre entier, de sorte qu'il n'est pas possible de distinguer facilement les fréquences physiques parmi le nuage d'approximations de la fréquence zéro.

Il existe des méthodes d'EF qui ont cette propriété. C'est le cas de la plupart des EF d'arête, par opposition aux EF nodaux classiques qui, eux, fournissent un exemple typique qui ne fonctionne pas. Plus précisément, le bon comportement des EF d'arête pour des triangles en 2D et des tétraèdres en 3D a pu être confirmé (pour les 2 familles d'éléments de Nédélec). Pour les quadrangles en revanche, seule la première famille d'éléments de Nédélec a pu mener à une preuve de la convergence. Des contre-exemples ont pu être construits pour la seconde famille d'éléments de Nédélec sur quadrangles [49]. Un autre moyen d'obtenir cette bonne approximation consiste à utiliser les EF no-

daux sur des maillages particuliers qui permette d'assurer la compatibilité géométrique requise (toutefois, ces éléments ont d'autres problèmes: les modes parasites du deuxième type et les coins rentrants).

Une autre solution consiste à ne pas utiliser cette manipulation réduisant la formulation et à prendre en compte par un moyen ou par un autre les contraintes de divergence. On peut par exemple intégrer ces contraintes dans l'espace d'approximation, mais la construction d'EF conformes dans un tel espace est difficile. Une deuxième idée consiste à pénaliser la formulation variationnelle par un terme symétrique incluant la divergence du champ. Toutefois, les fréquences parasites ne disparaissent pas, elles sont simplement translatées dans le spectre. Un paramètre devant ce terme de pénalisation peut donc être choisi assez grand (typiquement en h^{-1}) pour faire sortir les fréquences parasites hors du spectre résolu par la discrétisation. Mais ceci se paie au prix d'une réduction de la précision si le paramètre est trop grand. Une troisième possibilité enfin consiste à imposer la contrainte de divergence en tant que deuxième équation reliée à la première par un multiplicateur de Lagrange (méthode EF d'Assous). Ces formulations permettent d'employer les EF nodaux pour leur résolution, en évitant les modes parasites du premier type.

Malheureusement, deux autres difficultés sont encore possibles, alors que l'on a bien pris en compte les contraintes de divergence. La première apparaît lorsque le domaine a des coins rentrants. En effet, dans ce cas, les EF nodaux ne suffisent pas à décrire l'espace des solutions, et peuvent converger vers un champ qui n'est pas solution du problème.

La deuxième est la possibilité d'avoir un schéma numérique qui résout si mal les courtes longueurs d'onde, que la courbe de la relation de dispersion n'est pas monotone. Il en résulte qu'aux basses fréquences correspondent deux nombres d'onde dont le second est une onde parasite de courte longueur d'onde. Il se trouve que les EF d'arête sur tétraèdres connus n'ont pas ce problème. En revanche, les EF nodaux pour la formulation "réduite" sur un maillage particulier conduisent à de telles ondes parasites.

Il faut noter enfin que les études de dispersion concernent des maillages réguliers et que les preuves de méthodes "spectralement correctes et sans modes parasites" supposent des intégrations exactes pour assembler les matrices de masse et de rigidité. Ainsi, des EF d'arête de la première famille de Nédelec sur des hexaèdres peuvent fournir des conclusions différentes, comme on le voit dans la thèse [49]: en 3D et sur maillage non régulier, la méthode présentée dans cette référence fait état de modes parasites lorsque des points de Gauss sont utilisés pour effectuer les intégrations numériques; ces modes parasites disparaissent lorsque les points de Gauss-Lobatto sont choisis. De la même manière que des EF d'arête de la deuxième famille de Nédelec sur des hexaèdres peuvent s'avérer sans parasites grâce à l'utilisation de l'intégration numérique (voir méthode de Cohen-Monk), l'inverse est possible et une méthode que la théorie prédit sans parasites peut en avoir avec des intégrations numériques: une telle modification du schéma change la relation de dispersion et il faut vérifier qu'elle reste monotone.

En conclusion, s'il est difficile de s'assurer de l'absence de modes et d'ondes parasites dans une simulation réaliste sur un maillage quelconque, il est nécessaire d'être conscient de leurs sources diverses. De plus, il est possible de le savoir au moins pour des conditions et hypothèses d'utilisation d'une méthode donnée (grâce aux théories développées d'une part et à la relation de dispersion d'autre part). Si la méthode est bonne pour ces conditions, le meilleur moyen est alors d'effectuer des tests numériques pour les conditions plus générales, notamment de maillage, avec lesquelles on souhaite utiliser cette méthode.

8.3 Pour le problème de Maxwell dépendant du temps

De façon générale, on conçoit bien que si on utilise un schéma qui présente des modes parasites pour le problème spectral, il existe des données (initiales et aux bords) particulières qui peuvent exciter ces modes parasites dans le problème d'évolution.

Notons tout d'abord et c'est une des raisons qui a surpris les chercheurs est qu'une approximation par EF pour un problème source (stationnaire) peut être convergente, mais pas forcément pour le problème aux valeurs propres correspondant [17] (d'où le développement de théories spécifiques pour les problèmes aux valeurs propres [9, 46, 47]).

