UNIVERSITE DE NICE-SOPHIA ANTIPOLIS

U.F.R. FACULTE DES SCIENCES

Laboratoire de Mathématiques

THESE

présentée pour obtenir le titre de

Docteur en SCIENCES

Spécialité :

MATHEMATIQUES

par

ISSAUTIER Didier

METHODES PARTICULAIRES EN CINETIQUE DES GAZ ET TRANSPORT DE PARTICULES CHARGEES

Soutenue le 7 Décembre 1995 devant le jury composé de :

MM.	Michel RASCLE	Président
	George-Henry COTTET	Rapporteur
Mlle	Loula FEZOUI	Examinateur
MM.	Frédéric POUPAUD	
Mlle	Anne NOURI	

A l'université de Nice à 14 heures

Remerciements

Le travail qui a abouti à cette thèse a été effectué à l'université de Nice et à l'INRIA-CERMICS Sophia-Antipolis. Je tiens d'ailleurs à exprimer toute ma gratitude à Monsieur Bernard LARROUTUROU qui m'a accueilli au sein de son projet de recherche.

Je remercie le Professeur Michel RASCLE d'avoir accepté la lourde tâche de présider ce jury.

J'adresse tous mes remerciements à Monsieur George-Henry COTTET et à Anne NOURI pour leur présence dans ce jury et pour avoir accepté de porter un jugement sur mon travail.

Je suis également reconnaissant à Monsieur Pierre-Arnaud RAVIART d'avoir accepté d'être rapporteur de cette thèse et je regrette qu'il ne puisse assister à la soutenance.

Ce sujet de recherche m'a été proposé par Frederic POUPAUD. Je tiens à dire qu'il est vraiment très agréable de travailler avec lui indépendamment de sa grande compétence scientifique.

J'exprime toute ma reconnaissance à Madame Loula FEZOUI, qui m'a considérablement aidé durant cette thèse et qui a fait preuve d'une grande disponibilité à mon égard.

Je tiens maintenant à remercier plus particulièrement Nathalie et Christian OLIVIER qui m'ont énormément aidé durant cette période.

Si cette thèse a pu aboutir, c'est aussi sans doute dû à l'excellente ambiance qui règne au CERMICS. Je remercie à cette occasion tous ses membres sans les citer individuellement car la liste est trop longue.

Table des matières

Introduction générale

Il existe essentiellement trois grands types de méthodes numériques pour résoudre des équations aux dérivées partielles, les méthodes de différences finies qui furent les premières à être utilisées, les méthodes d'éléments finis ou de volumes finis et enfin les méthodes particulaires. Les méthodes particulaires sont particulièrement bien adaptées aux cas où les systèmes que l'on considère peuvent être décrits à l'aide d'une formulation lagrangienne ou aux cas où les systèmes considérés sont par nature corpusculaires.
On utilise le mot "particule" car dans les applications que l'on considère les particules peuvent être associées à des objets physiques. Chaque "particule" est caractérisée par sa masse, sa position, son impulsion et éventuellement sa charge. Chacune de ces "particules" représente un certain nombre de particules réelles et l'évolution du système est déterminée par les lois d'interaction de ces particules.
Les méthodes particulaires sont utilisées dans un nombre relativement limité de problèmes en physique et en mécanique des fluides. Elles sont particulièrement utilisées pour la résolution numérique d'équations cinétiques comme les équations de Boltzmann, de Vlasov, de Fokker-Planck et sont principalement basées sur une approche probabiliste. Parmi les méthodes basées sur cette approche, la méthode de Monte-Carlo est celle qui est le plus largement utilisée. Mais cette méthode, à cause du caractère stochastique de la discrétisation, présente un bruit numérique très important. Elle nécessite donc des procédures de moyennes temporelles qui rendent coûteux le calcul des solutions stationnaires, et très difficile le calcul des régimes transitoires. Seuls, les moments de la fonction de distribution tels que les densités de courant ou d'énergie sont obtenus avec une bonne précision. Tout naturellement d'autres méthodes de résolution ont été concues et développées pour permettre une exploration plus poussée des phénomènes physiques, notamment des régimes transitoires.
Parmi les méthodes proposées, on s'intéressera dans cette thèse à la méthode particulaire déterministe ou pondérée. Cette méthode a été introduite par G.H. Cottet, S. Mas-Gallic et P.A. Raviart [23], [9], [10] pour des perturbations visqueuses des équations d'Euler incompressibles. Ensuite, la méthode a été adaptée au traitement des termes de collision dans les équations cinétiques par S. Mas-Gallic [21]. Cette méthode a également été appliquée à l'équation de Boltzmann des Semiconducteurs par B. Niclot, P. Degond et F. Poupaud [24] et aux systèmes de Vlasov-Poisson et de Vlasov-Maxwell.
Dans cette méthode, les particules se déplacent le long des caractéristiques de la partie convective de l'équation et l'opérateur de collision est évalué par une formule de quadrature où les particules jouent le rôle de points de quadrature.
Une analyse des méthodes particulaires appliquées aux équations hyperboliques du

premier ordre a été développée par P.A. Raviart dans [30]. Cette analyse a été étendue à l'équation de transport des neutrons par S. Mas-Gallic et F. Poupaud dans [22], à l'équation de Boltzmann des Semiconducteurs par B. Niclot, P. Degond et F. Poupaud dans [24] ainsi qu'aux équations d'Euler incompressibles et de Navier-Stokes linéarisées. Une analyse des méthodes particulaires appliquées aux systèmes de Vlasov-Poisson et de Vlasov-Maxwell a été développée par G.H. Cottet, P.A. Raviart dans [11], R. Glassey, J. Schaeffer dans [12] et H.D. Victory, G. Tucker, K. Ganguly dans [33].

Cette thèse est constituée de deux parties distinctes, le principal lien entre ces deux parties étant la méthode particulaire utilisée pour l'approximation numérique des équations considérées. Nous allons appliquer ici la méthode particulaire déterministe à l'équation de Boltzmann de la dymamique des gaz et au système de Vlasov-Maxwell. Nous allons considérer un modèle de collision simplifié pour l'équation de Boltzmann: le modèle B.G.K. (Bhatnagar, Gross et Krook) [3], néanmoins ce que nous allons présenter pourra être étendu à l'équation de Boltzmann. En ce qui concerne le système de Vlasov-Maxwell, la méthode particulaire déterministe est couramment utilisée pour l'approximation numérique de l'équation de Vlasov. La difficulté provient ici du couplage avec le système de Maxwell. D'autre part, nous avons implémenté ce type de méthodes sur des calculateurs massivement parallèles ce qui permettra la résolution d'un nombre plus important de problèmes physiques.

On va maintenant présenter de façon plus précise les résultats obtenus.

Un modèle cinétique pour les gaz neutres:

Le modèle B.G.K. pour l'équation de Boltzmann s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f = \dfrac{1}{\tau}(M(f) - f) \qquad t \in I\!R^+ \,;\, \mathbf{x} \in I\!R^N \,;\, \mathbf{v} \in I\!R^N \\ f(0,\mathbf{x},\mathbf{v}) \;=\; f_0(\mathbf{x},\mathbf{v}) \end{array} \right. \tag{1}$$

avec:

$$M(f) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{N}{2}}} \exp(-\frac{\mid \mathbf{v} - \mathbf{U} \mid^2}{2T}) \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{U} \\ E \end{pmatrix} \;=\; \int_{I\!R^N} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \dfrac{\mid \mathbf{v} \mid^2}{2} \end{pmatrix} f \, d\mathbf{v}$$

La température T est déduite de l'énergie E par la relation:

$$E = \rho \frac{\mid \mathbf{U} \mid^2}{2} + \frac{N}{2} \rho T$$

La méthode envisagée pour résoudre (1) a été introduite par S. Mas-Gallic pour une équation de Boltzmann linéaire [21]. Nous avons adapté cette méthode au cas de l'équation (1) qui est non linéaire. La méthode consiste à approcher la fonction f au sens des mesures par une somme de masses de Dirac:

$$f_h \;=\; \sum_{i \in I} w_i f_i(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t))$$

Les particules suivent les caractéristiques de la partie transport de l'équation:

$$\mathbf{x}_i(t) \;=\; \mathbf{x}_i(0) + \mathbf{v}_i(t) \qquad \mathbf{v}_i(t) \;=\; \mathbf{v}_i(0)$$

L'approximation de l'opérateur de collision $J(f) = M(f) - f$ est définie par:

$$J_i(t) \;= M_i(t) - f_i(t) \quad \text{avec} \quad M_i(t) \;=\; \frac{\rho_i(t)}{(2\pi T_i(t))^{\frac{N}{2}}} \exp(-\frac{\mid \mathbf{v}_i(t) - \mathbf{U}_i(t) \mid^2}{2T_i(t)})$$

et:

$$\begin{pmatrix} \rho_i(t) \\ (\rho \mathbf{U})_i(t) \\ E_i(t) \end{pmatrix} \;=\; \sum_{j \in I} w_j \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v}_j \\ \dfrac{\mid \mathbf{v}_j \mid^2}{2} \end{pmatrix} f_j(t)\, \zeta_\epsilon \left(\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)\right)$$

La fonction ζ_ϵ est une fonction de régularisation donnée par: $\zeta_\epsilon(\mathbf{x}) = \zeta(\dfrac{\mathbf{x}}{\epsilon})$ où ζ est une fonction qui vérifie:

$$\int_{I\!R^N} \zeta(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \,;\; \int_{I\!R^N} \mathbf{x}^l \zeta(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \,;\; 1 \leq \mid l \mid \leq r - 1 \,;\; \int_{I\!R^N} \mid \mathbf{x} \mid^r \mid \zeta(\mathbf{x}) \mid d\mathbf{x} < +\infty$$

Les poids $f_i(t)$ sont solutions du système différentiel:

$$\frac{df_i}{dt}(t) \;=\; \frac{1}{\tau}(M_i(t) - f_i(t)) \tag{2}$$

Nous avons proposé un nouveau schéma d'intégration temporelle pour résoudre (2). L'approximation de l'équation (1) s'écrit alors:

$$\left\{\begin{array}{rcl} f_i^{n+1} & = & \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})f_i^n + (1-\exp(-\frac{\Delta t}{\tau}))M_i^n \\ f_i(0) & = & f_0(\mathbf{x}_i(0),\mathbf{v}_i(0)) \end{array}\right. \tag{3}$$

On montre alors que l'erreur est bornée par:

$$\sup_{i\in I,t_n\le t_0} \mid f_{B_v}(t_n,x_i(t_n),v_i) - f_i^n \mid \le C[\Delta t + \epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m}](\exp(\frac{C}{\tau})-1)$$

où f_{B_v} est solution du problème:

$$\left\{\begin{array}{ll} \frac{\partial f_{B_v}}{\partial t} + v.\nabla_x f_{B_v} = \frac{1}{\tau}(M_{B_v}(f_{B_v}) - f_{B_v}) & t\in I\!R^+\,;\,\mathbf{x}\in I\!R^N\,;\,\mathbf{v}\in I\!R^N \\ f_{B_v}(0,x,v) = f_0(x,v) & \end{array}\right.$$

où:

$$M_{B_v} = \frac{\rho_{B_v}}{(2\pi T_{B_v})^{\frac{N}{2}}}\exp(-\frac{\mid \mathbf{v}-\mathbf{U}_{B_v}\mid^2}{2T_{B_v}}) \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \rho_{B_v} \\ \rho_{B_v}\mathbf{U}_{B_v} \\ E_{B_v} \end{pmatrix} = \int_{|\mathbf{v}|\le B_v} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \frac{\mid \mathbf{v}\mid^2}{2} \end{pmatrix} f_{B_v}\,d\mathbf{v}$$

On a également exprimé l'erreur précédente en fonction du nombre de particules N_p employées:

$$\sup_{i\in I,t_n\le t_0} \mid f_{B_v}(t_n,x_i(t_n),v_i) - f_i^n \mid \le C(\Delta t + (N_p)^{-\frac{m}{1+m}})(\exp(\frac{C}{\tau})-1)$$

Pour établir ce résultat, nous avons démontré l'existence de solutions régulières pour le modèle B.G.K., en utilisant des résultats de B. Perthame et M. Pulvirenti [28]. Nous avons également estimé $f - f_{B_v}$ dans des espaces de Sobolev avec poids ce qui nous permet d'obtenir à B_v fixé:

$$\sup_{i\in I,t_n\le t_0} \mid f(t_n,x_i(t_n),v_i) - f_i^n \mid \;\le \frac{C_{t_0}}{B_v^{q-N-2}} + C_{B_v,t_0}[\frac{\Delta t}{2\tau} + \frac{1}{\tau}(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})]$$

où q est une constante avec $q > N+2$.

Nous avons procédé à des tests numériques dans les chapitres 4 et 5. Dans le cas où le temps de relaxation $\tau \to 0$ on retrouve à partir de (1) les équations d'Euler compressibles, on a ainsi pu comparer les résultats numériques obtenus à la solution exacte des équations d'Euler. Nous avons également considéré l'écoulement d'un gaz raréfié sur une plaque plane et comparé nos résultats à ceux obtenus à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo. Tous ces tests ont permis de valider la méthode présentée.
Nous présentons dans le chapitre 6 une stratégie pour implémenter sur des calculateurs massivement parallèles d'architecture diverses la méthode particulaire déterministe pour résoudre l'équation de Boltzmann (modèle B.G.K.). Les résultats de performance obtenus (temps C.P.U.) ont permis de montrer le haut niveau de parallélisme de la méthode. On retiendra que les performances enregistrées sur ces machines sont supérieures (temps calcul divisé par un facteur 2) à celles obtenues sur un ordinateur vectoriel de référence: le Cray-YMP.

Le système de Vlasov-Maxwell:

Le système de Vlasov-Maxwell s'écrit:

$$\text{Equation de Vlasov :} \qquad \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{p}).\nabla_{\mathbf{x}} f + q(\mathbf{E} + \mathbf{v}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0$$

avec: $\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$ et $\gamma = (1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}}$.
Les champs $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t,\mathbf{x})$ et $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t,\mathbf{x})$ sont solution des équations de Maxwell:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 rot(\mathbf{B}) = -\dfrac{1}{\epsilon_0}\mathbf{j} \\ div(\mathbf{E}) = \dfrac{\rho}{\epsilon_0} \\ div(\mathbf{B}) = 0 \end{cases}$$

Les équations de Vlasov et de Maxwell sont couplées par l'intermédiaire des densités de charge et de courant $\rho = \rho(t,\mathbf{x})$ et $\mathbf{j} = \mathbf{j}(t,\mathbf{x})$ définies par:

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \qquad , \qquad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p}$$

Les équations $div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$ et $div\mathbf{B} = 0$ sont vérifiées pour tout temps $t > 0$ si $div\mathbf{E}(t=0) = \frac{\rho(t=0)}{\epsilon_0}$ et $div\mathbf{B}(t=0) = 0$, elles sont donc redondantes et on pourrait ainsi ne pas les considérer.
Néanmoins au niveau discret cette redondance n'est plus vérifiée. Pour remédier à ce problème nous proposons une nouvelle formulation des équations de Maxwell (notée (MV)):

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) - \dfrac{1}{\delta}\nabla(div\mathbf{B}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 rot(\mathbf{B}) - \dfrac{1}{\alpha}\nabla(div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}) = -\dfrac{1}{\epsilon_0}\mathbf{j} \end{cases} \qquad (MV)$$

où α et δ sont deux constantes positives.
L'équation de Vlasov est résolue à l'aide d'une méthode particulaire déterministe [3].
En ce qui concerne la formulation (MV) du système de Maxwell, nous utilisons une formulation mixte Eléments finis-Volumes finis sur des maillages non structurés utilisant des fonctions de flux numériques décentrés.
Nous avons étudié, dans le cas bidimensionnel, la stabilité des schémas présentés afin de préciser la dépendance en α et δ de la condition de stabilité. Nous avons ainsi pu montrer que pour des valeurs de α et δ proportionnelles au pas du maillage h, la condition de stabilité est identique à celle obtenue en considérant le système de Maxwell classique. Pour de telles valeurs de α et δ, on introduit aucune contrainte supplémentaire

sur le pas de temps Δt en considérant la formulation (MV) du système de Maxwell. D'autre part, nous avons observé que la résolution de la formulation (MV) induit un coût calcul supplémentaire d'environ 6% par rapport à la résolution des équations de Maxwell classiques. Nous avons également établi les équations équivalentes ce qui nous a permis de montrer pourquoi la formulation (MV) du système de Maxwell permet de mieux vérifier numériquement les relations de divergence $div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$ et $div\mathbf{B} = 0$.

Première partie

Modèles B.G.K. . Résolution et analyse numérique

Chapitre 1

Introduction

Pour décrire l'évolution d'un système de particules, il y a essentiellement trois niveaux de description.

- Le niveau fondamental: On écrit les relations fondamentales de la dynamique pour chaque particule du système considéré. Ce modèle est évidemment le plus précis mais il est également trop coûteux, pour les simulations, du fait du très grand nombre de particules. Faisons un rapide calcul d'ordre de grandeur: dans $1\,m^3$ de gaz et dans des conditions normales de température et de pression il y a environ 10^{25} particules.
- Modèle fluide: On décrit le gaz par des moyennes dans un petit volume V petit par rapport à l'échelle du problème mais grand par rapport aux distances moléculaires. Les quantités décrivant le gaz, la densité, la vitesse et la température sont déterminées par les équations d'Euler ou de Navier-Stokes suivant les cas. Néanmoins, lorsque le milieu ambiant est à faible densité, c'est à dire lorsque le libre parcours moyen devient grand comparé à une longueur caractéristique à l'échelle macroscopique, ce modèle n'est plus valable. C'est notamment le cas lorsque l'on s'intéresse à un engin spatial lors de la phase de rentrée dans l'atmosphère.
- Modèle cinétique: On considère le gaz comme étant une conglomération de particules plutôt qu'un continuum. L'approche cinétique conduit à déterminer une densité de particules, solution d'une équation integro-différentielle: l'équation de Boltzmann. Cependant l'équation de Boltzmann, même dans les cas les plus simples, est difficile à résoudre que ce soit analytiquement ou numériquement. C'est la raison pour laquelle des modèles simplifiés ont été proposés. Nous allons considérer dans cette partie un de ces modèles, historiquement le premier, le modèle B.G.K. (Bhatnagar, Gross et Krook), [3].