Caorsi *et al* [28] ont établi le lien entre le problème aux valeurs propres et le problème harmonique correspondant, obtenu en imposant une dépendance en temps en $\exp(\pm i\omega t)$ (pour la formulation au second ordre susceptible de poser des soucis comme expliqué plus haut). Leur conclusion est la suivante: "pour approcher correctement un problème harmonique, une méthode d'EF doit être telle que, quand elle est appliquée au problème spectral correspondant, elle confine les modes parasites à la fréquence nulle mais ne les élimine pas." En effet, pour la formulation en question, si l'espace d'approximation exclut les modes de fréquence nulle, il ne remplit pas l'espace dans lequel on cherche le champ électrique $H_0(\mathbf{rot})$, quand la taille du maillage tend vers zéro. Or, comme indiqué dans [19], les solutions des problèmes harmoniques ne sont pas nécessairement à divergence nulle et peuvent avoir des composantes dans les champs à rotationnel nul, et donc les modes correspondant à la fréquence zéro sont requis pour les représenter, en général, bien qu'ils soient sans signification physique par eux-mêmes. De ce point de vue, il faut donc bien que l'espace des champs de gradient soit parfaitement approché plutôt que complètement exclu.

Récemment, Boffi *et al* [15] ont entrepris l'étude de convergence du problème temporel en s'appuyant sur leurs travaux concernant le problème spectral. Ils parviennent à obtenir la preuve de la convergence pour une semi-discrétisation spatiale, sous le même type d'hypothèses que pour le problème aux valeurs propres. De plus, ils produisent des exemples numériques démontrant la nécessité de ces hypothèses. En particulier, l'utilisation d'EF nodaux sur un maillage particulier donne lieu comme prévu à des ondes parasites de courte longueur d'onde et basse fréquence. Nous notons par ailleurs la preuve de convergence d'une discrétisation complète des équations de Maxwell temporelles par Ciarlet et Zou [31] (schéma implicite 'backward' en temps et éléments d'arête

en espace), qui use implicitement des mêmes théories.

Concernant les ondes parasites dûes à une relation de dispersion non monotone (deuxième type de modes parasites), elles sont présentes dans la solution d'évolution si la condition initiale a un spectre de Fourier qui excite par exemple tous les nombres d'onde résolus par le maillage. Au bout d'un temps assez long, la séparation naturelle des différentes ondes dûes à la dispersion va les mettre en évidence, ces ondes parasites se propageant en sens contraire. Vichnevetsky [119], décrit comment ces ondes apparaissent sur des exemples, notamment comme des réflexions parasites au passage d'une discontinuité (du maillage par exemple).

En revanche, les ondes non purement propagatives correspondant à un nombre d'onde complexe (fréquences au-delà de la fréquence de coupure ou dans les "stopping bands" pour les EF d'ordre élevé) ne peuvent pas être mises en évidence seulement à partir de l'évolution d'une condition initiale. Pour qu'elles apparaissent, il faut que le problème physique excite une fréquence temporelle donnée, par exemple par une condition aux limites ou une source. C'est ce qui se passe notamment à une discontinuité de maillage sur laquelle arrive une onde incidente. Si cette onde a une fréquence correspondant à un nombre d'onde complexe pour le nouveau maillage (en général on passe d'un maillage fin à un maillage plus grossier), alors l'onde transmise ne peut se propager et est dissipée spatialement sur quelques mailles [119]. Ce phénomène est relativement connu pour les très hautes fréquences qui ne peuvent pas être résolues par un maillage. En fait, ce phénomène peut également se produire pour les EF d'ordre élevé, et il est plus étonnant: en effet, dans ce cas, on peut avoir une onde arrivant avec une fréquence ω_1 dans une "stopping band"; elle ne se propage pas sur le nouveau maillage; mais une onde avec une fréquence $\omega_2 > \omega_1$ peut être en dehors de la "stopping band" tout en étant résolue sur le nouveau maillage grâce à l'utilisation d'une approximation d'ordre élevé; celle-ci va alors bien se propager à travers la discontinuité (voir figure 16 de l'exemple d'EF quadratiques discuté plus haut, ω_2 correspondrait à la plus haute branche de l'intervalle $[\pi; 2\pi]$). Bien sûr, il faut relativiser l'importance de ces effets numériques dans la mesure où ils ne concernent des ondes de longueur d'onde $\approx h$. Cela soulève cependant des interrogations concernant l'effet d'un maillage non uniforme sur la propagation des ondes.

8.4 Les autres méthodes de discrétisation

Les discussions précédentes ont donc fait ressortir 4 types d'artefacts numériques, dont vraiment deux modes parasites: les mauvaises approximations de la fréquence zéro (modes parasites de type 1); les ondes parasites de courte longueur d'onde à basse fréquence (modes parasites de type 2); les branches parasites pour les EF d'ordre élevé; les ondes spatialement dissipées (ayant un nombre d'onde complexe), au-delà du plus grand nombre d'onde que peut résoudre le maillage pour toute approximation, et dans des intervalles de fréquence appelées "stopping bands" pour les approximations d'ordre élevé.

Le premier type semble rattaché à la méthode des EF et la formulation variationnelle

utilisée. Cependant, un point de vue plus général présenté précédemment a permis de relier ce problème à un certain degré de compatibilité géométrique requis pour bien approcher le système de Maxwell. C'est une notion que l'on retrouve bien entendu pour les autres méthodes, notamment les différences et les volumes finis. Ainsi, des méthodes ont été construites, comme le schéma de Yee, à l'aide de grilles décalées ou de maillages duaux, de sorte à ce que les champs discrets vérifient les contraintes de divergence.

Suivant le raisonnement de Jiang *et al* [76], les contraintes de divergence ne sont pas redondantes. Donc, à partir du moment où elles ne sont pas prises en compte, toute méthode est susceptible d'être concernée par les modes parasites. Des références sont données dans [76].

Le deuxième type de fréquences parasites est indépendant de ces contraintes de divergence. Toute méthode numérique est concernée et la possibilité d'avoir des ondes parasites est liée à une mauvaise résolution des courtes longueurs d'onde (de l'ordre de la maille), par exemple lorsque la relation de dispersion du problème discrétisé n'est pas monotone.