Le modèle B.G.K. pour l'équation de Boltzmann est un modèle cinétique simplifié pour décrire l'évolution d'un gaz. En dépit de sa relative simplicité, ce modèle contient la plupart des propriétés fondamentales de la dynamique des fluides telles que la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie [7]. C'est la raison pour laquelle les équations de type B.G.K. sont couramment utilisées, depuis le milieu des années soixante [25], afin de tester des méthodes numériques pour des équations cinétiques.
Les équations cinétiques sont généralement résolues numériquement par une approche probabiliste, plus précisément par des méthodes de Monte-Carlo [5]. Récemment des

approches déterministes ont été proposées. C'est ce type d'approche que nous allons considérer par la suite.
La plupart des calculs numériques qu'on trouve dans la littérature sont basés sur des méthodes de différences finies [19]. Des méthodes différentes ont été récemment proposées [6] et [20] pour l'équation de Boltzmann où les termes de collision sont approchés par une méthode de quadrature sur une grille fixe dans l'espace des vitesses. Nous allons utiliser, pour résoudre l'équation B.G.K., une méthode particulaire déterministe qui peut être étendue à l'équation de Boltzmann. Cette méthode, introduite par S. Mas-Gallic [21], nous permet de considérer des géométries complexes, de plus la convection des particules n'introduit aucune diffusion numérique.
Le plan de cette partie qui comprend cinq chapitres est le suivant:
Dans le chapitre 2, nous rappellerons l'équation de Boltzmann, présenterons de façon détaillée le modèle B.G.K. et effectuerons l'adimensionnement de l'équation B.G.K..
Dans le chapitre suivant, nous présenterons la méthode particulaire déterministe utilisée et nous proposerons différents schémas d'intégration temporelle.
Dans le chapitre 4, nous présenterons des résultats numériques permettant de valider la méthode proposée. Nous considérerons plus précisément l'écoulement d'un gaz raréfié sur une plaque plane.
Le chapitre 5 est consacré à l'analyse mathématique du modèle B.G.K. et à l'analyse théorique de la convergence de la méthode proposée. Dans un premier temps, nous démontrerons, en utilisant des résultats de B. Perthame et M. Pulvirenti [28], l'existence de solutions régulières pour le modèle B.G.K.. Puis nous utiliserons ces résultats afin de démontrer la convergence de la méthode particulaire.
Dans le dernier chapitre nous nous intéresserons au calcul parallèle. En effet les méthodes particulaires peuvent nécessiter un nombre relativement important de particules d'où un coût calcul important. L'utilisation de calculateurs massivement parallèles peut ainsi permettre de réduire de façon sensible ce coût calcul. Nous présenterons des résulats de performance obtenus sur ce type de machimes et les comparerons à ceux obtenus sur un Cray-YMP.

Chapitre 2

Modèle mathématique

2.1 Equation de Boltzmann

Au niveau moléculaire, un gaz est décrit en déterminant la trajectoire de chaque molécule en tenant compte des interactions avec les autres molécules. Une grandeur importante est le libre parcours moyen λ d'une particule, c'est à dire la distance que parcourt en moyenne une particule du gaz sans subir de collision. Dans des conditions normales de température et de pression, λ est de l'ordre de $10^{-5}\,m$, soit 10 microns. Cette longueur est beaucoup plus petite que la longueur caractéristique des objets généralement étudiés, comme un avion. Néanmoins, à haute altitude, l'atmosphère est beaucoup plus diluée, et la quantité λ peut devenir grande devant une longueur caractéristique d'un objet étudié.

Comportement du libre parcours moyen à haute altitude

Soit un objet rentrant dans l'atmosphère d'une taille de l'ordre de $L \approx 10\,m$. On considère en général que le libre parcours moyen λ dans l'atmosphère évolue avec l'altitude h de la manière suivante:

- Pour $h \geq$ une centaine de kilomètres: $\lambda \gg L$.
- Pour h tel que: une dizaine de km $\leq h \leq$ une centaine de km: $\lambda \approx h$.
- Pour $h \leq$ une dizaine de kilomètres: $\lambda \ll L$.

Les trois zones de l'atmosphère correspondent à des régimes physiques très différents. Les équations vérifiées par les quantités relatives au gaz ont également des propriétés mathématiques très différentes.

La description adoptée lors du régime intermédiaire est dite “cinétique”. L'équation typique qui lui est associée est l'équation de Boltzmann. Dans cette équation, on peut mettre en facteur le paramètre $\frac{\lambda}{L}$. Les régimes $\lambda \gg L$ et $\lambda \ll L$ peuvent alors être décrits par des équations obtenues comme limite de l'équation de Boltzmann.

Considérons un gaz formé d'une seule espèce de particule. On appelle description cinétique de ce gaz l'étude de la quantité $f(t,\mathbf{x},\mathbf{v})$, densité de particules qui au temps t et au point $\mathbf{x}$, possèdent la vitesse $\mathbf{v}$. Cette quantité étant une densité, elle vérifiera toujours:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}) \geq 0 \tag{2.1}$$

Cas où $\lambda \gg L$

Dans ce cas, on peut négliger l'influence des collisions entre les particules. Si de plus, le gaz n'est soumis à aucune force extérieure, l'équation vérifiée par la fonction de distribution f est la suivante:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f \;=\; 0$$

Cas où $\lambda \approx L$

Il faut alors tenir compte des collisions entre les particules de ce gaz. La fonction de distribution f est solution de l'équation de Boltzmann [7]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f \;=\; C(f)$$

où C est l'opérateur de collision.
Si on suppose de plus que:

- Les particules n'ont pas de charge électrique.
- Le gaz est monoatomique: les particules ont uniquement trois degrés de liberté qui sont les composantes de la vitesse.
- Les collisions faisant intervenir plus de deux particules peuvent être négligées.
- Les collisions sont élastiques: conservation de l'énergie cinétique lors des collisions.

Alors l'opérateur de collision est local en espace, quadratique et s'écrit:

$$C(f) \;=\; Q(f,f) \;=\; \int_{I\!R^3 \times S^2} (f^{'} f^{'}_{*} - f f_{*}) q(\mid \mathbf{v} - \mathbf{v}_{*} \mid, \mathbf{n})\, d\mathbf{v}_{*} d\mathbf{n}$$

où q est la section efficace de collision qui dépend du modèle de collision choisi et:

$$f = f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}) \quad , \quad f_{*} = f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}_{*}) \quad , \quad f^{'} = f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}^{'}) \quad , \quad f^{'}_{*} = f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}^{'}_{*})$$

$\mathbf{v}^{'}$ et $\mathbf{v}^{'}_{*}$ sont les vitesses après collision entre deux particules de vitesse $\mathbf{v}$ et $\mathbf{v}_{*}$ et sont déterminées par les relations:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}^{'} \;=\; \mathbf{v} + ((\mathbf{v}_{*} - \mathbf{v}).\mathbf{n})\, \mathbf{n} \\ \mathbf{v}^{'}_{*} \;=\; \mathbf{v}_{*} - ((\mathbf{v}_{*} - \mathbf{v}).\mathbf{n})\, \mathbf{n} \end{array} \right.$$

Concernant l'opérateur de collision on a le résultat suivant:

$$\int_{I\!R^3} Q(f,f) \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \dfrac{\mid \mathbf{v} \mid^2}{2} \end{pmatrix} d\mathbf{v} \;=\; 0 \tag{2.2}$$

Ces relations signifient que la masse, l'impulsion et l'énergie sont conservées au cours d'une collision.

On peut alors montrer que:

$$\begin{aligned}
\int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(t,\mathbf{x},\mathbf{v})\,d\mathbf{v}d\mathbf{x} &= \int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(0,\mathbf{x},\mathbf{v})\,d\mathbf{v}d\mathbf{x}\\
\int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(t,\mathbf{x},\mathbf{v})\mathbf{v}\,d\mathbf{v}d\mathbf{x} &= \int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(0,\mathbf{x},\mathbf{v})\mathbf{v}\,d\mathbf{v}d\mathbf{x}\\
\int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(t,\mathbf{x},\mathbf{v})\frac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2}\,d\mathbf{v}d\mathbf{x} &= \int_{I\!R^3\times I\!R^3} f(0,\mathbf{x},\mathbf{v})\frac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2}\,d\mathbf{v}d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

Ces trois dernières égalités expriment la conservation de la masse, l'impulsion et l'énergie pour la solution de l'équation de Boltzmann.

Cas où $\lambda \ll L$

Dans ce cas une description cinétique du gaz ne s'avère pas nécessaire. L'état du gaz peut être déterminé à l'aide des moments de la fonction de distribution f:

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{U} \\ E \end{pmatrix} = \int_{I\!R^3} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \frac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2} \end{pmatrix} f\,d\mathbf{v}$$

où $\rho = \rho(t,\mathbf{x})$, $\mathbf{U} = \mathbf{U}(t,\mathbf{x})$ et $E = E(t,\mathbf{x})$ désignent respectivement la densité, la vitesse moyenne et l'énergie. On cherche les équations vérifiées par ces quantités, on parlera alors de modèle fluide.

On présente maintenant de façon succinte le passage de l'équation de Boltzmann aux équations d'Euler. Ceci nous servira par la suite afin de valider notre méthode de résolution de l'équation de Boltzmann. Pour ce faire nous utilisons un développement de Hilbert qui consiste à introduire un petit paramètre ϵ dans l'équation de Boltzmann:

$$\frac{\partial f_\epsilon}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f_\epsilon = \frac{1}{\epsilon}Q(f_\epsilon,f_\epsilon) \tag{2.3}$$

et à étudier la limite de f_ϵ lorsque ϵ tend vers 0. Ce paramètre ϵ est en fait proportionnel au rapport $\frac{\lambda}{L}$, donc $\epsilon \to 0$ correspond au cas $\lambda \ll L$.

On rappelle alors que formellement:

La fonction f_ϵ tend, lorsque $\epsilon \to 0$, vers une fonction f qui est une Maxwellienne locale donnée par:

$$f = \frac{\rho}{(2\pi\frac{kT}{m})^{\frac{3}{2}}}\exp\Big(-\frac{|\,\mathbf{v}-\mathbf{U}\,|^2}{2\frac{kT}{m}}\Big)$$

et les fonctions ρ,$\rho\mathbf{U}$ et $E = \rho(\frac{|\,\mathbf{U}\,|^2}{2} + \frac{3}{2}\frac{kT}{m})$ sont solutions des équations d'Euler compressible.

Pour une justification mathématique du résultat précédent on pourra se référer à [1]. Dans l'expression précédente, k est la constante de Boltzmann, m la masse d'une particule et T est la température. De même en utilisant l'expansion de Chapman-Enskog, on retrouve les équations de Navier-Stokes à partir de l'équation de Boltzmann.

2.2 Le modèle B.G.K.

A cause de la structure complexe de l'opérateur de collision Q, des termes de collision plus simples ont été proposés. L'idée consiste à considérer un opérateur de collision J plus simple qui conserve la plupart des propriétés fondamentales de l'opérateur Q, à savoir:

$$\int_{I\!R^3} J(f) \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \dfrac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2} \end{pmatrix} d\mathbf{v} \;=\; 0$$

c'est à dire la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie au cours des collisions. Un choix pour J qui vérifie ces propriétés consiste à supposer que la variation de la fonction de distribution f au cours de collisions est proportionnelle à la différence $f - M$, où la Maxwellienne M est la fonction de distribution à l'équilibre qui a été définie précédemment. En posant:

$$J(f) \;=\; \frac{1}{\tau}(M(f) - f) \tag{2.4}$$

on obtient le modèle B.G.K. (proposé par Bhatnagar, Gross et Krook vers la fin des années 50) [3]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_x f = J(f) \quad \text{avec} \quad M(f) \;=\; \frac{\rho}{(2\pi\frac{kT}{m})^{\frac{3}{2}}} \exp\Big(-\frac{|\,\mathbf{v} - \mathbf{U}\,|^2}{2\frac{kT}{m}}\Big) \tag{2.5}$$

où τ est un temps de relaxation et est relié au libre parcours moyen λ par la relation: $\lambda = \tau\bar{v}$ où $\bar{v}$ est une vitesse caractéristique des particules. Par la suite, nous noterons (BGK), le modèle B.G.K. (2.4,2.5).

Gaz polyatomiques

Le modèle précédent décrit l'évolution d'un gaz monoatomique. Dans le cas de molécules constituées de plusieurs atomes, il faut tenir compte de l'énergie de rotation dans la définition de l'énergie interne, [27, 29]. La fonction de distribution f dépend alors de l'énergie interne I, $f \;=\; f(t,\mathbf{x},\mathbf{v},I)$. On va considérer un nouvel opérateur de collision J_p défini par:

$$J_p(f) \;=\; \frac{1}{\tau}(M_p(f) - f)$$

La Maxwellienne M est remplacée par une autre fonction M_p donnée par:

$$M_p(f) \;=\; \frac{\rho}{\alpha(\frac{kT}{m})^{\frac{3}{2}+\frac{1}{\delta}}} \exp\Big(-\frac{|\,\mathbf{v} - \mathbf{U}\,|^2}{2\frac{kT}{m}} - \frac{I^\delta}{\frac{kT}{m}}\Big)\;,\; \alpha = \int_{I\!R^3\times I\!R^+} \exp\Big(-\Big(\frac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2} + I^\delta\Big)\Big)\, d\mathbf{v}dI$$

I représente l'énergie interne associée au mode de rotation et δ est défini par:

$$\delta \;=\; \frac{2(\gamma - 1)}{2 - 3(\gamma - 1)}$$

où γ est le rapport des chaleurs spécifiques. Les moments de la fonction de distribution f sont alors définis par:

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{U} \\ E \end{pmatrix} = \int_{I\!R^3\times I\!R^+} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \dfrac{|\mathbf{v}|^2}{2} + I^\delta \end{pmatrix} f\, d\mathbf{v} dI$$

Nous utiliserons cette extension dans les simulations numériques que nous présenterons plus tard.

2.3 Adimensionnement

D'un point de vue pratique, la résolution d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. Pour adimensionner ces équations, on introduit des grandeurs de référence (indicées par $_*$).

t_*: temps (en seconde: s)
x_*: longueur (en mètre: m)
v_*: vitesse des particules (en mètre par seconde: m/s)
f_*: densité de particules (en $kg\, s^3/m^6$)
ρ_*: masse volumique (en kg/m^3)
U_*: vitesse (en mètre par seconde: m/s)
E_*: énergie (en Joule: J)
T_*: température (en Kelvin: K)

Cela revient à poser $\overline{t} = \dfrac{t}{t_*}$,... (les quantités $^-$ étant sans dimension) et à les reporter au niveau du modèle (BGK):

$$\frac{\partial\overline{f}}{\partial\overline{t}} + \frac{v_* t_*}{x_*}\overline{\mathbf{v}}.\nabla_{\overline{\mathbf{x}}}\overline{f} = \frac{t_*}{\tau f_*}(M(f_*\overline{f}) - f_*\overline{f}) \tag{2.6}$$

Il nous reste à préciser $M(f_*\overline{f})$, un rapide calcul va nous montrer que: $M(f_*\overline{f}) = f_* M(\overline{f})$. En effet:

$$M(f_*\overline{f}) = M(f) = \frac{\rho}{(2\pi\frac{kT}{m})^{\frac{3}{2}}}\exp(-\frac{|\mathbf{v}-\mathbf{U}|^2}{2\frac{kT}{m}})$$

avec:

- $\rho = \int_{I\!R^3} f\, d\mathbf{v} = f_* v_*^3 \int_{I\!R^3} \overline{f}\, d\overline{\mathbf{v}} = \rho_*\overline{\rho}$ où: $\rho_* = f_* v_*^3$.
- $\rho\mathbf{U} = \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f\, d\mathbf{v} = f_* v_*^4 \int_{I\!R^3} \overline{\mathbf{v}}\overline{f}\, d\overline{\mathbf{v}} = (\rho U)_*\overline{\rho\mathbf{U}}$ où: $(\rho U)_* = f_* v_*^4$, d'où: $U_* = \dfrac{(\rho U)_*}{\rho_*} = v_*$.
- $E = \int_{I\!R^3} \dfrac{|\mathbf{v}|^2}{2} f\, d\mathbf{v} = f_* v_*^5 \int_{I\!R^3} \dfrac{|\overline{\mathbf{v}}|^2}{2}\overline{f}\, d\overline{\mathbf{v}} = E_*\overline{E}$ avec: $E_* = f_* v_*^5$, or: $E = E_*\overline{E} = \rho(\dfrac{|\mathbf{U}|^2}{2} + \dfrac{3}{2}\dfrac{kT}{m}) = \rho_*\overline{\rho}(U_*^2\dfrac{|\overline{\mathbf{U}}|^2}{2} + \dfrac{3}{2}\dfrac{kT_*}{m}\overline{T})$. En utilisant la

définition de ρ_*,U_* et E_* on obtient: $f_* v_*^5 \overline{E} = f_* v_*^5 (\frac{|\overline{\mathbf{U}}|^2}{2} + \frac{3}{2}\frac{kT_*}{mv_*^2}\overline{T})$.

On choisit alors: $T_* = \frac{mv_*^2}{k}$ et on obtient: $\overline{E} = \overline{\rho}(\frac{|\overline{\mathbf{U}}|^2}{2} + \frac{3}{2}\overline{T})$.

Avec un tel choix pour ρ_*,U_*,E_* et T_* on obtient:

$$M(f) = M(f_*\overline{f}) = f_* \frac{\overline{\rho}}{(2\pi\overline{T})^{\frac{3}{2}}} \exp(-\frac{|\overline{\mathbf{v}} - \overline{\mathbf{U}}|^2}{2\overline{T}}) = f_* M(\overline{f})$$

L'équation (2.6) s'écrit alors:

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{t}} + \frac{v_* t_*}{x_*}\overline{\mathbf{v}}.\nabla_{\overline{\mathbf{x}}}\overline{f} = \frac{t_*}{\tau}(M(\overline{f}) - \overline{f})$$

En imposant $x_* = v_* t_*$, on obtient:

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{t}} + \overline{\mathbf{v}}.\nabla_{\overline{\mathbf{x}}}\overline{f} = \frac{t_*}{\tau}(M(\overline{f}) - \overline{f})$$

On pose: $\overline{\tau} = \frac{\tau}{t_*}$, $\overline{\tau}$ s'interprétant comme un temps de relaxation relatif à une échelle de temps. Le modèle B.G.K. pour l'équation de Boltzmann, sous forme adimensionnée, s'écrit alors (en supprimant la notation $^-$):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f = \frac{1}{\tau}(M(f) - f) \tag{2.7}$$

avec:

$$M(f) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{3}{2}}} \exp(-\frac{|\mathbf{v} - \mathbf{U}|^2}{2T}) \tag{2.8}$$

et:

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{U} \\ E = \rho(\frac{|\mathbf{U}|^2}{2} + \frac{3}{2}T) \end{pmatrix} = \int_{I\!R^3} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} \end{pmatrix} f\, d\mathbf{v} \tag{2.9}$$

Par la suite, nous considèrerons le problème (2.7,2.8,2.9) que nous noterons encore de façon abrégée (BGK).

Chapitre 3

Approximation numérique

Dans cette partie nous allons présenter l'approximation numérique utilisée pour résoudre le problème (BGK).

3.1 Méthode particulaire

Description de la méthode

Soit $I \subset \mathbb{Z}^6$ un ensemble d'indices. On se donne un ensemble de points $\{(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0), i \in I\}$ dans l'espace des phases $\mathbb{R}^6$ et un ensemble de poids $w_i > 0$.
On considère l'opérateur du premier ordre:

$$\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}}$$

Soit $t \to (\mathbf{x}(t,\mathbf{x}^0,\mathbf{v}^0),\mathbf{v}(t,\mathbf{x}^0,\mathbf{v}^0))$ la courbe caractéristique associée à cet opérateur, solution du système différentiel:

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \mathbf{v}\,, & \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0 \\ \dfrac{d\mathbf{v}}{dt}(t) = 0\,, & \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}^0 \end{cases}$$

La solution de ce système est donnée par:

$$\mathbf{x}(t,\mathbf{x}^0,\mathbf{v}^0) = \mathbf{x}^0 + \mathbf{v}t\,, \quad \mathbf{v}(t,\mathbf{x}^0,\mathbf{v}^0) = \mathbf{v}^0$$

On pose maintenant:

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}(t,\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0), \qquad \mathbf{v}_i(t) = \mathbf{v}(t,\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) = \mathbf{v}_i^0$$

La méthode consiste à déterminer les fonctions $(f_i(t))_{i\in I}$ de telle façon que la mesure:

$$f_h = \sum_{i\in I} w_i f_i(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)) \tag{3.1}$$

où δ est la mesure de Dirac, soit une approximation de la solution f au sens des mesures. Nous allons maintenant déterminer le système différentiel vérifié par les fonctions $f_i(t)$.

Construction du système différentiel

Soit une fonction $g \in C^0(I\!R^6)$, on définit une approximation particulaire de g en posant:

$$(\pi_h(t)g)(\mathbf{x},\mathbf{v}) \;=\; \sum_{i\in I} w_i g(\mathbf{x}_i(t),\mathbf{v}_i(t))\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t))$$

Il nous faut maintenant définir une approximation particulaire de l'opérateur de collision $J(f) = M(f) - f$. Pour ce faire, il faut déterminer une approximation des quantités ρ,$\rho\mathbf{U}$ et E, obtenues par intégration de la fonction f dans l'espace des vitesses, qui définissent la Maxwellienne $M(f)$, (voir (2.8,2.9)).
On définit alors un opérateur K de $L^\infty(I\!R^3; L^1(I\!R^3))$ dans $L^\infty(I\!R^3)$ en posant:

$$K\,g(\mathbf{x}) \;=\; \int_{I\!R^3} g(\mathbf{x},\mathbf{v})\,d\mathbf{v}$$

Ainsi, pour une fonction $g \in C^0(I\!R^6)$, la mesure:

$$(P_h(t)K\,g)(\mathbf{x}) \;=\; \sum_{i\in I} w_i g(\mathbf{x}_i(t),\mathbf{v}_i(t))\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))$$

est une approximation de $K\,g$ au sens des mesures. Nous allons maintenant définir une approximation de $K\,g$ dans un sens plus classique. Pour ce faire, on introduit une fonction ζ qui vérifie les propriétés suivantes:

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I\!R^3} \zeta(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} = 1 \\ \displaystyle\int_{I\!R^3} \mathbf{x}^l\zeta(\mathbf{x})\,d\mathbf{x} = 0 \qquad 1 \leq \mid l \mid \leq r-1 \;\;;\;\; r \geq 2 \\ \displaystyle\int_{I\!R^3} \mid \mathbf{x} \mid^r \,\mid \zeta(\mathbf{x}) \mid\,d\mathbf{x} < +\infty \end{cases}$$

Et pour $\epsilon > 0$, on pose:

$$\zeta_\epsilon(\mathbf{x}) \;=\; \frac{1}{\epsilon^3}\zeta(\frac{\mathbf{x}}{\epsilon})$$

On introduit l'opérateur intégral K^ϵ qui est une version régularisée de l'opérateur K:

$$K^\epsilon\,g(\mathbf{x}) \;=\; \int_{I\!R^6} g(\mathbf{x},\mathbf{v})\zeta_\epsilon(\mathbf{x}-\mathbf{y})\,d\mathbf{v}d\mathbf{y}, \qquad g \in C^0(I\!R^6)$$

On introduit la formule de quadrature associée aux points $(\mathbf{x}_i,\mathbf{v}_i)$ et aux poids w_i:

$$\int_{I\!R^6} g(\mathbf{x},\mathbf{v})\,d\mathbf{x}d\mathbf{v} \simeq \sum_{i\in I} w_i g(\mathbf{x}_i(t),\mathbf{v}_i(t))$$

On définit alors une approximation de l'opérateur K^ϵ de la façon suivante:

$$K^\epsilon\,g(\mathbf{x}) \;\simeq\; \sum_{i\in I} w_i g(\mathbf{x}_i(t),\mathbf{v}_i(t))\zeta_\epsilon(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))$$

On peut ainsi déduire une approximation des quantités ρ,$\rho\mathbf{U}$ et E:

$$\begin{pmatrix} \rho_h^\epsilon(t,\mathbf{x}) \\ (\rho\mathbf{U})_h^\epsilon(t,\mathbf{x}) \\ E_h^\epsilon(t,\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \sum_{i\in I} w_i \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v}_i \\ \frac{|\mathbf{v}_i|^2}{2} \end{pmatrix} f_i(t)\, \zeta_\epsilon\,(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))$$

Par la suite, nous supposerons que la fonction ζ est à support compact dans $]-1,1[^3$. Par conséquent les particules intervenant dans le calcul des quantités macroscopiques $\rho_h^\epsilon(t,\mathbf{x})$,$(\rho\mathbf{U})_h^\epsilon(t,\mathbf{x})$,$E_h^\epsilon(t,\mathbf{x})$ sont celles situées dans le cube de centre $\mathbf{x}$ et de côté 2ϵ. Nous utiliserons cette propriété de la fonction ζ dans le chapitre concernant le calcul massivement parallèle.
En posant:

$$M_i^{\epsilon,h}(t) = \frac{\rho_h^\epsilon(t,\mathbf{x}_i(t))}{(2\pi T_h^\epsilon(t,\mathbf{x}_i(t)))^{\frac{3}{2}}} \exp(-\frac{|\mathbf{v}_i(t)-\mathbf{U}_h^\epsilon(t,\mathbf{x}_i(t))|^2}{2T_h^\epsilon(t,\mathbf{x}_i(t))})$$

on obtient une approximation particulaire M_h^ϵ de la Maxwellienne M:

$$M_h^\epsilon = \sum_{i\in I} w_i M_i^{\epsilon,h}(t)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t)) \tag{3.2}$$

On peut maintenant établir le système différentiel vérifié par les fonctions $f_i(t)$.
On rappelle que l'on cherche la mesure f_h, définie par (3.1), telle que:

$$\frac{\partial f_h}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_\mathbf{x} f_h = \frac{1}{\tau}(M_h^\epsilon - f_h)$$

La mesure f_h vérifie au sens des distributions sur $]0,T[\times I\!\!R^6$:

$$\frac{\partial f_h}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_\mathbf{x} f_h = \sum_{i\in I}\{\frac{d}{dt}(w_i f_i(t))\}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t))$$

En utilisant (3.2) et en identifiant les coefficients devant les mesures de Dirac, on obtient le système différentiel vérifié par les fonctions $f_i(t)$:

$$\begin{cases} \frac{d\,f_i}{dt}(t) = \frac{1}{\tau}(M_i(t) - f_i(t)) \\ f_i(0) = f_0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{cases} \tag{3.3}$$

où l'on a noté $M_i(t) = M_i^{\epsilon,h}(t)$. On remarque également que $M_i(t)$ dépend des fonctions $f_j(t)$ où $j \in I$.
Nous allons maintenant proposer des schémas d'intégration temporelle pour l'équation (3.3).

3.2 Intégration en temps

3.2.1 Schémas de Runge-Kutta

On commence par étudier des schémas de Runge-Kutta pour la résolution numérique de l'équation (3.3). Ce travail a été réalisé en commun avec M. Tolentino.

Rappels

On considère une équation différentielle du premier ordre:

$$\frac{dy}{dt}(t) = F(t,y(t)) \tag{3.4}$$

Un schéma de Runge-Kutta à q pas pour résoudre (3.4) s'écrit:

$$\begin{cases} t_{n,i} = t_n + c_i \Delta t & i = 1,\dots,q \\ y_{n,i} = y_n + \Delta t \displaystyle\sum_{j=1}^{q} a_{ij} F(t_{n,j},y_{n,j}) & i = 1,\dots,q \\ y_{n+1} = y_n + \Delta t \displaystyle\sum_{j=1}^{q} b_j F(t_{n,j},y_{n,j}) & \end{cases} \tag{3.5}$$

Une méthode de Runge-Kutta est entièrement définie lorsque l'on s'est donné q, la matrice A de coefficients a_{ij} et les vecteurs $(b_i)_{i=1,\dots,q}$ et $(c_i)_{i=1,\dots,q}$.
Nous n'allons considérer, dans cette étude, que des schémas explicites ce qui va entraîner: $a_{ij} = 0$ si $j \geq i$. On va également faire l'hypothèse suivante sur les coefficients:

$$c_i = \sum_j a_{ij} \tag{3.6}$$

Nous rappelons maintenant deux résultats concernant l'ordre d'un schéma de Runge-Kutta, [13].

Lemme 3.2.1 *Sous l'hypothèse (3.6), une condition nécéssaire et suffisante pour qu'un schéma de Runge-Kutta explicite à 2 pas soit d'ordre 2 s'écrit:*

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ b_2 a_{21} = \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

La condition précédente peut s'écrire sous la forme:

$$c_2 = a_{21} = \alpha \quad , \quad b_1 = 1 - \frac{1}{2\alpha} \quad , \quad b_2 = \frac{1}{2\alpha} \tag{3.7}$$

Lemme 3.2.2 *Sous l'hypothèse (3.6), une condition nécéssaire et suffisante pour qu'un schéma de Runge-Kutta explicite à 3 pas soit d'ordre 3 s'écrit:*

$$\begin{cases} b_1 + b_2 + b_3 = 1 \\ b_2 a_{21} + b_3 (a_{31} + a_{32}) = \dfrac{1}{2} \\ b_2 a_{21}^2 + b_3 (a_{31} + a_{32})^2 = \dfrac{1}{3} \\ b_3 a_{32} a_{21} = \dfrac{1}{6} \end{cases}$$

La condition précédente peut s'écrire sous la forme:

$$\left\{\begin{array}{l} c_2 = u \quad , \quad c_3 = v \\ b_1 = 1 - b_2 - b_3 \quad , \quad b_2 = \dfrac{2-3v}{6u(u-v)} \quad , \quad b_3 = \dfrac{2-3u}{6v(v-u)} \\ a_{21} = u \quad , \quad a_{31} = c_3 - a_{32} \quad , \quad a_{32} = \dfrac{v(v-u)}{u(2-3u)} \end{array}\right. \tag{3.8}$$

Nous rappelons que la solution du modèle B.G.K. est une densité, elle est donc positive. Les schémas de Runge-Kutta, appliqués au système (3.3) devront conserver cette propriété. Plus précisément:

Définition 3.2.1 *On dira qu'un schéma, pour la résolution du système (3.3) préserve la positivité si:*

$$\forall n \geq 0, \qquad (f_i^n > 0)_{i\in I} \Rightarrow (f_i^{n+1} > 0)_{i\in I} \tag{3.9}$$

Nous allons maintenant établir les conditions sur les coefficients de Runge-Kutta pour que les schémas de Runge-Kutta explicites d'ordre 2 et 3 préservent la positivité de la solution. Puis nous montrerons pour chacun des deux schémas qu'il existe de tels coefficients.

Schéma de Runge-Kutta précis à l'ordre 2

Le schéma de Runge-Kutta d'ordre 2, appliqué au système (3.3), s'écrit, en tenant compte des conditions (3.7) et en posant $\kappa = \dfrac{\Delta t}{\tau}$:

$$\left\{\begin{array}{l} f_i^{n,1} = f_i^n \\ f_i^{n,2} = (1-\kappa\alpha)f_i^n + \kappa\alpha M_i^n \\ f_i^{n+1} = (1-\kappa+\dfrac{\kappa^2}{2})f_i^n + \kappa(1-\dfrac{1}{2\alpha}-\dfrac{\kappa}{2})M_i^n + \dfrac{\kappa}{2\alpha}M_i^{n,2} \end{array}\right. \tag{3.10}$$

A ce niveau, le problème majeur est qu'on ne connait pas le signe de $M_i^n - f_i^n$. Pour que le schéma préserve la positivité de la solution, on va imposer que chaque terme, dans le membre de droite de (3.10), soit positif c'est à dire:

$$\left\{\begin{array}{l} 1-\kappa\alpha \geq 0 \\ \alpha \geq 0 \\ 1-\kappa+\dfrac{\kappa^2}{2} \geq 0 \\ 1-\dfrac{1}{2\alpha}-\dfrac{\kappa}{2} \geq 0 \end{array}\right.$$

Ce sont bien évidemment des conditions suffisantes pour assurer la positivité de la solution. Les couples (α,κ) solutions de ce système vérifient:

$$\alpha \geq \frac{1}{2} \quad , \quad \kappa \leq \min(2-\frac{1}{\alpha},\frac{1}{\alpha}) \leq 2 \tag{3.11}$$

On a ainsi montré l'existence de coefficients de Runge-Kutta tels que le schéma soit d'ordre 2 et préserve la positivité de la solution. On remarque que $\kappa = \dfrac{\Delta t}{\tau} \leq 2$, donc si l'on considère des temps de relaxation τ très petits on aura une contrainte très forte sur le pas de temps Δt.

Schéma de Runge-Kutta précis à l'ordre 3

Le schéma de Runge-Kutta d'ordre 3, appliqué au système (3.3), s'écrit, en posant $\kappa = \dfrac{\Delta t}{\tau}$:

$$
\left\{
\begin{array}{rl}
f_i^{n,1} &= f_i^n \\
f_i^{n,2} &= (1-\kappa a_{21})f_i^n + \kappa a_{21} M_i^n \\
f_i^{n,3} &= (1-\kappa(a_{31}+a_{32})+\kappa^2 a_{32}a_{21})f_i^n + (\kappa a_{31} - \kappa^2 a_{32}a_{21})M_i^n + \kappa a_{32} M_i^{n,2} \\
f_i^{n+1} &= (1-\kappa+\kappa^2(b_2 a_{21} + b_3(a_{31}+a_{32})) - \kappa^3 b_3 a_{32} a_{21}) f_i^n + \\
& \quad (\kappa b_1 - \kappa^2(b_2 a_{21} + b_3 a_{31}) + \kappa^3 b_3 a_{32} a_{21}) M_i^n + (\kappa b_2 - \kappa^2 b_3 a_{32}) M_i^{n,2} + \kappa b_3 M_i^{n,3}
\end{array}
\right.
\tag{3.12}
$$

Pour assurer la positivité de la solution, on va imposer que chaque terme dans le membre de droite de (3.12) soit positif. On obtient, en exprimant les coefficients de Runge-Kutta à l'aide de deux paramètres u et v, voir (3.8), les conditions suivantes:

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
1-\kappa u \geq 0 & (i) \\
u \geq 0 & (2i) \\
1 - \kappa v + \kappa^2 \dfrac{v(v-u)}{2-3u} \geq 0 & (3i) \\
v(1 - \dfrac{(v-u)(1+\kappa u)}{u(2-3u)}) \geq 0 & (4i) \\
\dfrac{v}{u}\dfrac{v-u}{2-3u} \geq 0 & (5i) \\
1 - \kappa + \dfrac{\kappa^2}{2} - \dfrac{\kappa^3}{6} \geq 0 & (6i) \\
1 - \dfrac{2-3v}{6u(u-v)} - \dfrac{2-3u}{6v(v-u)} - \kappa(\dfrac{2-3v}{6(v-u)} + \dfrac{2-3u}{6(v-u)} - \dfrac{1}{6u}) + \dfrac{\kappa^2}{6} \geq 0 & (7i) \\
\dfrac{1}{u}(\dfrac{2-3v}{u-v} - \kappa) \geq 0 & (8i) \\
\dfrac{2-3u}{v(v-u)} \geq 0 & (9i)
\end{array}
\right.
$$

Nous allons maintenant montrer que le système d'inéquations précédent admet des solutions.
Un calcul simple montre que l'inéquation $(6i)$est vérifiée pour:

$$\kappa \leq \kappa_* = (\sqrt{2}+1)^{\frac{1}{3}} - (\sqrt{2}+1)^{-\frac{1}{3}} + 1 \simeq 1.596$$

Nous allons distinguer trois cas: $v < 0$, $0 \leq v \leq u$ et $v > u$.