Examinons le cas des méthodes GD. A priori elles sont susceptibles d'être confrontées à tous les artefacts rencontrés pour les EF. En général, les méthodes de GD appliquées aux équations de Maxwell ne tiennent pas compte des contraintes de divergence, qu'elles laissent à l'approximation du schéma. On s'attend donc à l'apparition des modes parasites du premier type. Hesthaven et co [66, 121] ont étudié une méthode de Galerkin discontinue locale (LDG) pour discrétiser les équations de Maxwell harmoniques, basée sur les mêmes principes que la méthode GD usuelle pour les systèmes hyperboliques (le système temporel de Maxwell sans les contraintes de divergence est un système hyperbolique). La bonne surprise est que leur méthode s'avère ne pas générer ces modes parasites du premier type en 2D. Mais, ils sont bien présents en 3D. Cela vient du fait qu'en 2D les solutions par la discrétisation LDG, de fréquence non nulle, du problème aux valeurs propres Maxwell harmonique sont équivalentes à celles de l'approximation LDG de l'équation de Helmholtz [66]. En 3D, deux moyens sont proposés pour éviter les modes parasites. Le premier consiste à ajouter un terme de pénalisation sur les sauts des composantes tangentielles des champs et des fonctions tests, qui permet de translater les mauvaises approximations de la fréquence nulle au delà du spectre résolu. L'approximation ainsi produite est une version discontinue qui tend vers une approximation conforme dans $H(\mathbf{rot})$ quand le paramètre de pénalisation est augmenté (il est typiquement en h^{-1}). Le lien entre cette approximation LDG avec pénalisation et les EF d'arête, conformes dans $H(\mathbf{rot})$, est étudié en détail dans [121]. Le deuxième moyen est de choisir un flux numérique non centré pour définir la valeur des champs aux arêtes du maillage. Ainsi, la méthode est dissipative. Il s'avère que les modes parasites, justement, sont dissipés [66].

Concernant les 3 autres types d'artefacts numériques, il faut regarder la relation de dispersion. Comme pour les EF d'ordre élevé, les méthodes GD ont plusieurs degrés de liberté par maille et fournissent donc plusieurs branches à leur relation de dispersion.

Cependant, des calculs effectués pour l'équation des ondes en 1D indiquent qu'il n'y a pas de "stopping bands". En revanche, les ondes parasites de courte longueur et basse fréquence sont présentes. En effet, la partie droite de la relation de dispersion peut ne pas être monotone. En fait, la relation de dispersion est en général une équation implicite (complexe si flux non centré) faisant intervenir des termes en $\cos^2(kh)$ et $\cos(kh)$, au contraire des EF qui ne donnent que du $\cos(kh)$. Pour l'équation des ondes 1D par exemple, cela résulte en une branche supplémentaire dans chaque cadran de la relation de dispersion (branche qui peut éventuellement se confondre avec une des branches supplémentaires dûes à l'utilisation d'une approximation d'ordre élevé). Cependant la possible influence de ce nouveau mode parasite spécifique aux méthodes GD est modéré pour des flux non centrés car ce mode est dissipé [69]. Avec le choix d'un flux exactement décentré du bon côté, l'expression de la relation de dispersion n'a plus de terme en $\cos^2(kh)$. En l'état de notre compréhension, ce mode parasite supplémentaire n'est donc pas un "problème supplémentaire": soit un flux centré est choisi et cette branche se confond avec une autre branche existante; soit un flux exactement décentré est choisi et cette branche disparaît; soit un flux partiellement décentré est choisi et dans ce cas l'onde parasite est dissipée. Quoiqu'il en soit, une vision claire de l'ensemble est obtenue en dérivant la relation de dispersion pour le schéma particulier et en dessinant l'ensemble des courbes (ω, k) qui sont solutions sur l'intervalle de nombres d'onde résolus par le maillage.

En marge de ce point de vue pratique qu'il faut appliquer à chaque méthode concernée, des théories similaires à celles développées pour les EF, ont été établies pour prouver le bon comportement ou non de GD pour les problèmes aux valeurs propres. Ainsi, Buffa *et al* [24] ont obtenu les mêmes types de conditions pour un certain nombre de méthodes de GD parmi les plus courantes, afin de garantir l'absence de modes parasites. La condition dite de compacité discrète est remplacée par la condition appelée "gap property" (qui est une condition un peu plus forte). Pour certaines méthodes de la famille "interior penalty" et "local" DG, les conclusions sont:

- sur tétraèdres conformes, pas de modes parasites pour les éléments nodaux et de Nédélec de la 1ère famille;
- sur hexaèdres conformes, pas de modes parasites pour les éléments de Nédélec de la 1ère famille, mais présence de modes parasites pour la seconde famille et pour les éléments nodaux.

La théorie est confirmée numériquement dans le cas d'un maillage non conforme. En revanche, toutes les méthodes ne sont pas englobées dans la théorie, par exemple celle basée sur des éléments localement à divergence nulle [32, 25], ou encore les méthodes avec intégration numérique des intégrales (comme la méthode GD de Ferrières basée sur des éléments de Nédélec de la deuxième famille sur hexaèdres). Même pour les méthodes LDG, les hypothèses n'ont été vérifiées que pour une version comportant le terme de pénalisation des sauts tangentiels en h^{-1} évoqué plus haut. Donc, il n'y a pas forcément contradiction avec l'observation de modes parasites dans [66].

8.5 Conséquences pour le choix d'un solveur Maxwell-Vlasov

Ayant mis en évidence la possible pollution du spectre discret du problème de Maxwell harmonique (et par conséquent la possible excitation de modes parasites pour Maxwell temporel), nous mettons les conclusions en perspective du couplage Maxwell-Vlasov (par une méthode PIC).

La présence de modes parasites du premier type est une caractéristique qui distingue les solveurs de Maxwell ayant une certaine compatibilité géométrique avec ces équations, leur permettant de satisfaire implicitement aux contraintes de divergence, des solveurs de Maxwell n'ayant pas ces propriétés et qui laissent les contraintes de divergence à l'approximation du schéma. Dans le contexte du système de Maxwell-Vlasov résolu par une méthode PIC, cette distinction est fortement atténuée par la (quasi-)nécessité d'effectuer une étape de correction pour conserver la charge au cours du calcul afin de ne pas accumuler des erreurs sur le champ électrique et sa divergence (qui en retour contribuent aux erreurs sur la conservation de la charge). Bien sûr, si on dispose d'un solveur de Maxwell conservant la charge, on se donne la possibilité d'utiliser un algorithme de répartition du courant conservant la charge. Mais ces algorithmes sont encore en développement pour des maillages non uniformes et des fonctions d'interpolation quelconques, et la technique de correction est préférée en général.

L'utilisation d'un solveur Maxwell, éventuellement pollué par ces modes parasites du premier type, n'est donc pas rédhibitoire dans le contexte PIC. Simplement, l'étape de correction est d'autant plus valable que la solution discrète est proche de la solution exacte. On peut donc supposer qu'un solveur Maxwell "plus compatible" a un avantage sur les autres méthodes.

Examinons à présent le cas des modes parasites de type 2: les ondes courtes parasites à basse fréquence sont susceptibles d'être excitées, notamment par le bruit généré par la méthode PIC. En effet, les applications concernées en résolvant Maxwell-Vlasov impliquent des conditions initiales dont le spectre de Fourier remplit tout l'intervalle de nombres d'onde résolu par un maillage. Donc, ces ondes parasites sont naturellement excitées par les données du problème (dû au sous-échantillonnage notamment). Mais sans doute plus gênant encore est le fait que la méthode PIC est très bruitée avec une forte composante hautes fréquences (spatiales: courtes longueurs d'onde). Donc, si le solveur Maxwell en contient, la méthode PIC produira de telles ondes parasites, lesquelles propageront en partie le bruit numérique de la méthode PIC. Toutefois, l'effet de dispersion aura tendance à séparer plus rapidement ces ondes, celles-ci ayant une vitesse de groupe négative, des ondes approchant les ondes physiques, ayant une vitesse de groupe positive. Ainsi, cette situation peut paradoxalement conduire à un comportement relativement favorable pour les problèmes temporels de ce point de vue.

En revanche, une fréquence temporelle excitée dans le système par une source ou une condition aux limites (ou par la présence de discontinuités) peut conduire à l'apparition de ces ondes parasites, source d'erreur supplémentaire, alors qu'une méthode ayant une

relation de dispersion monotone n'exciterait qu'un seul mode d'onde, celui approchant le mode physique. Il est donc préférable de satisfaire à cette condition de monotonie de la relation de dispersion, laquelle s'inscrit dans le choix, plus général, d'avoir de bonnes propriétés de dispersion sur tout l'intervalle de nombres d'onde résolu par le maillage.

Concernant les artefacts numériques dûs à l'utilisation de méthodes d'ordre élevé, nous pouvons faire les commentaires suivants. Tout d'abord, il est important de noter que des méthodes d'ordre élevé fournissent en effet des résultats moins dispersifs dans la limite des grandes longueurs d'onde. La présence d'ondes numériques issues des branches parasites de la relation de dispersion a une influence d'autant plus négligeable que $kh \rightarrow 0$ car ces ondes sont de faible amplitude, de l'ordre d'erreur du schéma dans cette limite. De plus, et que ce soit un point souhaité ou non, les méthodes d'ordre élevé permettent de suivre la propagation d'ondes plus courtes sur le maillage. Dans la méthode PIC, ces ondes courtes, de l'ordre de la maille, portent essentiellement des erreurs provenant des sources des équations de Maxwell. Ainsi, que le solveur Maxwell soit capable de propager ces ondes, au lieu de les dissiper spatialement, apparaît plutôt négativement; à moins que les étapes d'interpolation puissent être également d'ordre élevé de sorte que l'ensemble de la description sur le maillage autorise ces courtes longueurs d'onde de façon consistante. Pour des étapes d'interpolation de précision limitée (à l'ordre 2 en général), il aurait donc semblé meilleur de réduire la dispersion aux grands nombres d'onde sans élargir l'intervalle de nombres d'ondes résolu par le maillage. C'est finalement ce qui est fait, en choisissant de filtrer les ondes courtes par un moyen ou un autre. Par ailleurs, on a vu que pour les EF, l'excitation des hautes fréquences n'impliquait pas nécessairement la propagation d'un mode d'onde sur le maillage: il existe des bandes de fréquences auxquelles sont associés des modes d'ondes non purement propagatifs, qui se dissipent rapidement sur le maillage. Ainsi, même si les EF d'ordre élevé offrent la possibilité de suivre la propagation d'ondes plus courtes sur un maillage donné, il ne faut pas compter dessus pour une fréquence quelconque excitée dans le système. Ceci tend donc également à justifier l'utilisation d'un filtrage des ondes les plus courtes.