<u>Premier cas: $v < 0$</u>
De $(2i)$ on déduit que $v - u < 0$. Les inéquations $(5i)$ et $(9i)$ seront vérifiées si: $2 - 3u > 0$, mais alors $(4i)$ ne peut être satisfaite. On conclut donc que dans le cas $v < 0$, on ne peut trouver des couples (u,v) tels que le schéma de Runge-Kutta associé soit d'ordre 3 et préserve la positivité de la solution.

Deuxième cas: $0 \leq v \leq u$

De $(2i)$ on déduit que $v - u < 0$. Les inéquations $(5i)$ et $(9i)$ seront vérifiées si: $2 - 3u < 0$ soit $u > \frac{2}{3}$.

D'autre part: $0 \leq 1-\kappa u \leq 1-\kappa v$ et comme $\frac{v(v-u)}{2-3u} \geq 0$ d'aprés $(9i)$, l'inéquation $(3i)$ est vérifiée. De plus de (i) on déduit que: $u \leq \frac{1}{\kappa}$ et comme $u > \frac{2}{3}$ on a nécéssairement:

$$\frac{1}{\kappa} > \frac{2}{3} \Longrightarrow \kappa < \frac{3}{2} < \kappa_*$$

l'inéquation $(6i)$ est alors vérifiée. Nous avons donc montré que pour:
$u > \frac{2}{3}$,$\kappa < \frac{3}{2}$ et $1 - \kappa u \geq 0$ $(2i)$,$(3i)$,$(5i)$,$(6i)$ et $(9i)$ sont vérifiées.
Considérons maintenant $(4i)$ et $(8i)$ qui peuvent s'écrire sous la forme:

$$\begin{cases} v \leq \frac{2}{3-\kappa} - \frac{\kappa}{3-\kappa}u \\ v \geq \frac{3u-(3-\kappa)u^2}{1+\kappa u} \end{cases} \tag{3.13}$$

Appelons D_k la droite d'équation: $v = \frac{2}{3-\kappa} - \frac{\kappa}{3-\kappa}u$. La droite D_k passe par le point $(\frac{2}{3},\frac{2}{3})$ $\forall\kappa$, sa pente est toujours négative pour $\kappa < 3$ et a pour ordonnée à l'origine $\frac{2}{3-\kappa} < \frac{4}{3}$ pour $\kappa < \frac{3}{2}$.

Appelons H_k l'hyperbole d'équation: $v = \frac{3u-(3-\kappa)u^2}{1+\kappa u}$. H_k passe par les points $(0,0)$ et $(\frac{2}{3},\frac{2}{3})$ $\forall\,\kappa$ et a une asymtote oblique d'équation $v = -\frac{3-\kappa}{\kappa}u + \frac{2\kappa+3}{\kappa^2}$ et une asymptote verticale d'équation $u = -\frac{1}{\kappa}$. Un rapide calcul montre que:

$$\{(u,v) \in D_k \bigcap H_k\} = \{(\frac{2}{3},\frac{2}{3}),(u_k,v_k)\} \quad \text{avec} \quad u_k = \frac{1}{3-2\kappa} \; et \; v_k = \frac{6-5\kappa}{(3-\kappa)(3-2\kappa)}$$

On remarque que: $u_k < \frac{2}{3} \Longleftrightarrow \kappa < \frac{3}{4}$ et $u_k > \frac{2}{3} \Longleftrightarrow \kappa > \frac{3}{4}$.
Comme on cherche des valeurs de κ les plus grandes possibles, on va considérer le cas: $\kappa > \frac{3}{4}$ soit $u_k > \frac{2}{3}$. On représente en hachuré sur la figure 3.1 les solutions du système (3.13) avec la contrainte $u > \frac{2}{3}$.

Les solutions du système (3.13) peuvent s'écrire sous la forme:

$$u > \frac{1}{3-2\kappa} \quad \text{et} \quad \frac{2-\kappa u}{3-\kappa} > v > \frac{3u-(3-\kappa)u^2}{1+\kappa u} \tag{3.14}$$

Nous allons maintenant considérer l'inéquation $(7i)$ qui peut s'écrire sous la forme:

$$(\kappa^2 - 3\kappa + 6)uv - 3u - (3-\kappa)v + 2 \geq 0 \tag{3.15}$$

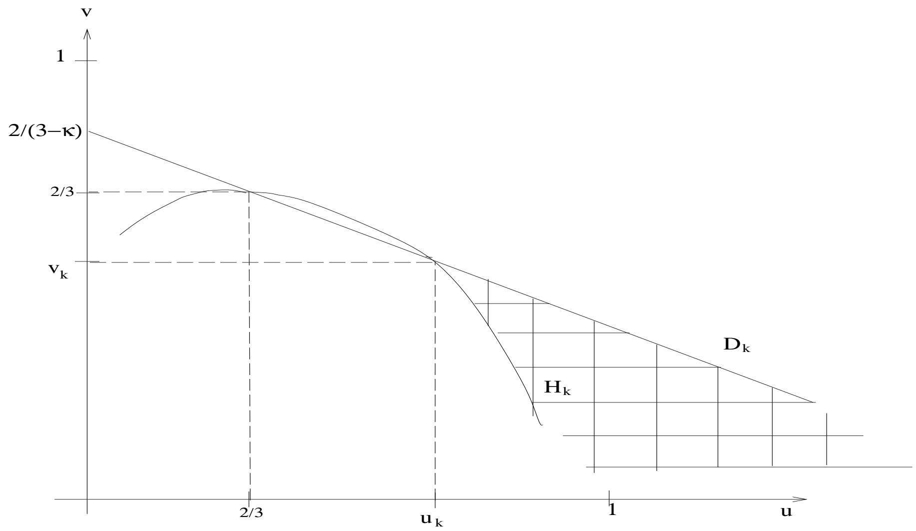


FIG. 3.1 – *Solutions du système (3.13)*

On appelle $\bar{H}_k$ l'hyperbole d'équation: $u = \dfrac{(3-\kappa)v-2}{(\kappa^2-3\kappa+6)v-3}$ d'asymptotes $u = \dfrac{3-\kappa}{\kappa^2-3\kappa+6}$ et $v = \dfrac{3}{\kappa^2-3\kappa+6}$.
On montre que:

$$\{(u,v) \ \in \ D_k \bigcap \bar{H}_k\} \ = \ (\bar{u_k},\bar{v_k}) \text{ avec } \begin{cases} \bar{u_k} \geq u_k \text{ si } \kappa \leq 1 \\ \bar{u_k} < u_k \text{ si } \kappa > 1 \end{cases}$$

On montre également que (u_k,v_k) vérifie (3.15) si et seulement si $\kappa \leq 1$. On en déduit que dans le cas $\kappa > 1$, le système $(i),\ldots,(9i)$ n'admet pas de solutions. Dans le cas $\dfrac{3}{4} < \kappa \leq 1$, les solutions du système $(i),\ldots,(9i)$ sont données par:

$$\begin{cases} \dfrac{2}{3} < u_k < u < \min(\bar{u_k},\dfrac{1}{\kappa}) \quad \text{et} \\ \max(\dfrac{3u-(3-\kappa u^2}{1+\kappa u},\dfrac{3u-2}{(\kappa^2-3\kappa+6)u-3+\kappa}) < v < \dfrac{2-\kappa u}{3-\kappa} \end{cases} \tag{3.16}$$

On représente graphiquement les solutions en hachuré sur la figure 3.2.
On a donc montré qu'il existait des couples (u,v) tels que le schéma de Runge-Kutta associé soit d'ordre 3 et préserve la positivité avec des valeurs de κ comprises entre $\dfrac{3}{4}$ et 1.
On donne les valeurs de (u,v) pour la plus grande valeur possible de κ, pour $\kappa = 1$ on obtient: $u = 1$, $v = \dfrac{1}{2}$.

<u>Troisième cas: $v > u$</u>
Une étude analogue montre que l'on peut trouver des coefficients de Runge-Kutta tels que le schéma soit d'ordre 3 et préserve la positivité pour $\kappa < \dfrac{3}{4}$.

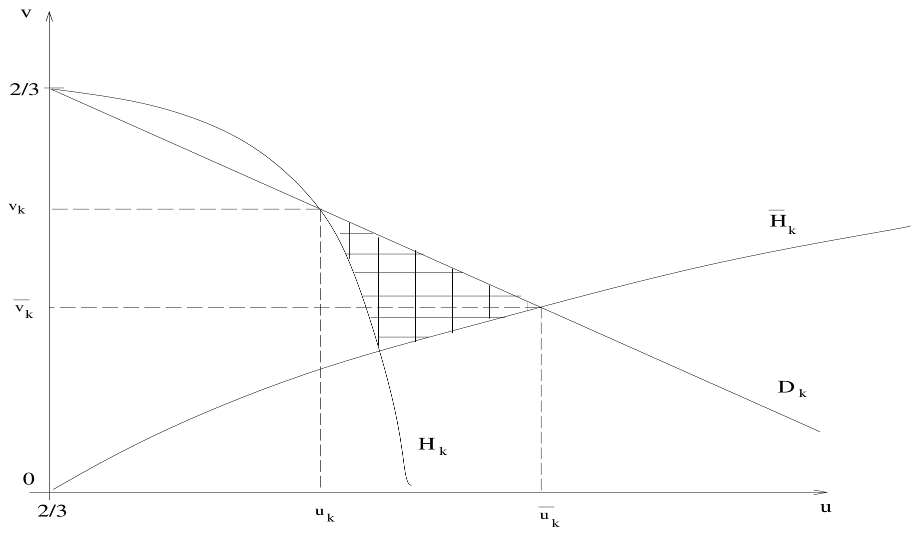


FIG. 3.2 – *Solutions du système* $(i),\ldots,(9i)$

Pour des raisons évidentes de temps calcul, on est intéressé par des valeurs de κ les plus grandes possibles. On a montré, dans le cas $0 < v < u$, que l'on pouvait trouver des couples (u,v) pour des valeurs de κ inférieures à 1. On voit ici clairement les limites de tels schémas pour des temps de relaxation τ très petits.

3.2.2 Schémas de Runge-Kutta appliqués à une nouvelle inconnue

Les conditions que nous avons imposées sur les coefficients de Runge-Kutta et le pas de temps Δt afin d'assurer la positivité de la solution viennent du fait que nous ne connaissons pas le signe de $M_i^n - f_i^n$. Nous proposons maintenant un changement d'inconnue de telle façon que le terme $M - f$ n'apparaisse plus.
Si l'on pose $g_i(t) = \exp(\frac{t}{\tau})f_i(t)$, le système différentiel (3.3) s'écrit:

$$\left\{\begin{aligned} \frac{d\,g_i}{dt}(t) &= \frac{1}{\tau}M_i(t)\exp(\frac{t}{\tau}) \\ g_i(0) &= f_i(0) = f_0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{aligned}\right. \tag{3.17}$$

Nous résolvons le système différentiel (3.17) à l'aide de schémas de Runge-Kutta.

Schémas de Runge-Kutta d'ordre 2

Le schéma de Runge-Kutta d'ordre 2, appliqué au système (3.17), s'écrit, en tenant compte des conditions (3.7) et en posant $\kappa = \frac{\Delta t}{\tau}$:

$$\left\{\begin{aligned} g_i^{n,1} &= g_i^n \\ g_i^{n,2} &= g_i^n + \kappa\alpha M_i^n \exp(\frac{t_n}{\tau}) \\ g_i^{n+1} &= g_i^n + \kappa\exp(\frac{t_n}{\tau})((1-\frac{1}{2\alpha})M_i^n + \frac{1}{2\alpha}M_i^{n,2}\exp(\kappa\alpha)) \end{aligned}\right.$$

Or $g_i^n = \exp(\frac{t_n}{\tau}) f_i^n$, le schéma d'intégration en temps pour résoudre le système (3.3) s'écrit alors:

$$\begin{cases} f_i^{n,1} &= f_i^n \\ f_i^{n,2} &= \exp(-\kappa\alpha)(f_i^n + \kappa\alpha M_i^n) \\ f_i^{n+1} &= \exp(-\kappa)(f_i^n + \kappa(1-\frac{1}{2\alpha})M_i^n + \frac{1}{2\alpha}M_i^{n,2}\exp(\kappa\alpha)) \end{cases} \tag{3.18}$$

On voit ici que pour préserver la positivité de la solution, il suffit de prendre $\alpha \geq \frac{1}{2}$. Il n'apparait ici aucune contrainte sur le pas de temps Δt.

Schémas de Runge-Kutta d'ordre 3

De façon identique, le schéma de Runge-Kutta à l'ordre 3 s'écrit, en tenant des compte des conditions données par le lemme 3.2.2:

$$\begin{cases} f_i^{n,1} &= f_i^n \\ f_i^{n,2} &= \exp(-c_2\kappa)(f_i^n + \kappa a_{21} M_i^n) \\ f_i^{n,3} &= \exp(-c_3\kappa)(f_i^n + \kappa a_{31} M_i^n + \kappa a_{32} M_i^{n,2}\exp(c_2\kappa)) \\ f_i^{n+1} &= \exp(-\kappa)(f_i^n + \kappa b_1 M_i^n + \kappa b_2 M_i^{n,2}\exp(c_2\kappa) + \kappa b_3 M_i^{n,3}\exp(c_3\kappa)) \end{cases} \tag{3.19}$$

Une condition suffisante pour que le schéma préserve la positivité consiste à prendre des coefficients de Runge-Kutta positifs. Nous avons donc trouvé des schémas d'intégration en temps pour le système (3.3) qui préservent la positivité tout en n'introduisant aucune contrainte sur le pas de temps Δt. Néanmoins de tels schémas ne nous permettent pas (pour des raisons de précision) de considérer des valeurs de κ très grandes, c'est à dire de petites valeurs du temps de relaxation τ. On va maintenant présenter un schéma nous permettant de considérer des valeurs de τ très petites sans contraintes sur le pas de temps Δt.

3.2.3 Schéma exponentiel

Le schéma que nous allons présenter sera bien adapté pour des temps de relaxation τ petits (régime collisionnel) et grands (transport libre). Il répond à deux critères essentiels: il reste stable pour des valeurs de τ grandes ou petites et il est explicite, ce qui conduit à un algorithme plus facilement parallélisable.
Ce schéma utilise l'expression semi-implicite de la solution du modèle B.G.K. à l'instant $t + \Delta t$ où Δt est le pas d'intégration en temps:

$$\begin{aligned} f(t+\Delta t,\mathbf{x},\mathbf{v}) &= f(t,\mathbf{x}-\Delta t\mathbf{v},\mathbf{v})\exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) \\ &+\frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} M(t+s,\mathbf{x}-(\Delta t-s)\mathbf{v},\mathbf{v})\exp(-\frac{\Delta t-s}{\tau})ds \quad . \end{aligned} \tag{3.20}$$

Par la suite nous noterons: $M(t+s) = M(t+s,\mathbf{x}-(\Delta t-s)\mathbf{v},\mathbf{v})$.
On écrit maintenant (3.20) pour $t = t_n = n\Delta t$:

$$f^{n+1} = \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})f^n + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} M(t_n+s)\exp(-\frac{\Delta t - s}{\tau})ds \quad .$$

En supposant que la Maxwellienne M reste constante en temps entre t_n et t_{n+1}, l'intégrale précédente est approchée de la façon suivante:

$$\int_0^{\Delta t} M(t_n + s,\mathbf{x} - (\Delta t - s)\mathbf{v},\mathbf{v}) \exp(-\frac{\Delta t - s}{\tau})ds \simeq M^n \int_0^{\Delta t} \exp(-\frac{\Delta t - s}{\tau})ds$$

Par conséquent le schéma s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} f_i^{n+1} & = & \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})f_i^n + (1 - \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}))M_i^n \\ f_i^0 & = & f_0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{array} \right. \tag{3.21}$$

Nous analyserons ce schéma plus précisément dans le chapitre 5.

Remarques:

- Si l'on considère (à Δt fixé), des valeurs très petites du rapport $\frac{\Delta t}{\tau}$, ce qui correspond au cas où le temps de relaxation τ est très grand (transport libre), le schéma s'écrit:
$$\left\{ \begin{array}{lcl} f_i^{n+1} & = & f_i^n \\ f_i^0 & = & f_0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{array} \right.$$
On remarque alors que le schéma résout exactement l'équation de transport libre: $\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f \;=\; 0.$
- De même si l'on considère (à Δt fixé), des valeurs très petites du temps de relaxation τ (régime collisionnel), le schéma s'écrit:
$$\left\{ \begin{array}{lcl} f_i^{n+1} & = & M_i^n \\ f_i^0 & = & f_0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{array} \right.$$
Ce schéma correspond à une phase de projection (sur les Maxwelliennes) et une phase de transport libre où les particules se déplacent suivant les caractéristiques. On retrouve ainsi (au niveau de la discrétisation en temps) les schémas de Boltzmann appliqués aux équations d'Euler compressibles. Pour une présentation et une étude des schémas de Boltzmann appliqués à la dynamique des gaz, on pourra se référer à [27].

Chapitre 4

Résultats numériques

Afin de valider la méthode présentée, nous avons réalisé deux cas test:

- Le tube à choc de Sod [31]: nous avons choisi ce cas test, car on peut comparer les résultats numériques obtenus à la solution exacte des équations d'Euler dans la limite $\tau \to 0$. Les résultats obtenus sont présentés dans le chapitre suivant.
- Ecoulement d'un gaz raréfié sur une plaque plane: ce cas test académique a été choisi car c'est une vraie simulation bidimensionnelle. On pourra de plus comparer les résulats numériques à ceux obtenus à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo.

4.1 Ecoulement sans incidence

Nous allons considérer l'écoulement d'un gaz raréfié sur une plaque plane. Les caractéristiques de l'écoulement infini sont:

$$\begin{aligned}
\rho_\infty &= 3.25\,10^{-5}\,kg/m^3 \\
U_\infty &= 1200\,m/s \\
T_\infty &= 300\,K
\end{aligned}$$

Le libre parcours moyen à l'infini vaut: $1.8816\,10^{-3}\,m$ et le nombre de Mach à l'infini vaut 3.55, on en déduit la valeur du temps de relaxation $\tau = 6.26\,10^{-6}\,s$.
La longueur de la plaque est $L = 0.21\,m$ et la température à la surface de la plaque est de $300\,K$. On suppose une accomodation totale de la paroi. Le domaine de calcul Ω est représenté sur la figure 4.1.

Conditions aux limites

Sur Γ_∞, on suppose que le gaz est à l'équilibre thermique, la fonction de distribution est alors une Maxwellienne. Plus précisément:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{v},I) \;=\; \frac{\rho_\infty}{\alpha(\frac{kT_\infty}{m})^{\frac{3}{2}+\frac{1}{\delta}}}\exp(-(\frac{\mid \mathbf{v}-\mathbf{U}_\infty \mid^2}{2\frac{kT_\infty}{m}}+\frac{I^\delta}{\frac{kT_\infty}{m}})) \quad , \quad \mathbf{x}\in\Gamma_\infty \;,\; \mathbf{v}.\mathbf{n}<0 \qquad (4.1)$$

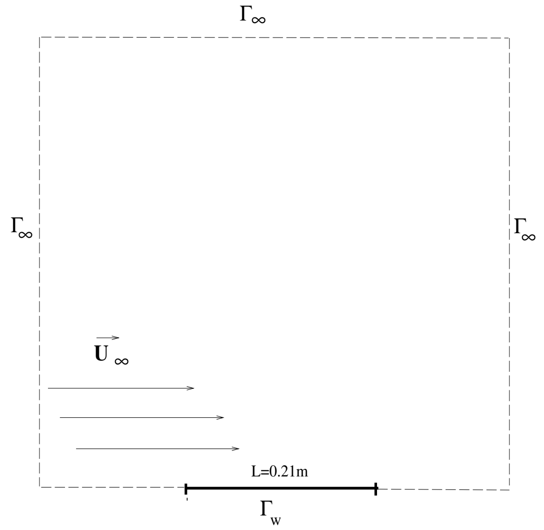


FIG. 4.1 – *Domaine de calcul* Ω

où α et δ ont été définis précédemment et $\mathbf{n}$ représente la normale unitaire sortante à Γ_∞.
Sur Γ_w, les conditions aux limites décrivent l'interaction des molécules du gaz avec la plaque. Notons $R(t,\mathbf{x},\mathbf{v}' \to \mathbf{v})$ la densité de probabilité pour qu'une molécule heurtant la plaque avec une vitesse comprise entre $\mathbf{v}'$ et $\mathbf{v}' + d\mathbf{v}'$ au point $\mathbf{x}$ et à l'instant t soit réemise au même point avec une vitesse comprise entre $\mathbf{v}$ et $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$. Si R est connue, on peut en déduire une condition aux limites pour la fonction de distribution f. A cause de la complexité des phénomènes physiques au niveau de la plaque, des modèles physiques pour R ont été construits. Nous allons considérer le modèle suivant, voir [7]:

$$R(t,\mathbf{x},\mathbf{v}' \to \mathbf{v}) = (1-\beta)\delta(\mathbf{v}' + 2\mathbf{n}(\mathbf{v}.\mathbf{n})) + \beta f_0(\mathbf{v},I) \mid \mathbf{v}.\mathbf{n} \mid \ , (\mathbf{v}.\mathbf{n} > 0 \ , \ \mathbf{v}'.\mathbf{n} < 0)$$

où δ est la mesure de Dirac, $\mathbf{n}$ est la normale unitaire sortante à Γ_w, β est le coefficient d'accomodation et f_0 est définie par:

$$f_0 \ = \ \frac{1}{\frac{kT_0}{m}(2\pi\frac{kT_0}{m})^{\frac{1}{2}+\frac{1}{\delta}}} \exp(-(\frac{\mid \mathbf{v} \mid^2}{2\frac{kT_0}{m}} + \frac{I^\delta}{\frac{kT_0}{m}}))$$

où T_0 est la température au niveau de la plaque. Pour $\beta = 0$, on obtient des conditions aux limites de type réflexion spéculaire. L'accomodation totale de la paroi correspond à $\beta = 1$, on obtient alors la condition aux limites suivante:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{v},I) \ = \ f_0(\mathbf{v},I) \int_{(\mathbf{v}'.\mathbf{n}<0)\times \mathbb{R}^+} f(t,\mathbf{x},\mathbf{v}',J)\, d\mathbf{v}' dJ \ \ , \ \mathbf{x} \in \Gamma_w \ , \ \mathbf{v}.\mathbf{n} > 0$$

A l'instant initial, on suppose que le gaz est à l'équilibre thermique, la fonction de distribution à l'instant $t = 0$ est donnée par (4.1).
On représente sur les figures 4.2 et 4.3 les isodensités et les isomach.
On représente maintenant sur les figures 4.4.a et 4.4.b les coefficients de pression $C_p = \dfrac{2p_w}{\rho_\infty \mid \mathbf{U}_\infty \mid^2}$ et de frottement $C_f = \dfrac{2\tau_w}{\rho_\infty \mid \mathbf{U}_\infty \mid^2}$ au niveau de la plaque en fonction de la distance exprimée en libre parcours moyen. La pression au niveau de la

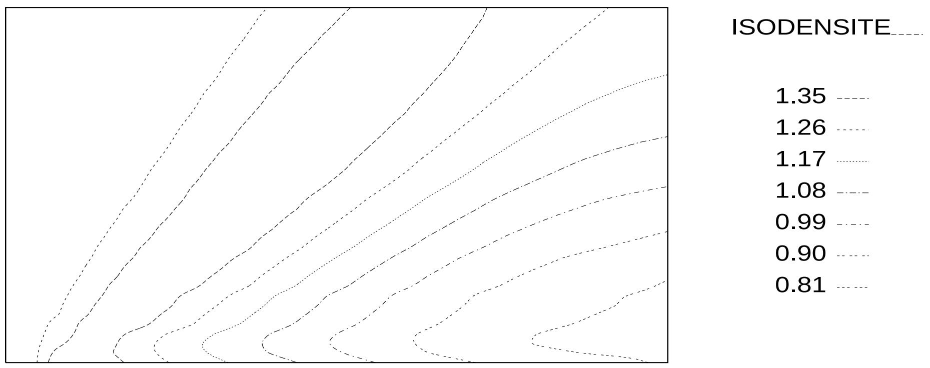


Fig. 4.2 – *Isodensité*

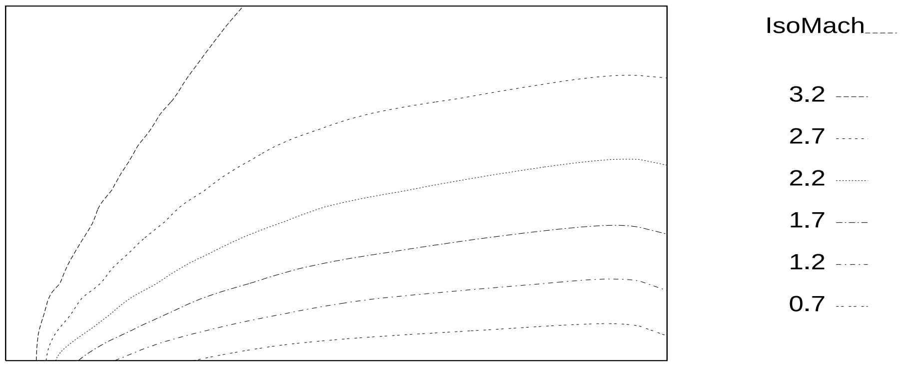


Fig. 4.3 – *Isomach*

plaque p_w est donnée par la relation: $p_w = \rho_w \dfrac{kT_w}{m}$. Et τ_w est déterminé à l'aide des moments de la fonction de distribution f, voir [7].
On peut ainsi comparer les coefficents aérodynamiques à ceux obtenus par Bird [4]

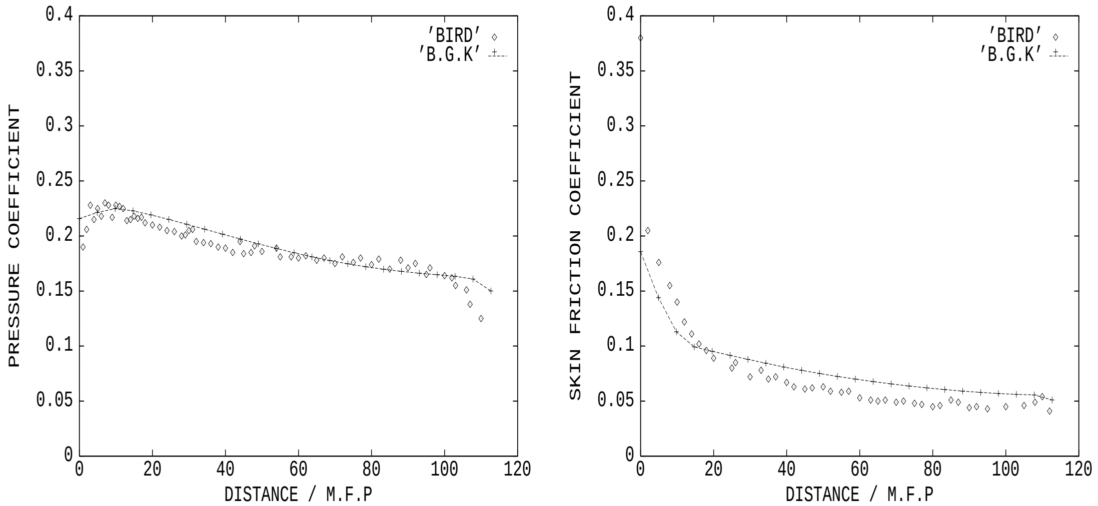


FIG 4.4.a: Coefficient de pression FIG 4.4.b: Coefficient de frottement

FIG. 4.4 – *Coefficients aérodynamiques*

à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo (méthode DSMC, voir [18]). La méthode de Monte-Carlo résout l'équation de Boltzmann et non le modèle B.G.K.. Cependant on peut remarquer que la différence en amplitude n'excède pas 10% excepté à l'extrémité de la plaque où l'effet du flot amont est particulièrement sensible. On peut conclure que les résultats se comparent bien et ce en dépit du fait que nous avons utilisé un modèle cinétique simplifié, le modèle B.G.K. .

4.2 Ecoulement avec incidence

On considère l'écoulement d'un gaz raréfié sur une plaque de longueur $L = 0.21m$ avec une incidence de 20^o. La température au niveau de la plaque estde $678\,K$. On suppose également une accomodation totale de la plaque. Les caractéristiques de l'écoulement infini sont les mêmes que dans le cas sans incidence.
On représente sur les figures 4.5 et 4.6 les isodensités et les isomach.
On représente également les coefficients de pression et de frottement au niveau de la plaque sur les figures 4.7.a et 4.7.b.
Bien que ce cas test soit plus difficile que le cas sans incidence, on obtient des résultats comparables à ceux obtenus par une méthode de Monte-Carlo [4] et il faut le souligner avec le même temps calcul.
Les cas tests présentés ont montré la validité et la robustesse de la méthode utilisée.

FIG. 4.5 – *Isodensité*

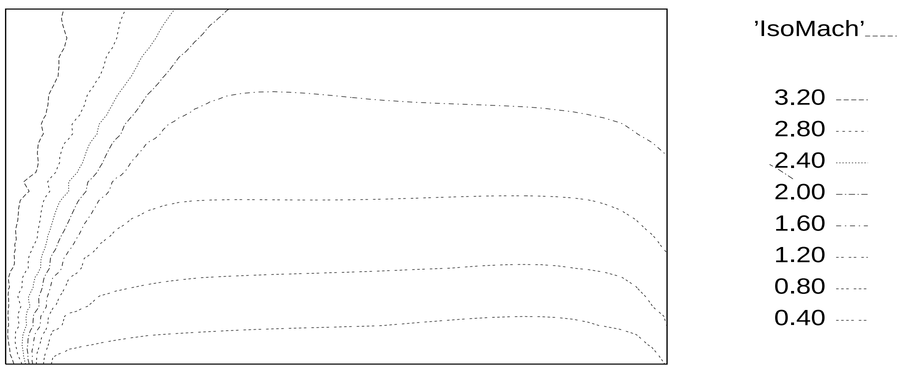


FIG. 4.6 – *Isomach*

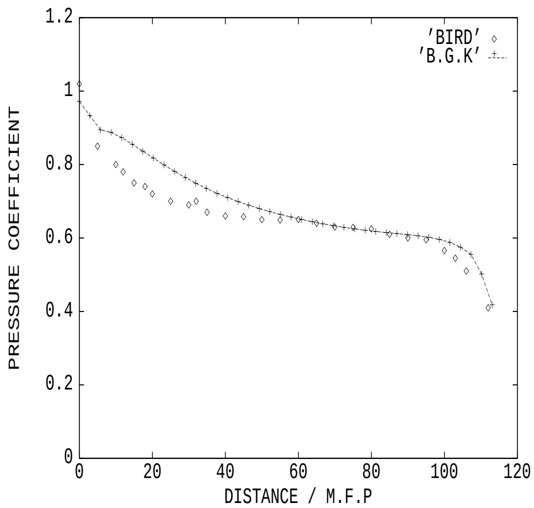


FIG 4.7.a: Coefficient de pression

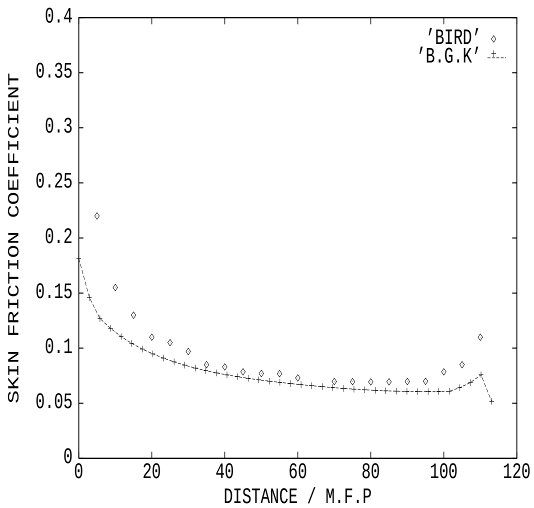


FIG 4.7.b: Coefficient de frottement

FIG. 4.7 – *Coefficients aérodynamiques*

Chapitre 5

Analyse de convergence

Nous présentons dans ce chapitre une analyse théorique complète de la méthode particulaire déterministe présentée précédemment. Cette partie est constituée d'un article en anglais à paraître dans SIAM Journal on Numerical Analysis [14].

Introduction

The **B.G.K.** model of **Boltzmann** equation is a kinetic relaxation time model describing the evolution of a gas [3]. This model, despite its simplicity, contains most of the basic properties of fluid dynamics such as the conservation of mass, momentum and energy. The state of the gas is represented by the density $f(t,x,v)$ of particles which at time $t \geq 0$, at position $x \in I\!R^N$ move with the velocity $v \in I\!R^N$. The evolution of the density $f(t,x,v)$ is described by the following equation :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v.\nabla_x f = \frac{1}{\tau}(M(f) - f) \tag{5.1}$$

where τ is a relaxation time, $M(f)$ is usually called the local Maxwellian and may be written :

$$M(f) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{N}{2}}} \exp(-\frac{\mid v - U \mid^2}{2T}) \tag{5.2}$$

The density ρ, the mean velocity U, the temperature T are defined through the moments of f, more precisely :

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho U \\ E \end{pmatrix} = \int_{I\!R^N} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{\mid v \mid^2}{2} \end{pmatrix} f\, dv \tag{5.3}$$

The temperature T is deduced from the total energy of molecules :

$$E = \rho \frac{\mid U \mid^2}{2} + \frac{N}{2}\rho T. \tag{5.4}$$

We refer the reader to [26],[28] for a mathematical analysis of this model. For solving numerically kinetic equations, one generally uses probabilistic approaches. More

recently deterministic particle methods have been suggested. Particle methods are commonly used in the numerical simulation of problems arising in plasma physics, an analysis of such methods for solving Vlasov-Poisson or Vlasov-Maxwell systems can be found in [11],[12],[33].
The numerical method used here was introduced by S. Mas-Gallic, see [21],[22]. In a previous paper [17], we have presented a strategy for parallelising this weighted particle method on massively parallel computers.
The aim of this paper is to prove the convergence of this numerical approximation for the B.G.K. model. Convergence results for a simpler case, the neutron transport equation, have been stated by S. Mas-Gallic and F.Poupaud in [22]. Compared to [22], the main difficulty is to control the nonlinearity coming from the local Maxwellian $M(f)$. Let us also point out that the convergence analysis given in this paper is obtained for a full discretization scheme (with respect to t,x and v).
In order to prove the convergence, we need some estimates concerning density, mean velocity, temperature, the kinetic density f and the Maxwellian $M(f)$. Such estimates have been recently established by B.Perthame and M.Pulvirenti in [28]. These estimates allow to derive an uniqueness result for the B.G.K. model and also regularity properties of the solution which are necessary for our analysis.
The paper is divided into four parts. In section 1, we first recall the results obtained by B.Perthame and M.Pulvirenti and prove a regularity result for the kinetic density f and some other results which are necessary for the convergence analysis. The numerical method is presented in the next section. In section 3, we prove the convergence of the approximation defined before. Finally we present some numerical results.