Références

- [1] Abe H., Sakairi N., Itatani R., Okuda H., High-order spline interpolations in the particle simulation, *J. Comput. Physics*, **63**, 247–267, 1986.
- [2] Ainsworth M., Dispersive and dissipative behaviour of high order discontinuous Galerkin finite element methods, *J. Comput. Phys.*, **198**, 106–130, 2004.
- [3] Ainsworth M., Coyle J., Hierarchic hp-edge element families for Maxwell's equations on hybrid quadrilateral/triangular meshes, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng*, **190**, 6709–6733, 2001.
- [4] Assous F., Ciarlet P., Labrunie S., Segré J., Numerical solution to the time-dependent Maxwell equations in axisymmetric singular domains: The singular complement method, *J. Comput. Physics*, **191**, 147–176, 2003.

- [5] Assous F., Ciarlet P., Segré J., Numerical solution to the time-dependent Maxwell equations in two-dimensional singular domains: The singular complement method, *J. Comput. Physics*, **161**, 218–249, 2000.
- [6] Assous F., Degond P., Heintze E., Raviart P.A., Segré J., On a finite-element Method for solving the three-dimensionnal Maxwell equations, *J. Comput. Physics*, **109**, 222–237, 1993.
- [7] Assous F., Degond P., Segré J., A New Scheme to Treat the Numerical Tcherenkov Instability for Electromagnetic Particle Simulations, *J. Comput. Phys.*, **138**, 171–192, 1997.
- [8] Assous F., Degond P., Segré J., Numerical Approximation of the Maxwell Equations in Inhomogeneous Media by a P1-Conforming Finite Element Method, *J. Comput. Phys.*, **128**, 363–380, 1996.
- [9] Babuska I., Osborn J., Eigenvalue Problems, In: Handbook of Numerical Analysis, Vol. II, (PG Ciarlet and JL Lions, eds.), North-Holland, Amsterdam, 1991.
- [10] Baker G.A., Jureidini W.N., Karakashian O.A., Piecewise solenoidal vector fields and the Stokes problem, *SIAM J. Numer. Anal.*, **27**, 1466–1485, 1990.
- [11] Barthelmé R., Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de Vlasov et de Maxwell, thèse de l’Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2005.
- [12] Bidégarray B., Ghidaglia J-M., Multidimensional corrections to cell-centered finite volume methods for Maxwell equations, *Applied Numerical Mathematics*, **44**, 281–298, 2003.
- [13] Birdsall C.K., Langdon A.B., Plasma physics via computer simulation, McGraw-Hill, New York, NY, 1985.
- [14] Boffi D. A note on the de Rham Complex and a Discrete Compactness Property, *Applied Math. Letters*, **14**, 33–38, 2001.
- [15] Boffi D., Buffa A., Gastaldi L., Convergence analysis for hyperbolic evolution problems in mixed form, Tech. Report PV-17 IMATI-CNR, 2005.
- [16] Boffi D., Brezzi F., Gastaldi L., On the problem of spurious eigenvalues in the approximation of linear elliptic problems in mixed form, *Math. Comput.*, **69**, 121–140, 1999.
- [17] Boffi D., Duran R.G., Gastaldi L., A remark on spurious eigenvalues in a square, *Applied Math. Letters*, **12**, 107–114, 1999.
- [18] Boffi D., Farina M., Gastaldi L., On the approximation of Maxwell’s eigenproblem in general 2D domains, *Computers and Structures*, **79**, 1089–1096, 2001.
- [19] Boffi D., Fernandes P., Gastaldi L., Perugia I., Computational models of electromagnetic resonators: analysis of edge element approximation, *SIAM J. Num. An.*, **36**, 1264–1290, 1999.
- [20] Bonnet-Ben Dhia A.-S., Hazard C., Lohrengel., A singular field method for the solution of Maxwell’s equations in polyhedral domains, *SIAM J. Appl. Math.*, **59**, 2028–2044, 1999.
- [21] Boris J.P., Relativistic plasma simulations - Optimization of a hybrid code, *Proc. 4th Conf. Num. Sim. of plasmas, NRL Washington DC*, 1970.

- [22] Bossavit A., Solving Maxwell equations in a closed cavity, and the question of 'spurious modes', *IEEE trans. Magn.*, **26**, 702–705, 1990.
- [23] Brezzi F., Fortin M., Mixed and Hybrid Finite Element Methods, Springer Verlag, Berlin/Heidelberg, 350pp, 1991.
- [24] Buffa A., Perugia I., Discontinuous Galerkin approximation of the Maxwell eigenproblem, Tech. Report PV-24 IMATI-CNR, 2005.
- [25] Canouet N., Méthodes de Galerkin Discontinu pour la résolution du système de Maxwell sur des maillages localement raffinés non-conformes, Thèse de l'ENPC, 2003.
- [26] Canouet N., Fezoui L., Piperno S., 3D Maxwell's equations and orthogonal non-conforming meshes: a hp-type Discontinuous Galerkin method, *Research report INRIA-4912*, 2003.
- [27] Caorsi S., Fernandes P., Raffetto M., On the convergence of Galerkin Finite Element approximations of electromagnetic eigenproblems, *SIAM J. Num. An.*, **38**, 580–607, 2000.
- [28] Caorsi S., Fernandes P., Raffetto M., On the effect of the spurious modes in deterministic problems, *Int. J. Comput. Math. Electr. Electron. Engng. (COMPEL)*, **13**, suppl. A, 317–322, 1994.
- [29] Cendes Z.J., Sylvester P., Numerical solution of dielectric loaded waveguides, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **18**, 1124–1131, 1970.
- [30] Ciarlet P., Augmented formulations for solving Maxwell equations, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, **194**, 559–586, 2005.
- [31] Ciarlet P., Zou J., Fully discrete finite element approaches for time-dependant Maxwell equations, *Numerische Mathematik*, **82**, 193–219, 1999.
- [32] Cockburn B., Karniadakis G.E., Shu C-W., The development of discontinuous Galerkin methods, in LNCSE, Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications (Springer Verlag) Vol. 11, p. 1, 2000.
- [33] Cockburn B., Li F., Shu C-W., Locally divergence-free discontinuous Galerkin methods for the Maxwell equations, *Journal of Computational Physics*, **194**, 588–610, 2004.
- [34] Cohen G., Ferrières X., Pernet S., A spatial high-order hexahedral discontinuous Galerkin method to solve Maxwell's equations in time domain, *J. Comput. Phys.*, **in press**, 2006.
- [35] Cohen G., Joly P., Construction Analysis of Fourth-Order Finite Difference Schemes for the Acoustic Wave Equation in Nonhomogeneous Media, *SIAM J. Numer. Anal.*, **33**, 1266–1302, 1996.
- [36] Cohen G., Joly P., Tordjman N., Eléments finis d'ordre élevé avec condensation de masse pour l'équation des ondes en dimension 1, *Rapport INRIA*, août 1994.
- [37] Cohen G., Monk P., Mur-Nedelec finite element schemes for Maxwell's equations, *Comp. Meth. in Appl. Mech. Eng.*, **169**, 197–217, 1999.
- [38] Collino F., Raffinement espace-temps pour les schémas de type Galerkin Discontinu pour l'électromagnétisme, Rapport CEA, 2006.