5.1 Existence of smooth solutions for the B.G.K. model

We first recall the main results obtained by B.Perthame and M.Pulvirenti concerning the moments of the kinetic density f and the local Maxwellian $M(f)$.

5.1.1 Weighted L^∞ bounds

For $f \in L^1(I\!R^N)$ such that $\mid v \mid^2 \; f \in L^1(I\!R^N)$, $f \geq 0$, $M(f)$ is defined according to (5.2) and the moments of f are defined by (5.3 , 5.4). Let us note $N_q(f) = \sup\limits_v \mid v \mid^q \; f(v)$ with $q \geq 0$.

Proposition 5.1.1 *(Perthame Pulvirenti [28])*
The following estimates hold:
1)

$$\frac{\rho}{T^{\frac{N}{2}}} \leq C\, N_0(f)$$

2) Either for $q > N+2$ *or for* $0 \leq q < N$ *we have:*

$$\rho(T + \mid U \mid^2)^{\frac{q-N}{2}} \leq C_q\, N_q(f)$$

3) For any $q > 1$:

$$\frac{\rho \mid U \mid^{N+q}}{[(T+ \mid U \mid^2)T]^{\frac{N}{2}}} \leq C\, N_q(f)$$

Thanks to these estimates, one can control the Maxwellian $M(f)$.

Proposition 5.1.2 *(Perthame Pulvirenti [28])*
Either for $q > N+2$ or for $0 \leq q < N$ we have :

$$\sup_v \mid v \mid^q \; M(f) \leq C_q\, N_q(f)$$

We complete the B.G.K model (5.1) with initial and boundary conditions. One consider periodic boundary conditions on a **bounded** domain $\Omega \subset I\!R^N$, Ω being an elementary cell of a lattice. More precisely, $\Omega = \{x \in I\!R^N \,;\, x = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j a_j e_j \quad 0 \leq \lambda_j \leq 1\}$ where $(a_1,\ldots,a_N) \in I\!R^N$ and $(e_1,\ldots,e_N)$ is the canonical basis of $I\!R^N$. We will consider in the following the problem defined by:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} + v.\nabla_x f = \dfrac{1}{\tau}(M(f) - f) \\ f(0,x,v) = f_0(x,v) \\ f(t,x_1,\ldots,0,\ldots,x_N,v) = f(t,x_1,\ldots,a_i,\ldots,x_N,v) \quad i = 1,\ldots,N \end{cases} \tag{5.5}$$

Theorem 5.1.1 *(Perthame Pulvirenti [28])*
Suppose $f_0 \geq 0$, $f_0 \in L^1(\Omega \times I\!R^N)$. Suppose also that for some $q > N+2$:

$$I\!N_q(f_0) \stackrel{def}{=} \| \,(1+ \mid v \mid^q) f_0\, \|_{L^\infty(\Omega \times I\!R^N)} = A_0 < +\infty$$

and for all $t \in I\!R$:

$$\gamma(x,t) \stackrel{def}{=} \int_{I\!R^N} f_0(x - vt,v)\, dv \geq C_0 > 0 \tag{5.6}$$

Then there exists a unique solution of (5.5). Moreover for all $t > 0$ the following bounds hold :

$$\| \rho(t,.) \|_{L^\infty(\Omega)} + \| U(t,.) \|_{L^\infty(\Omega)} + \| T(t,.) \|_{L^\infty(\Omega)} , I\!N_q(f(t)) \leq A(t) < +\infty \tag{5.7}$$

$$\rho(t) \geq C_0 \exp(-t) \tag{5.8}$$

$$T(t) \geq B(t) > 0 \tag{5.9}$$

for some $A(t)$,$B(t)$.

Now, we can state our main result concerning the regularity of the kinetic density f.

5.1.2 Regularity of the solution

We first introduce some notations. Let us note $\Lambda = \Omega \times I\!R^N$. We shall denote by $W_q^{s,\infty}(\Lambda)$ the weighted Sobolev space and by $\| \;.\; \|_{s,q,\Lambda}$ and $| \;.\; |_{k,q,\Lambda}$ its norms defined as follows. If $k = (\underbrace{k_1,\ldots,k_N}_{k_v};\underbrace{k_{N+1},\ldots,k_{2N}}_{k_x})$ is a multiple index, let ∂^k denotes the partial derivative $\partial^k = \dfrac{\partial^{|k|}}{\partial v^{k_v}\partial x^{k_x}} = \dfrac{\partial^{|k|}}{\partial v_1^{k_1},\ldots,\partial x_N^{k_{2N}}}$ with $\mid k \mid = k_1 + \ldots + k_{2N}$. We have :

$$\begin{aligned}
&\mid h \mid_{k,q,\Lambda} = \sup_{(x,v)\in\Lambda} ess \mid (1+ \mid v \mid^q)\partial^k h(x,v) \mid \\
&\parallel h \parallel_{s,q,\Lambda} = \sup_{0\leq|k|\leq s} \left(\sup_{(x,v)\in\Lambda} ess \mid (1+ \mid v \mid^q)\partial^k h(x,v) \mid \right) \\
&W_q^{s,\infty}(\Lambda) = \{h \ ; \ \parallel h \parallel_{s,q,\Lambda} < \infty\}
\end{aligned}$$

We also introduce the following norm : $\parallel f \parallel_{X^{s,q}_{|k_0|}} = \displaystyle\sum_{|k|=0}^{|k_0|} \sup_{t\in[0,t_0]} ess \mid f \mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda} (t)$.

Let us remark that for $q < r$: $W_r^{s,\infty}(\Lambda) \subset W_q^{s,\infty}(\Lambda)$ and $\parallel h \parallel_{s,q,\Lambda} \leq C \parallel h \parallel_{s,r,\Lambda}$

Theorem 5.1.2 *Let $q > N + 2$ and $s \geq 1$, suppose $f_0 \geq 0$, $f_0 \in L^1(\Lambda)$. Suppose also that f_0 verifies (5.6) and :*

$$f_0 \in \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda) \tag{5.10}$$

Then there exists a unique solution of the B.G.K. model (5.5). Moreover we have for all $t_0 > 0$:

$$f \in L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$$

Proof : We introduce the sequence (f_n) solutions of the linear problem :

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial f_n}{\partial t} + v.\nabla_x f_n = \dfrac{1}{\tau}\,(M(f_{n-1}) - f_n) \\ f_n(0,x,v) = f_0(x,v) \end{array} \right. \tag{5.11}$$

For such a sequence, we have the following results.

Proposition 5.1.3 *i) The moments ρ_n,U_n,T_n of f_n uniformly satisfy :*

$$\parallel \rho_n(t,.) \parallel_{L^\infty(\Omega)} + \parallel U_n(t,.) \parallel_{L^\infty(\Omega)} + \parallel T_n(t,.) \parallel_{L^\infty(\Omega)} \leq A(t) < +\infty \tag{5.12}$$

$$\rho_n(t) \geq C_0 \exp(-t) \tag{5.13}$$

$$T_n(t) \geq B(t) > 0 \tag{5.14}$$

for some $A(t),B(t)$.

ii) The sequence $(f_n)_{n\geq0}$ converges strongly in $L^1(\Lambda; (1+ \mid v \mid^2)\, dsx\, dv)$.

iii) The sequence $(f_n)_{n\geq0}$ is uniformly bounded in

$$L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$$

Let us postpone the proof of this Proposition.
Using Proposition 5.1.3 iii), we can extract a subsequence also denoted f_n such that:

$$f_n \overset{*}{\rightharpoonup} g \quad in \quad L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$$

But using the fact that the sequence f_n converges strongly in $L^1(\Lambda;(1+v^2)dxdv)$ towards the solution f of the B.G.K. model, we have $f = g$ and:

$$f \in L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$$

This ends the proof of Theorem 5.1.2. □
Proof of Proposition 5.1.3 : The proof of the two first points of Proposition 5.1.3 is made in [28]. Now we prove the last part of Proposition 5.1.3.
The result is established by induction on the order of derivation α.
First step : For $\alpha = 0$, we have to prove that the sequence $(f_n)_{n\geq 0}$ is uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0]; W^{0,\infty}_{q+2s}(\Lambda))$. By induction on n we prove that there exists a constant $C = C(q,s)$ such that:

$$\mid f_n \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \leq \mid f_0 \mid_{0,q+2s,\Lambda} \exp C\frac{t}{\tau} \tag{5.15}$$

By Proposition 5.1.2, we have:

$$\mid M(f_n) \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \leq C \mid f_n \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t)$$

The solution f_{n+1} of (5.11) is given by:

$$\begin{aligned} f_{n+1}(t,x,v) = \quad & f_0(x-vt,v)\exp(-\frac{t}{\tau}) \\ & +\frac{1}{\tau}\int_0^t M(f_n)(\sigma,x-(t-\sigma)v,v)\exp(-\frac{t-\sigma}{\tau})d\sigma \end{aligned} \tag{5.16}$$

One may easily verify that f_{n+1} given by the above formula is a solution of (5.11) by deriving along characteristics: $x(t) = x(0) + vt$.
Consequently, using (5.16) leads to:

$$\mid f_{n+1} \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \leq \mid f_0 \mid_{0,q+2s,\Lambda} \exp(-\frac{t}{\tau}) + \frac{C}{\tau}\int_0^t \mid f_n \mid_{0,q+2s,\Lambda} (\sigma) \exp -\frac{(t-\sigma)}{\tau}\, d\sigma$$

Using (5.15), we obtain:

$$\mid f_{n+1} \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \leq \mid f_0 \mid_{0,q+2s,\Lambda} + \frac{C}{\tau}\int_0^t \mid f_0 \mid_{0,q+2s,\Lambda} \exp C\frac{\sigma}{\tau}\, d\sigma$$

Finally an explicit calculation leads to:

$$\mid f_{n+1} \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \leq \mid f_0 \mid_{0,q+2s,\Lambda} \exp C\frac{t}{\tau}$$

Using (5.10), we obtain the desired result for $\alpha = 0$.

Second step: We assume that the sequence $(f_n)_{n\geq 0}$ is uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0];\bigcap_{\alpha=0}^{\alpha_0} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$. The next Lemma is the analogous of Proposition 5.1.2 for the derivative of the Maxwellian.

Lemma 5.1.1 *Let $k=(k_v,k_x)\in I\!N^N\times I\!N^N$, $\mid k \mid\leq s$ and $(f_n)_{n\geq 0}$ uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0];\bigcap_{\alpha=0}^{|k|-1} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$. Then it exists a constant $C=C(q,s,\parallel f_n\parallel_{X^{s,q}_{|k|-1}})$ such that:*

$$\mid M(f_n)\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(t)\leq\begin{cases} C(\mid f_n\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(t)+1) & if \quad \mid k_x\mid=\mid k\mid \\ C & if \quad \mid k_x\mid<\mid k\mid\end{cases}$$

Let us end the proof of Proposition 5.1.3.

We apply Lemma 5.1.1 with $\mid k\mid=\alpha_0+1$. In the case $\mid k_x\mid<\mid k\mid$, we differentiate (5.16) and multiply it by $(1+\mid v\mid^{q+2(s-|k|)})$, now argueing as in the first step we obtain that f_n is uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0];\bigcap_{\alpha=0}^{\alpha_0+1} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$.

We consider now the case $\mid k_x\mid=\mid k\mid$. By induction on n, we prove that:

$$\mid f_n\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(t)\leq\mid f_0\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}\exp(C\frac{t}{\tau})+\exp(C\frac{t}{\tau})-1 \tag{5.17}$$

where C has been defined in Lemma 5.1.1. We have, using Lemma 5.1.1 and differentiating the expression of the solution f_{n+1} (5.16):

$$\begin{aligned}\mid f_{n+1}\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(t)\leq\ & \mid f_0\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}\exp-(\frac{t}{\tau})+\\ & \frac{C}{\tau}\int_0^t\mid f_n\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(\sigma)\exp-\frac{(t-\sigma)}{\tau}\,d\sigma\end{aligned}$$

Using (5.17) and making the explicit calculation leads to:

$$\mid f_{n+1}\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}(t)\leq\mid f_0\mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda}\exp C\frac{t}{\tau}+\exp C\frac{t}{\tau}-1$$

Using (5.10), one conclude that f_n is uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0];\bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$. $\square$

<u>Proof of Lemma 5.1.1:</u> First we establish by induction on the order of derivation $\mid k\mid$ ($k=(k_v,k_x)\in I\!N^N\times I\!N^N$), that the derivative of the Maxwellian with respect to x and v may be written as:

$$\partial^k M(f)=\exp(-\frac{(v-U)^2}{2T})[P(\frac{1}{\sqrt{(T)}},\rho,(v_j-U_j),\frac{\partial^{|\gamma|}T}{\partial x^\gamma},\frac{\partial^{|\gamma|}U_j}{\partial x^\gamma},\frac{\partial^{|\gamma|}\rho}{\partial x^\gamma})] \tag{5.18}$$

where P is a polynomial of several variables of degree $2\mid k\mid$ in $(v_j-U_j)_{j=1,\ldots,N}$; $\gamma\in I\!N^N\quad\mid\gamma\mid=0,\ldots,\mid k_x\mid$. Moreover P is of degree one in $\frac{\partial^{|\gamma|}T}{\partial x^\gamma},\frac{\partial^{|\gamma|}U_j}{\partial x^\gamma},\frac{\partial^{|\gamma|}\rho}{\partial x^\gamma}$

variables for $\mid \gamma \mid = \mid k_x \mid$.
The result is true for $\mid k \mid = 0$. If we assume that $\dfrac{\partial^{|k_0|} M}{\partial v^{k_{0v}} \partial x^{k_{0x}}}$ may be written as (5.18) then an explicit calculation proves that the same is true for $\mid k_0 \mid +1$. At this level, we have to estimate the space derivative of the hydrodynamic fields in terms of the derivative of the kinetic density. Such an estimation is provided by the next Lemma.
Lemma 5.1.2 *If $l \in I\!N^N$ is a multiple index and f_n uniformly bounded in* $L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{|l|-1} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$, *for $\mid l \mid \leq s$, then it exists a constant* $C = C(q,s, \| f_n \|_{X^{s,q}_{|l|-1}})$ *such that:*

$$\mid \frac{\partial^{|l|} T_n}{\partial x^l} \mid_{L^\infty(\Omega)} (t) + \mid \frac{\partial^{|l|} (U_j)_n}{\partial x^l} \mid_{L^\infty(\Omega)} (t) + \mid \frac{\partial^{|l|} \rho_n}{\partial x^l} \mid_{L^\infty(\Omega)} (t) \leq C \mid f_n \mid_{l,q+2(s-|l|),\Lambda} (t) \tag{5.19}$$

The proof of this Lemma is made at the end of this subsection.
We remark that in the k derivative of the Maxwellian $M(f_n)$, we have only derivatives of order $\mid k_x \mid$ of the kinetic density f_n. Consequently for k such that $\mid k \mid > \mid k_x \mid$, it is enough to use Lemma 5.1.2 with $\mid l \mid = \mid k_x \mid \leq \mid k \mid -1$, Proposition 5.1.3 and the fact that $(f_n)_{n\geq 0}$ is, by hypothesis, uniformly bounded in $L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{|k|-1} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda))$ to conclude the proof of Lemma 5.1.1.
Now for $\mid k_x \mid = \mid k \mid$, we use Lemma 5.1.2, (5.18) and the uniform bounds for the macroscopic quantities ρ_n, U_n, T_n to obtain:

$$\begin{aligned}
\partial^k M(f_n) &\leq C(1+ \mid v \mid)^{2|k|} \exp\left(-\frac{(v-U_n)^2}{2T_n}\right)\left[\sum_{|\gamma|=|k|} \left(\frac{\partial^{|\gamma|} T_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} (U_j)_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} \rho_n}{\partial x^\gamma} + 1\right)\right] \\
&\leq C(1+ \mid v \mid)^{2|k|} M(f_n) \frac{2\pi T_n^{\frac{N}{2}}}{\rho_n}\left[\sum_{|\gamma|=|k|} \left(\frac{\partial^{|\gamma|} T_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} (U_j)_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} \rho_n}{\partial x^\gamma}\right) + 1\right]
\end{aligned}$$

where C is a constant depending on q,s and $\| f_n \|_{X^{s,q}_{|k|-1}}$. Using (5.12,5.13) and multiplying the preceding relation by $(1+ \mid v \mid^{q+2(s-|k|)})$ leads to:

$$\begin{aligned}
(1+ \mid v \mid^{q+2(s-|k|)}) \partial^k M(f_n) \leq C \quad & (1+ \mid v \mid^{q+2s}) M(f_n) \\
& \left[\sum_{|\gamma|=|k|} \left(\frac{\partial^{|\gamma|} T_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} (U_j)_n}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial^{|\gamma|} \rho_n}{\partial x^\gamma}\right) + 1\right]
\end{aligned}$$

Now we use Proposition 5.1.2 and Lemma 5.1.2 with $\mid k \mid = \mid l \mid$ to conclude that:

$$\mid M(f_n) \mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda} (t) \leq C(\mid f_n \mid_{k,q+2(s-|k|),\Lambda} (t) + 1)$$

This ends the proof of Lemma 5.1.1. $\square$
Note that one can easily prove, using (5.18) that:

$$M(f) \in L^\infty([0,t_0]; \bigcap_{\alpha=0}^{s} W^{\alpha,\infty}_{q+2(s-\alpha)}(\Lambda)) \tag{5.20}$$

Proof of Lemma 5.1.2 : The result is proved by induction on the order of derivative $\mid l \mid$. For $\mid l \mid=0$, we have :

$$\begin{aligned}\rho_n = \int_{I\!R^N} f_n \, dv \; &= \int_{I\!R^N} f_n \frac{(1+\mid v \mid^{q+2s})}{(1+\mid v \mid^{q+2s})} \, dv \\ &\leq \mid f_n \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \int_{I\!R^N} \frac{1}{(1+\mid v \mid^{q+2s})} \, dv\end{aligned}$$

but by hypothesis $q > N+2$, then : $\displaystyle\int_{I\!R^N} \frac{1}{1+\mid v \mid^{q+2s}} \, dv \leq C < +\infty$.
Then :

$$\mid \rho_n \mid_{L^\infty(\Omega)} (t) \leq C \mid f_n \mid_{0,q+2s,\Lambda} (t) \quad \forall t \in [0,t_0]$$

In the same way, we obtain the same estimate for $(\rho U)_n$ and E_n. Thanks to the uniform lower bound for ρ_n we deduce the same bound for U_n. The estimate for T_n follows from (5.4).
Let us suppose that (5.19) holds for $\mid l_0 \mid$. Then, the same kind of calculation gives :

$$\mid \frac{\partial^{|l_0|+1} \rho_n}{\partial x^{l_0+1}} \mid_{L^\infty(\Omega)} (t) \leq C \mid f_n \mid_{l_0+1,q+2(s-|l_0|-1),\Lambda} (t) \quad \forall t \in [0,t_0]$$

The same bounds hold for $\partial^{l_0+1}(\rho U)_n$, using the lower bound for ρ_n and (5.19) for $\partial^l \rho_n, \partial^l U_n \quad \mid l \mid \leq \mid l_0 \mid$ we obtain the desired bound for $\partial^{l_0+1} U_n$. The same kind of reasonning applies for $\partial^{l_0+1} T_n$, using (5.4). This ends the proof of Lemma 5.1.2. □
Now we prove some results concerning the time derivative of the kinetic density f and the local Maxwellian $M(f)$. We will use these results in the following section.

Proposition 5.1.4 *Let $q > N+2$ and $s \geq 2$, then under the hypothesis (5.6,5.10), we have :*

$$\begin{cases} i) \;\; \dfrac{\partial(1+\mid v \mid^q) f}{\partial t} \in L^\infty([0,t_0] \times \Lambda) \\ ii) \;\; \dfrac{\partial M}{\partial t} \in L^\infty([0,t_0] \times \Lambda) \\ iii) \;\; v.\nabla_x M \in L^\infty([0,t_0] \times \Lambda) \end{cases}$$

Proof : i) The proof is quite similar to the previous ones.
Multiplying (5.1) by $(1+\mid v \mid^q)$, we obtain :

$$\frac{\partial(1+\mid v \mid^q) f}{\partial t} = \frac{1}{\tau}(1+\mid v \mid^q)(M(f) - f) - (1+\mid v \mid^q) v.\nabla_x f$$

But :

$$\begin{aligned}\mid (1+\mid v \mid^q) v.\nabla_x f \mid \leq \sum_{i=1}^{N} C \mid (1+\mid v \mid^{q+1}) \partial_{x_i} f \mid \; &\leq C \mid f \mid_{l,q+1,\Lambda} (t) \; ; \; \mid l \mid = 1 \\ &\leq C \mid f \mid_{l,q+2(s-1),\Lambda} (t) \; for \; s \geq 2\end{aligned}$$

On the other hand, using Proposition 5.1.2 leads to :

$$\| \frac{\partial(1+\mid v \mid^q) f}{\partial t} \|_{L^\infty(\Lambda)} (t) \leq \frac{C_q}{\tau} \mid f \mid_{0,q,\Lambda} (t) + C_q \mid f \mid_{l,q+2(s-1),\Lambda} (t)$$

Finally, using Theorem 5.1.2 one concludes that:

$$\frac{\partial(1+\mid v\mid^q)f}{\partial t}\in L^\infty([0,t_0]\times\Lambda)$$

ii)We first compute the time derivative of the local Maxwellian M.

$$\frac{\partial M}{\partial t}=\frac{\partial M}{\partial\rho}.\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial M}{\partial U}.\frac{\partial U}{\partial t}+\frac{\partial M}{\partial T}.\frac{\partial T}{\partial t}$$

Lemma 5.1.3 *Let f be the solution of the B.G.K. model (5.5), f_0 defined as in Theorem 5.1.2, $M(f)$ defined by (5.2) and the macroscopic quantities defined by (5.3) then:*

$$\parallel\frac{\partial M}{\partial\rho}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)+\parallel\frac{\partial M}{\partial U}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)+\parallel\frac{\partial M}{\partial T}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)\le C(t)<+\infty$$

for some C(t).

The proof of this lemma consists simply in computing the derivative and using Proposition 5.1.2 and the bounds (5.7,5.8,5.9).

Thanks to Lemma 5.1.3 the derivative of the Maxwellian with respect to the moments of f are bounded. It remains to bound the time derivative of the moments of f. We have:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}=\int_{I\!R^N}\frac{\partial f}{\partial t}\,dv\;&=\int_{I\!R^N}\frac{\partial f}{\partial t}\frac{(1+\mid v\mid^q)}{(1+\mid v\mid^q)}\,dv\\&\le\parallel(1+\mid v\mid^q)\frac{\partial f}{\partial t}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)\int_{I\!R^N}\frac{1}{(1+\mid v\mid^q)}\,dv\end{aligned}$$

but for $q>N+2$: $\displaystyle\int_{I\!R^N}\frac{1}{1+\mid v\mid^q}\,dv\le C<+\infty$.

Then:

$$\parallel\frac{\partial\rho}{\partial t}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)\le C\;\parallel\frac{\partial(1+\mid v\mid^q)\,f}{\partial t}\parallel_{L^\infty(\Lambda)}(t)\quad\forall t\in[0,t_0]$$

Using i) one concludes that $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}\in L^\infty([0,t_0]\times\Omega)$.

In the same way, $\dfrac{\partial\rho U}{\partial t}$ is bounded. Then the lower bound (5.8) for ρ leads to the bound for $\dfrac{\partial U}{\partial t}$. We also obtain that $\dfrac{\partial E}{\partial t}$ is bounded and the result for $\dfrac{\partial T}{\partial t}$ follows from (5.4).

Using these estimates, we have: $\dfrac{\partial M}{\partial t}\in L^\infty([0,t_0]\times\Lambda)$.

iii)

$$\mid v.\nabla_x M\mid=\sum_{i=1}^N\mid v_i\partial_{x_i}M\mid\le\sum_{i=1}^N\mid\mid v\mid\partial_{x_i}M\mid$$

Using (5.20) leads to the desired result:

$$v.\nabla_x M\;\in\;L^\infty([0,t_0]\times\Lambda)$$

This ends the proof of Proposition 5.1.4. □

5.2 The Numerical method

We present here the weighted particle method introduced by S. Mas-Gallic. In this method, particles move according to a collisionless dynamic. The collision part is then considered by allocating a weight to each particle. Integrals involved in (5.3) are evaluated by a quadrature formula where the particles themselves play the role of quadrature points. We shall briefly describe the method and refer to [21],[22],[30] for more details.

5.2.1 Description of the method

In (5.5), the velocity vector belongs to $\mathbb{R}^N$, but numerically we will consider a bounded domain in velocity $[-B_v,B_v]^N$ with B_v sufficiently large. Consequently, we introduce the following discretization of the phase space characterized by three parameters $\Delta x > 0\,,\Delta v > 0$ and $B_v > 0$. We set :

$$I = \{l = (\underbrace{l_1,\ldots,l_N}_{l_v};\underbrace{l_{N+1},\ldots,l_{2N}}_{l_x}) \in \mathbb{Z}^{2N} \;\; / \quad | \, l_i \, | \, \Delta v \leq B_v \;\; i = 1,\ldots,N \;\; ;$$

$$l_j \Delta x \in \Omega \;\; j = N+1,\ldots,2N\}$$

and for any $l \in I$:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} x_l^0 & = & l_x \Delta x \\ v_l^0 & = & l_v \Delta v \\ w_l & = & \Delta x \Delta v \end{array} \right.$$

Given an initial distribution f^0 on the set of points $(x_i^0,v_i^0)_{i \in I \subset \mathbb{Z}^{2N}}$, we seek for $f_i(t)$, $x_i(t)$ and $v_i(t)$ such that the measure:

$$f_h = \sum_{i \in I} w_i f_i(t) \delta(x - x_i(t)) \otimes \delta(v - v_i(t)) \tag{5.21}$$

is some approximation of the solution f and w_i are the associated positive weights. Using (5.21), we introduce a quadrature formula associated to the points (x_i,v_i) and the weights w_i defined as follows:

$$\int \!\! \int g(t,x,v) \, d\,x \, d\,v \;\; \approx \;\; \sum_{i \in I} w_i g(t,x_i(t),v_i(t)) \tag{5.22}$$

where g is a continuous function in (x,v) variables.
The main idea of deterministic particle methods is to point out that f_h is a good approximation of f in the space of measures if (5.22) is a good quadrature formula and if f_i is an approximated value of $f(t,x_i(t),v_i(t))$, see [30].

Convective terms

$x_i(t)$ and $v_i(t)$ are solutions of the following differential system :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dfrac{d\,x_i}{d\,t}(t) = v_i & , \; x_i(0) = x_i^0 \\ \dfrac{d\,v_i}{d\,t}(t) = 0 & , \; v_i(0) = v_i^0 \end{array} \right.$$

Since v_i are constant w.r.t. time, solutions are given by:

$$x_i(t) = x_i^0 + v_i^0 t \quad \text{and} \quad v_i(t) = v_i^0$$

Note: The jacobian determinant of the change of variables $(x_i^0,v_i^0) \to (x_i(t),v_i(t))$ takes the constant value 1 . Consequently, if (w_i,x_i^0,v_i^0) is a good quadrature formula, the same is true for $(w_i,x_i(t),v_i(t))$.

Collision terms

The main difficulty here consists in computing the macroscopic quantities ρ, ρU and E which define the Maxwellian (5.2). Let us note that integrations are done in the velocity space. The quadrature formula (5.22) which is set in the phase space will be used to define approximate values of the integrals (5.3). This is done by introducing a continuous function ζ which transforms the integral in v-space into an integral in the phase space. The function ζ has the following properties:

$$\begin{cases} \int_{I\!R^N} \zeta(x)\, d\,x = 1 \\ \int_{I\!R^N} x^l \zeta(x)\, d\,x = 0 \qquad 1 \leq \mid l \mid \leq r-1 \;\; ; \;\; r \geq 2 \\ \int_{I\!R^N} \mid x \mid^r \mid \zeta(x) \mid d\,x < +\infty \end{cases} \tag{5.23}$$

Let us set: $\zeta_\epsilon(x) = \dfrac{1}{\epsilon^N}\zeta(\dfrac{x}{\epsilon})$ for $\epsilon > 0$. Approximate discrete values of ρ, ρU and E, at time t are then defined by:

$$\begin{pmatrix} \rho_h(t,x) \\ (\rho U)_h(t,x) \\ E_h(t,x) \end{pmatrix} = \sum_{j \in I} w_j \begin{pmatrix} 1 \\ v_j \\ \dfrac{\mid v_j \mid^2}{2} \end{pmatrix} f_j\, \zeta_\epsilon\,(x - x_j(t)) \tag{5.24}$$

Using (5.2), one can define the associated local Maxwellian at each time t by: $M_h(t,x,v) = M(\rho_h,(\rho U)_h,E_h)(t,x,v)$ and we put:

$$M_i^h(t) = M_h(t,x_i(t),v_i(t)) \tag{5.25}$$

Boundary conditions

We recall that we consider periodic boundary conditions on a domain Ω defined previously. Numerically when a particle i leaves the domain Ω, we introduce another particle i^{New} such that if $(x_i)_j < 0$ or $(x_i)_j > a_j$; $j = \{1,\ldots,N\}$ we set $(x_i^{New})_j = (x_i)_j \pm a_j$ and we make the assignement $f_i^{New} = f_i$.

5.2.2 Time integration

We want a time integration scheme which remains stable for both large and small values of the Knudsen number. However, we restrict ourselves to explicit schemes for they are in general more adapted to unsteady calculations. Under these constraints, we choose a scheme based on the time integration of the B.G.K. solution :

$$\begin{aligned} f(t+\Delta t,x,v) = & \; f(t,x-v\Delta t,v)\exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) \\ & +\frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} M(t+s,x-(\Delta t-s)v,v)\exp(-\frac{\Delta t-s}{\tau})ds \end{aligned} \tag{5.26}$$

If we write (5.26) for $t = t_n = n\Delta t$, where Δt is the time step, $x = x_i(t_{n+1}),v = v_i(t_{n+1}),f_i^n = f(t_n,x_i(t_n),v_i(t_n))$ and $M_i(t+s) = M(t+s,x_i(t+s),v_i(t+s))$ we get :

$$f_i^{n+1} = \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})f_i^n + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} M_i(t_n+s)\exp(-\frac{\Delta t-s}{\tau})ds$$

Assuming the Maxwellian M to be constant w.r.t. time on $[t^n,t^{n+1}]$, the above integral may be evaluated as :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^{\Delta t} M_i(t_n+s)\exp(-\frac{\Delta t-s}{\tau})ds \simeq \; M_i^n\int_0^{\Delta t}\exp(-\frac{\Delta t-s}{\tau})ds \\ M_i^n = M_i^h(t_n) \end{cases}$$

Finally, the resulting explicit scheme may be written :

$$\begin{cases} f_i^0 & = \; f_0(x_i^0,v_i^0) \\ f_i^{n+1} & = \; \exp(-\dfrac{\Delta t}{\tau})f_i^n + (1-\exp(-\dfrac{\Delta t}{\tau}))M_i^n \end{cases} \tag{5.27}$$

where the subscript i refers to the phase-space discretization described previously.
Remark 2.1 : If we suppose that the cut-off function ζ is positive, one can easily prove that, for an initial data satisfying $f_0 \geq C > 0$, the scheme used preserves the positivity of the kinetic density. More precisely for $t_n \leq \overline{T}$ and $\forall i \in I$, we have $f_i^n \geq \exp(-\frac{t_n}{\tau})\,C > 0$.

5.3 Convergence of the method

The macroscopic quantities ρ, U and T defining the Maxwellian (5.2) are obtained by integration of the kinetic density on the velocity space $I\!R^N$. But numerically, these integrals will be evaluated on a bounded domain in velocity. Then, we introduce the following problem :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_{B_v}}{\partial t} + v.\nabla_x f_{B_v} = \dfrac{1}{\tau}(M_{B_v}(f_{B_v}) - f_{B_v}) \quad t>0 \;\;,\;\; x\in\Omega \;\;,\;\; v\in I\!R^N \\ f_{B_v}(0,x,v) = f_0(x,v) \\ f_{B_v}(t,x_1,\ldots,0,\ldots,x_N,v) = f_{B_v}(t,x_1,\ldots,a_i,\ldots,x_N,v) \quad i=1,\ldots,N \end{cases} \tag{5.28}$$

where $M_{B_v}(f_{B_v})$ is defined according to (5.2) and the macroscopic quantities $\rho_{B_v},U_{B_v},T_{B_v}$ in $M_{B_v}(f_{B_v})$ are defined by :

$$\begin{pmatrix} \rho_{B_v} \\ \rho_{B_v}U_{B_v} \\ \rho_{B_v}\dfrac{\mid U_{B_v}\mid^2}{2} + \dfrac{N}{2}\rho_{B_v}T_{B_v} \end{pmatrix} = \int_{|v|\leq B_v} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \dfrac{\mid v\mid^2}{2} \end{pmatrix} f_{B_v}\,dv \tag{5.29}$$

Moreover we suppose that there exists $\overline{V} > 0$ such that:

$$\gamma_{\overline{V}}(x,t) = \int_{|v|\leq \overline{V}} f_0(x-vt,v)dv \geq C_0 > 0 \ , \ \forall t \leq t_0 \ , \ \forall x \in \Omega \qquad (5.30)$$

In the following we will consider B_v such that $B_v \geq \overline{V}$, it follows that $\gamma_{B_v} \geq C_0 > 0$. For such a B_v, let us note $\Lambda_V = \Omega \times]-B_v,B_v[^N$ and the weighted Sobolev space $W_q^{s,\infty}(\Lambda_V)$ defined as in section 1 with its associated norm $\| h \|_{s,q,\Lambda_V}$.

We first note that for an initial data f_0 satisfying (5.30) and the hypothesis of Theorem 5.1.2, there exists a unique solution f_{B_v} of the problem (5.28,5.29) which satisfies the same regularity as the solution of the B.G.K. model (5.5).

Now we study the error caused by solving problem (5.28,5.29) instead of problem (5.5). We have the following result:

Proposition 5.3.1 *Let f_0 satisfies (5.30) and the hypothesis of Theorem 5.1.2 then there exists a constant C such that for $t \leq t_0$:*

$$\| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t) \leq \frac{C}{B_v^{q-N-2}}$$

Using the expression of the solution (5.16) for f and f_{B_v}, we obtain:

$$\| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t) \leq \frac{1}{\tau} \int_0^t \| M(f) - M_{B_v}(f_{B_v}) \|_{0,q,\Lambda_V} (\sigma) \exp(-\frac{t-\sigma}{\tau}) \, d\sigma \quad (5.31)$$

Now it remains us to bound the quantities appearing in the right hand side of (5.31). To achieve the proof of Proposition 5.3.1 we need some preliminary results.

Let us note K the compact of $\mathbb{R}^{N+2}$ defined by:

$$K = \{\rho,(U_j)_{j=1,\ldots,N},T \quad such\ that \quad 0 < \rho_* \leq \rho \leq \rho^* < +\infty \ , \ | U | \leq U^* < +\infty$$
$$0 < T_* \leq T \leq T^* < +\infty\}$$

We have:

Lemma 5.3.1 *Let (ρ_1,U_1,T_1) and (ρ_2,U_2,T_2) in K, then there exists a constant C such that:*

$$\| M_1 - M_2 \|_{0,q,]-B_v,B_v[^N} \leq C(| \rho_1 - \rho_2 | + | (\rho U)_1 - (\rho U)_2 | + | E_1 - E_2 |)$$

where M_1,M_2 are defined according to (5.2).