- [39] Costabel M., Dauge M., Weighted regularization of Maxwell equations in polyhedral domains, *Numer. Math.*, **93**, 239–277, 2002.
- [40] Cottet G., Raviart P., Particle Methods for the One-Dimensional Vlasov-Poisson Equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **21**, 52–76, 1984.
- [41] Coyle J., Ledger P.D., Evidence of exponential convergence in the computation of Maxwell eigenvalues, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**, 587–604, 2005.
- [42] Davies J.B., Fernandez A., Philippou G.Y., Finite element analysis of all modes in cavities with circular symmetry, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **30**, 1975–1980, 1982.
- [43] Demkowicz L., Edge finite elements of variable order for Maxwell’s equations - A discussion, Technical Report TICAM Report 00-32, Texas Institute for Computational and Applied Mathematics, University of Texas at Austin, 2000.
- [44] Demkowicz L., Fully automatic hp-adaptivity for Maxwell’s equations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **194**, 605–624, 2005.
- [45] Demkowicz L., Vardapetyan L., Modeling of electromagnetic absorption/scattering problems using hp-adaptive finite elements, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **152**, 103–124, 1998.
- [46] Descloux J., Nassif N., Rappaz J., On spectral approximation. Part 1. The problem of convergence, *RAIRO, Numerical Analysis*, **12**, 97–112, 1978.
- [47] Descloux J., Nassif N., Rappaz J., On spectral approximation. Part 2. Error estimates for the Galerkin methods, *RAIRO, Numerical Analysis*, **12**, 113–119, 1978.
- [48] Ditkowski A., Dridi K., Hesthaven J.S., Convergent Cartesian Grid Methods for Maxwell’s Equations in Complex Geometries, *J. Comput. Phys.*, **170**, 39–80, 2001.
- [49] Duruflé M., Intégration numérique et éléments finis d’ordre élevé appliqués aux équations de Maxwell en régime harmonique, thèse de l’Université Paris 9 Dauphine, 2006.
- [50] Elmkiès A., Joly P., Éléments finis d’arête et condensation de masse pour les équations de Maxwell: le cas de dimension 3, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, **325**, 1217–1222, 1997.
- [51] Esirkepov T.Z., Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor, *Comput. Phys. Comm.*, **135**, 144–153, 2001.
- [52] Fernandes P., Raffetto M., Counterexamples to the currently accepted explanation for spurious modes and necessary and sufficient conditions to avoid them, *IEEE Trans. Magn.*, **38**, 653–656, 2002.
- [53] Filbet F., Sonnendrücker E., Numerical methods for the Vlasov equation, in *Numerical Mathematics and Advanced Applications, ENUMATH 2001*, F. Brezzi, A. Buffa, S. Corsaro, A. Murli (Eds), (Springer), 2003.
- [54] Fouquet t., Raffinement de maillage spatio-temporel pour les équations de Maxwell, thèse de l’Université Paris 9 Dauphine, 275pp, 2000.
- [55] Friedman A., Damped time advance methods for particles and EM fields, in: US-Japan Workshop on Advanced Computer Simulation Techniques Applied to Plasmas and Fusion, 1990.

- [56] Godfrey B.B., Time-biased field solver for electromagnetic PIC codes, in: Proceedings of the Ninth Conference on Numerical Simulation of Plasmas, 1980.
- [57] Goplen B., Ludeking L., Smith D., Warren G., User-configurable MAGIC for electromagnetic PIC calculations, *Computer Physics Communications*, **87**, 54–86, 1995.
- [58] Greenwood A.D., Cartwright K.L., Luginsland J.W., Baca E.A., On the elimination of numerical Cerenkov radiation in PIC simulations, *J. Comput. Phys.*, **201**, 665–684, 2004.
- [59] Grigoryev Y.N., Vshivkov V.A., Fedoruk M.P., Numerical "particle-in-cell" methods theory and applications, VSP, Utrecht-Boston, 2002.
- [60] Hagstrom T., Radiation boundary conditions for the numerical simulation of waves, *Acta Numerica*, **8**, 1999.
- [61] Hara M., Wada T., Fukasawa T., Kikuchi F., Three-dimensional analysis of RF electromagnetic field by the finite element method, *IEEE Trans. Magn.*, **19**, 2417–2420, 1983.
- [62] Hermeline F., Two Coupled Particle-Finite Volume Methods Using Delaunay-Voronoi Meshes for the Approximation of Vlasov-Poisson and Vlasov-Maxwell Equations, *J. Comput. Phys.*, **106**, 1–18, 1993.
- [63] Hermeline F., A finite volume method for solving Maxwell equations in inhomogeneous media on arbitrary meshes, *Comptes Rendus Mathematique*, **339**, 893–898, 2004.
- [64] Hesthaven J.S., Nodal High-Order Methods on Unstructured Grids: I. Time-Domain Solution of Maxwell's Equations, *J. Comput. Phys.*, **181**, 186–221, 2002.
- [65] Hesthaven J.S., Teng C.H., Stable Spectral Methods on Tetrahedral Elements, *SIAM J. Sci. Comput.*, **21**, 2352–2380, 2000.
- [66] Hesthaven J.S., Warburton T., High order nodal discontinuous Galerkin methods for the Maxwell eigenvalue problem, *Royal Soc. London Ser A*, **362**, 493–524, 2004.
- [67] Hockney R.W., Eastwood J.W., Computer simulations using particles, McGraw-Hill, New York, NY, 1991.
- [68] Hockney R.W., Goel S.P., Eastwood J.W., Quiet high-resolution computer models of a plasma, *J. Comput. Phys.*, **14**, 148–158, 1974.
- [69] Hu F., Atkins H., Eigensolution analysis of the discontinuous Galerkin method with non-uniform grids. Part 1: One space dimension, *J. Comput. Phys.*, **182**, 516–545, 2002.
- [70] Hyman J.M., Shashkov M., Mimetic discretizations for Maxwell's equations, *J. Comput. Physics*, **151**, 881–909, 1999.
- [71] Ilhenberg F., Babuska I., Sauter S., Reliability of finite element methods for the numerical computation of waves, *Advances in Engineering Software*, **28**, 417–424, 1997.
- [72] IMA "Hot Topics" Workshop: Compatible Spatial Discretizations for Partial Differential Equations, May 11-15, 2004.
- [73] Jacobs G.B., Hesthaven J.S., High-order nodal discontinuous Galerkin particle-in-cell method on unstructured grids, *J. Comput. Phys.*, **214**, 96–121, 2006.

- [74] Jacobs G.B., Kopriva D.A., Mashayek F., A Particle-Tracking Algorithm for the Multidomain Staggered-Grid Spectral Method, AIAA Paper 2001-0630, 2001.
- [75] Jacquet L., Etude de la saturation des ceintures de Van Allen avec le code Telsat. Test de nouvelles procédures d'initialisation des électrons, rapport CEA, mai 2006.
- [76] Jiang B., Wu J., Povinelli L.A., The origin of spurious solutions in computational electromagnetics, *J. Comput. Physics*, **125**, 104–123, 1996.
- [77] Kikuchi F., Mixed and penalty formulations for finite element analysis of an eigenvalue problem in electromagnetism, *Computer Meth. Appl. Mech. Engng.*, **64**, 509–521, 1987.
- [78] Kikuchi F., On a discrete compactness property for the Nedelec finite elements, *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA Math.*, **36**, 479–490, 1989.
- [79] Konrad A., Triangular finite elements for vector fields in electromagnetics, PhD thesis, Department of Electrical Engineering, McGill University, 1974.
- [80] Lacoste P., La condensation de la matrice masse, ou mass-lumping, pour les éléments finis mixtes de Raviart-Thomas-Nédélec d'ordre 1, *Comptes Rendus Mathématique*, **339**, 727–732, 2004.
- [81] Langdon A.B., On enforcing Gauss' law in electromagnetic particle-in-cell codes, *Computer Physics Communications*, **70**, 447–450, 1992.
- [82] Le Bourdiec S., de Vuyst F., Jacquet L. Numerical solution of the Vlasov-Poisson system using generalized Hermite functions *Computer Physics Communications*, **175**, 528–544, 2006.
- [83] Llobet X., Appert K., Bondeson A., Vaclavik J., On spectral pollution, *Computer Physics Comm.*, **59**, 199–216, 1990.
- [84] Marder B., A method incorporating Gauss' law into electromagnetic PIC codes, *J. Comput. Physics*, **68**, 48–55, 1987.
- [85] Microwave studio, Computer Simulation Technology.
- [86] Monk P., Finite element methods for Maxwell's equations, Oxford University Press, Oxford, 336 pp., 2003.
- [87] Monk P., Suli E., Error estimates for Yee's method on nonuniform grids, *IEEE Trans. Magnetics*, **30**, 3200–3203, 1994.
- [88] Mulder W.A., Spurious modes in finite-element discretizations of the wave equation may not be all that bad, *Applied Num. Math.*, **30**, 425–445, 1999.
- [89] Munz C.-D., Omnes P., Schneider R., A three-dimensional finite-volume solver for the Maxwell equations with divergence cleaning on unstructured meshes, *Computer Physics Communications*, **130**, 83–117, 2000.
- [90] Munz C.-D., Omnes P., Schneider R., Sonnendrücker E., Voß U., Divergence correction techniques for Maxwell solvers based on a hyperbolic model, *J. Comput. Physics*, **161**, 484–511, 2000.
- [91] Munz C.-D., Roller S., Sonnendrücker E., Stein E., Voß U., Westermann T., A Finite-Volume Particle-In-Cell Method for the Numerical Treatment of the Maxwell-Lorenz Equations on Boundary-Fitted Meshes, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, **44**, 1999.

- [92] Munz C.-D., Schneider R., Sonnendrücker E., Voß U., Maxwell's equations when the charge conservation is not satisfied, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, **328**, 431–436, 1999.
- [93] Mur G., Edge elements, their advantages and their disadvantages, *IEEE Trans. Magn.*, **30**, 3552–3557, 1994.
- [94] Mur G., The fallacy of edge elements, *IEEE Trans. Magn.*, **34**, 3244–3247, 1998.
- [95] Nédelec J.-C., Mixed finite elements in \mathbb{R}^3 , *Numer. Math.*, **35**, 315–341, 1980.
- [96] Nédelec J.-C., A new family of mixed finite elements in \mathbb{R}^3 , *Numer. Math.*, **50**, 57–81, 1986.
- [97] Nevins W.M., Hammett G.W., Dimits A.M., Dorland W., Shumaker D.E., Discrete Particle Noise in PIC Simulations of ETG Turbulence, *Phys. Plasmas*, **12**, 2005.
- [98] Paulsen K., Lynch D., Elimination of vector parasites in finite element Maxwell solutions, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **39**, 395–404, 1991.
- [99] Pernet S., Etude de méthodes d'ordre élevé pour résoudre les équations de Maxwell dans le domaine temporel. Application à la détection et à la compatibilité électromagnétique, Thèse de doctorat, Université de Paris-Dauphine IX, 2004.
- [100] Perugia I., Schötzau D., Monk P., Stabilized interior penalty methods for the time-harmonic Maxwell equations, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, **191**, 4675–4697, 2002.
- [101] Piperno S., Fezoui L., A Discontinuous Galerkin FVTD method for 3D Maxwell equations, *Research report INRIA-4733*, 2003.
- [102] Rachowicz W., Demkowicz L., An hp-adaptive finite element method for electromagnetics: Part 1: Data structure and constrained approximation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **187**, 307–335, 2000.
- [103] Raffetto M., Discrete compactness for edge elements in the presence of mixed boundary conditions, *preprint*, sept. 2003.
- [104] Remaki M., Méthodes numériques pour les équations de Maxwell instationnaires en milieu hétérogène, Thèse Mathématiques Appliquées, CERMICS, Ponts et Chaussées, 178pp, 1999.
- [105] Ricci P., Lapenta G., Brackbill J.U., A Simplified Implicit Maxwell Solver, *J. Comput. Phys.*, **183**, 117–141, 2002.
- [106] Ryan J., Shu C.-W., On a one-sided post-processing technique for the discontinuous galerkin methods, *Methods and Applications of analysis*, **10**, 295–308, 2003.
- [107] Sankaran K., Fumeaux C., Vahldieck R., Cell-centered finite-volume-based perfectly matched Layer for time-domain Maxwell system, *IEEE Trans. Microwave Th. Tech.*, textbf54, 1269–1276, 2006.
- [108] Schoberl J., Zaglmayr S., High Order Nedelec Elements with local complete sequence properties, *Int. J for Computation and Maths in Electrical and Electronic Eng COMPEL*, 2005.
- [109] Sesquès M., Pujols A., Etat d'avancement du projet SGEMP3D. Evaluation des méthodes de volumes finis et de type Galerkin discontinu pour la propagation des ondes, rapport CEA, 2004.

- [110] Sonnendrücker E., Roche J., Bertrand P., Ghizzo A., The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of Vlasov Equations, *J. Comput. Phys.*, **149**, 201–220, 1999.
- [111] Sonnendrücker E., Navaro P., Développement du code Maxwell-Vlasov PIC parallèle Brennus: Mise en œuvre d’un solveur Maxwell 2D par la méthode de Galerkin Discontinu, rapport CEA, novembre 2006.
- [112] Sonnendrücker E., Navaro P., Elaboration d’un code PIC (Particle-In-Cell) parallélisé en 3 dimensions, rapport CEA, octobre 2005.
- [113] Sun D., Manges J., Yuan X., Cendes Z., Spurious modes in finite-element methods, *IEEE Antennas Propag. Magn.*, **37**, 12–24, 1995.
- [114] Sydora R.D., Low-noise electromagnetic and relativistic particle-in-cell plasma simulation models, *J. Comput. Appl. Math.*, **109**, 243–259, 1999.
- [115] Taflove A., Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Norwood, MA: Artech House, 1995.
- [116] Thompson L.L., Pinsky P.M., Complex wavenumber Fourier analysis of the p-version finite element method, *J. Comput. Mechanics*, **13**, 255–275, 1994.
- [117] Trefethen L.N., Group velocity in finite difference schemes, *SIAM review*, **24**, 113–136, 1982.
- [118] Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H., A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations, *Computer Physics Communications*, **156**, 73–85, 2003.
- [119] Vichnevetsky R. Energy and Group Velocity in Semi-Discretizations of Hyperbolic Equations, *Mathematics and Computers in Simulation*, **23**, 1981.
- [120] Villasenor J., Buneman O., Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers, *Comput. Phys. Commun.*, **69**, 306–316, 1992.
- [121] Warburton T., Embree M., The role of the penalty in the local discontinuous Galerkin method for Maxwell’s eigenvalue problem, *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.*, in press, 2006.
- [122] Winkler J.R., Davies J.B., Elimination of spurious modes in finite element analysis, *J. Comput. Physics*, **56**, 1–14, 1984.
- [123] White D.A., Koning J., Rieben R., Stowell M., EMSolve: A three-dimensional time domain electromagnetic solver, 5th Biennial Tri-Laboratory Engineering Conference, Santa Fe, NM, October 21-32, 2003.
- [124] Wu J-Y., Lee R., The advantages of triangular and tetrahedral edge elements for electromagnetic modeling with the finite-element method, *IEEE Tr. Ant. Propag.*, **45**, 1431–1437, 1997.
- [125] Yee K.S., Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, **14**, 302–307, 1966.