Proof: Thanks to Lemma 5.1.3 we obtain that, for the elements of K, the derivative of the Maxwellian with respect to the hydrodynamic fields are bounded. Since K is compact, it is uniformly bounded and one easily obtain the desired result. □

Lemma 5.3.2 *Let f_0 satisfies (5.30) and the hypothesis of Theorem 5.1.2 then, the solution f of the B.G.K. model (5.5) and f_{B_v} solution of (5.28,5.29) satisfy (ρ,U,T), $(\rho_{B_v},U_{B_v},T_{B_v}) \in K$ a.e. in$[0,t_0] \times \Omega$ for convenient $\rho_*,\rho^*,U^*,T_*,T^*$.*

Proof: Using Theorem 5.1.1 we deduce that (ρ,U,T) belongs to K. Thanks to hypothesis (5.30), there exists ρ_* such that $\rho_{B_v} \geq \rho_* > 0$. In the same way, we deduce a lower bound for T_{B_v}. On the other hand, the upper bound for ρ_{B_v},U_{B_v},T_{B_v} are deduced

from (5.7). This ends the proof of this Lemma. □
Consequently, using Lemma 5.3.1 we have :

$$\begin{aligned}\| M(f) - M_{B_v}(f_{B_v}) \|_{0,q,\Lambda_V} (t) \; &\leq C(\| \rho - \rho_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \\ &\| (\rho U) - (\rho U)_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| E - E_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t))\end{aligned} \tag{5.32}$$

In order to estimate the right hand side of (5.32), we need the following result.
Lemma 5.3.3 *Let f_0 satisfies (5.30) and the hypothesis of Theorem 5.1.2, then there exists a constant C such that :*

$$\begin{aligned}\| \rho - \rho_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \; &\| (\rho U) - (\rho U)_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| E - E_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) \\ &\leq C \left(\| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t) + \frac{1}{B_v^{q-N-2}} \| f \|_{0,q,\Lambda} (t)\right)\end{aligned}$$

Proof : The result is only proved for $E - E_{B_v}$, the result for the other quantities is obtained in the same way.

$$E - E_{B_v} = \int_{|v| \leq B_v} | v |^2 \, (f - f_{B_v}) \, dv + \int_{|v| > B_v} | v |^2 \, f \, dv$$

By Theorem 5.1.2, f belongs to $W_q^{0,\infty}(\Lambda)$. Consequently :

$$\begin{aligned}\| E - E_{B_v} \|_{L^\infty(\Omega)} (t) = \; &\int_{|v| \leq B_v} | v |^2 \, \frac{(1 + | v |^{q-2})}{(1 + | v |^{q-2})} (f - f_{B_v}) \, dv + \\ &\qquad \int_{|v| > B_v} | v |^2 \, \frac{(1 + | v |^{q-2}) f}{(1 + | v |^{q-2})} \, dv \\ &\leq C \left(\| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t) + \frac{1}{B_v^{q-N-2}} \| f \|_{0,q,\Lambda} (t)\right) \quad \Box\end{aligned}$$

Proof of Proposition 5.3.1 : Then, applying Lemma 5.3.3 we obtain :

$$\| M(f) - M_{B_v}(f_{B_v}) \|_{0,q,\Lambda_V} (t) \leq \frac{C}{B_v^{q-N-2}} \| f \|_{0,q,\Lambda} (t) + C \| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t)$$

Now (5.31) becomes :

$$\| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (t) \leq \frac{C}{B_v^{q-N-2}} \| f \|_{X_0^{0,q}} (t) + \frac{C}{\tau} \int_0^t \| f - f_{B_v} \|_{0,q,\Lambda_V} (\sigma) \, d\sigma$$

Now using a Gronwall lemma we obtain the desired result fot $t \leq t_0$ and this ends the proof of Proposition 5.3.1. □
Now we consider the problem (5.28,5.29). We assume that :

$$f_0(x,v) \geq f_{*B_v} > 0 \qquad \forall x \in \Omega \quad for \quad | v | \leq B_v \qquad and \; any \; B_v \tag{5.33}$$

Now we state our main result concerning the convergence of the approximation defined before.
Theorem 5.3.1 *Suppose that :*

- $\zeta \in W^{m,1}(I\!\!R^N)$, *satisfies the moment conditions (5.23) for* $r = 2$ *suppose also that* ζ *is positive and has a compact support in* $]-1,1[^N$.

– *f_0 satisfies the conditions (5.6,5.10,5.33) for some $s \geq Max(2,m)$ and $q > N+2$. Then there exists a constant C depending on q,s,t_0,B_v, $\| f \|_{X_s^{s,q}}$ such that for Δt small enough and $n\Delta t \leq t_0$:*

$$\sup_{i\in I, t_n \leq t_0} | f_{B_v}(t_n,x_i(t_n),v_i) - f_i^n | \leq C[\Delta t + \epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m}](\exp(\frac{C}{\tau}) - 1)$$

Remark 3.1 : If we suppose that ζ is positive, the moment conditions (5.23) can not be satisfied for $r > 2$. Consequently, with such a choice, we restrict ourselves to $r = 2$.
Remark 3.2 : We have not studied the dependence of the constant with respect to B_v in order to avoid tedious computations. It follows that we have not a rate of convergence for $f(t_n,x_i^n,v_i) - f_i^n$. Nevertheless we have :
Corollary 3.1 : Using the previous estimates and Proposition 5.3.1, we can estimate $\sup_{i\in I} | f(t_n,x_i^n,v_i) - f_i^n |$ where f is the solution of the B.G.K. model (5.5) :

$$\sup_{i\in I, t_n \leq t_0} | f(t_n,x_i(t_n),v_i) - f_i^n | \quad \leq \frac{C_{t_0}}{B_v^{q-N-2}} + C_{B_v,t_0}[\frac{\Delta t}{2\tau} + \frac{1}{\tau}(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})]$$

<u>**Proof of Theorem 5.3.1:**</u> The remaining of this section is devoted to the proof of Theorem 5.3.1. We first introduce some notations. In the following, for the sake of simplicity, we omit the indice B_v and we note : $x_i^{n+1} = x_i(t_{n+1})$ and $M_i(t_n + s) = M(t_n + s,x_i(t_n + s),v_i)$. The difference $f(t_n,x_i^n,v_i) - f_i^n$ is denoted by e_i^n, we introduce also the space $\ell^\infty(I)$ of bounded sequences and we set : $\| e^n \|_\infty = \sup_{i\in I} | e_i^n |$. The proof uses the results stated in the previous section and some other results concerning the particle approximation, see [22],[30].
With the notations introduced before, (5.26) may be written :

$$f(t_{n+1},x_i^{n+1},v_i) = \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})f(t_n,x_i^n,v_i) + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} M_i(t_n+\sigma)\exp(-\frac{\Delta t - \sigma}{\tau})\, d\sigma \quad (5.34)$$

The numerical scheme is defined by (5.27). If we make the difference (5.34)-(5.27), we obtain :

$$e_i^{n+1} = \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})e_i^n + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} [M_i(t_n+\sigma) - M_i^n]\exp(-\frac{\Delta t - \sigma}{\tau})\, d\sigma$$

Consequently :

$$\| e^{n+1} \|_\infty \leq \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) \| e^n \|_\infty + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} \sup_{i\in I} | M_i(t_n+\sigma) - M_i^n | \exp(-\frac{\Delta t - \sigma}{\tau})\, d\sigma$$

But, $M(t,.,.) \in W_q^{s,\infty}(\Lambda)$, see (5.20), consequently $M(t,.,.)$ is continuous for $s > 0$. Furthermore :

$$\sup_{i\in I} | M_i(t_n+s) - M_i^n | \leq \| M(t_n+s,x+sv,v) - M_h(t_n,x,v) \|_{L^\infty(\Lambda_V)}$$

where M_h is defined by (5.25). We set $M(t_n + s) = M(t_n + s,x + sv,v)$. Thus :

$$\| e^{n+1} \|_\infty \leq \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) \| e^n \|_\infty + \frac{1}{\tau}\int_0^{\Delta t} \| M(t_n+s) - M_h(t_n) \|_{L^\infty(\Lambda_V)} \exp(-\frac{\Delta t - s}{\tau})\, ds \quad (5.35)$$

We have :

$$\| M(t_n+s) - M_h(t_n) \|_{L^\infty(\Lambda_V)} \leq \| M(t_n+s) - M(t_n) \|_{L^\infty(\Lambda_V)} + \| M(t_n) - M_h(t_n) \|_{L^\infty(\Lambda_V)}$$

Using the Taylor's formula for M, we obtain :

$$\| M(t+s) - M(t) \|_{L^\infty(\Lambda_V)} \leq \| \frac{\partial M}{\partial t} \|_{L^\infty(\Lambda_V)} (t)\ s + \| v.\nabla_x M \|_{L^\infty(\Lambda_V)} (t)\ s$$

Thanks to Proposition 5.1.4, we have :

$$\| M(t+s) - M(t) \|_{L^\infty(\Lambda_V)} \leq C\ s$$

Now, we have to bound $M(t_n) - M_h(t_n)$ in $L^\infty(\Lambda_V)$ which corresponds to the approximation of the collision operator.

Lemma 5.3.4 *Suppose that f_0 satisfies (5.33) and the hypothesis of Theorem 5.1.2. Suppose also that $\zeta \in W^{m,1}(I\!R^N)$, is positive and satisfies the moment conditions (5.23). Then (ρ_h, U_h, T_h) defined in (5.24) belong to K.*

<u>Proof :</u> Thanks to hypothesis (5.33) and Remark 2.1 we have :
$\forall i \in I\ \ f_i^h \geq \exp(-\frac{t}{\tau})\, f_* > 0$. Then, we deduce that :

$$\rho_h(t,x) \geq \exp(-\frac{t}{\tau})\, f_* \sum_{i \in I} w_i^h \zeta_\epsilon(x - x_i(t))$$

As ζ is positive, there exists positive constants C and α such that for $|\ y\ | \leq C\epsilon$, $\zeta_\epsilon(y) \geq \frac{\alpha}{\epsilon^N} > 0$.

The number of particles to take into account in the sum is proportional to $\dfrac{\epsilon^N}{\Delta x \Delta v}$. Thus, since $w_i^h = \Delta x \Delta v$, there exists a positive constant C such that for all $i \in I\ \ \rho_i^h \geq C$. In the same way, we obtain a lower bound for T_h and the upper bounds are deduced easily from the hypothesis on f_0.
Then we can apply Lemma 5.3.1 for $(\rho_{B_v}, U_{B_v}, T_{B_v})$ and (ρ_h, U_h, T_h) and there exists a constant C_{t_0} such that :

$$\| M - M_h \|_{L^\infty(\Lambda_V)} (t) \leq C_{t_0} [\| \rho - \rho_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| \rho U - (\rho U)_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| E - E_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t)] \tag{5.36}$$

At this level we shall divide the end of the proof of Theorem 5.3.1 into four steps. In the first one, we consider the error caused by the regularisation in x (5.23). Then, in a second step, we consider the error introduced by the use of the quadrature formula (5.24) to compute the hydrodynamic quantities which define the Maxwellian. In a third step, we have to estimate the error in the approximation of the macroscopic quantities by using approximate values of the kinetic density instead of exact values. And we conclude the proof of Theorem 5.3.1 in the fourth step.

First step

We note $\rho_\epsilon(x) = \rho * \zeta_\epsilon(x)$, $(\rho U)_\epsilon(x) = (\rho U) * \zeta_\epsilon(x)$, $E_\epsilon(x) = E * \zeta_\epsilon(x)$. Let us denote by $A_1(t)$ the right hand side of (5.36):

$$A_1(t) \leq C_{t_0} [\| \rho - \rho_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| \rho U - (\rho U)_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \\ \| E - E_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t)] + A_2(t) \tag{5.37}$$

where:

$$A_2(t) = C_{t_0} [\| \rho_\epsilon - \rho_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| (\rho U)_\epsilon - (\rho U)_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \\ \| E_\epsilon - E_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t)]$$

Lemma 5.3.5 *If ζ satisfies the conditions (5.23) for some integer $r \geq 2$, then there exists a constant $C > 0$, such that for any function $g \in W^{r,p}(I\!R^N)$:*

$$\| g - g * \zeta_\epsilon \|_{L^p(I\!R^N)} \leq C \, \epsilon^r \ \mid g \mid_{r,p,I\!R^N}$$

For a proof of this Lemma see [30].
In the case $p = +\infty$, considering the energy E for instance, we have:

$$\| E - E * \zeta_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) \leq C \, \epsilon^r \, \| \mid v \mid^2 f \|_{L^1(I\!R^N; W^{s,\infty}(\Omega))} (t) \quad , \quad r \leq s$$

Using Theorem 5.1.2 one can easily check that it exists a constant C such that:

$$\| \mid v \mid^2 f \|_{L^1(I\!R^N; W^{s,\infty}(\Omega))} (t) \leq C \ \| f \|_{s,q,\Lambda} (t) \leq C_{t_0}$$

Using the preceding estimates, we have:

$$\| \rho - \rho_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| (\rho U) - (\rho U)_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| E - E_\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)} (t) \leq C_{t_0} \, \epsilon^r$$

Then with **Remark 3.1**:

$$A_1(t) \leq C_{t_0} \, \epsilon^2 + A_2(t) \tag{5.38}$$

Second step

We first define:

$$\begin{pmatrix} \rho_d(t,x) \\ (\rho U)_d(t,x) \\ E_d(t,x) \end{pmatrix} = \sum_{j \in I} w_j \begin{pmatrix} 1 \\ v_j \\ \dfrac{\mid v_j \mid^2}{2} \end{pmatrix} f(t,x_j,v_j) \, \zeta_\epsilon \, (x - x_j(t)) \tag{5.39}$$

Then:

$$A_2(t) \leq C_{t_0} [\| \rho_\epsilon - \rho_d \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| (\rho U)_\epsilon - (\rho U)_d \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \\ \| E_\epsilon - E_d \|_{L^\infty(\Omega)} (t)] + A_3(t) \tag{5.40}$$

where:

$$A_3(t) = C_{t_0} [\| \rho_d - \rho_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \| (\rho U)_d - (\rho U)_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t) + \\ \| E_d - E_h \|_{L^\infty(\Omega)} (t)]$$

In order to bound the first part of the right hand side of (5.40), we use the following result proved by S.Mas-Gallic and F.Poupaud in [22].

Theorem 5.3.2 *Suppose that $\zeta \in W^{m,1}(I\!R^N)$, $m \geq 2$, and satisfies the moment conditions (5.23) for some integer r. Then, there exists a constant $C_{t_0} > 0$ such that for any function $g \in W^{s,\infty}(\Lambda_V)$, $s = max(r,m)$:*

$$\| K_\epsilon g - K_r g \|_{L^\infty(\Omega)} \leq C\,(\Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})\ \| g \|_{W^{s,\infty}(\Lambda_V)}$$

where $K_\epsilon g$ and $K_r g$ are respectively defined by :

$$K_\epsilon g(x) = \int_{I\!R^N} (\int_{|v|\leq B_v} g(y,v)\,dv) * \zeta_\epsilon(x-y)\,dy\ ;\ K_r g(x) = \sum_{j\in I} w_j g(x_j,vj)\,\zeta_\epsilon(x-x_j)$$

Since $(1,v,\mid v\mid^2)\,f \in W^{s,\infty}(\Lambda_V)$, one can easily bound $A_2(t)$.

$$A_2(t) \leq C_{t_0}\,(\Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})\ + A_3(t) \tag{5.41}$$

Third step

If we compute the difference (5.39)-(5.24) we obtain, using the definition $e_j(t) = f(t,x_j,v_j) - f_j(t)$:

$$\begin{pmatrix} (\rho_d - \rho_h)(t,x) \\ ((\rho U)_d - (\rho U)_h)(t,x) \\ (E_d - E_h)(t,x) \end{pmatrix} = \sum_{j\in I} w_j \begin{pmatrix} 1 \\ v_j \\ \mid v_j \mid^2 \end{pmatrix} e_j(t)\,\zeta_\epsilon\,(x - x_j(t))$$

The desired bound is a simple consequence of a Lemma proved by S.Mas-Gallic and F.Poupaud in [22].

Lemma 5.3.6 *The mapping*

$$\overline{g}(t)\ =\ (g_j(t))_{j\in I} \rightarrow g_h^\epsilon(x,t)\ =\ \sum_{j\in I} w_j g_j(t)\zeta_\epsilon(x - x_j(t))$$

where ζ has a support compact in $]-1,1[$, is continuous from $\ell^\infty(I)$ into $L^\infty(\Lambda_V)$, and there exists a constant C_{B_v,t_0} such that for any $\overline{g}(t) \in \ell^\infty(I)$, and any $t \in]0,t_0[$,

$$\| g_h^\epsilon \|_{L^\infty(\Omega)}\,(t) \leq C_{B_v,t_0}\ \| \overline{g}(t) \|_\infty$$

Applying this lemma to $e(t)$ leads to :

$$A_3(t)\ \leq C_{B_v,t_0}\ \| e \|_\infty\,(t) \tag{5.42}$$

Fourth step

Finally, using (5.37,5.38,5.41,5.42), we have :

$$\| M - M_h \|_{L^\infty(\Lambda)}\,(t) \leq C_{t_0}(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m}) + C_{B_v,t_0}\,\| e \|_\infty\,(t) \tag{5.43}$$

With (5.43), (5.35) becomes :

$$\begin{aligned}\| e^{n+1} \|_\infty \leq \;& \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) \| e^n \|_\infty + \frac{C_{t_0}}{\tau} \int_0^{\Delta t} \exp(-\frac{(\Delta t - s)}{\tau}) \\ & \{s + [(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})] + C_{B_v,t_0} \| e^n \|_\infty\} \, ds\end{aligned}$$

Using Theorem 5.1.2 and making the explicit computation leads to :

$$\begin{aligned}\| \; & e^{n+1} \|_\infty \leq (\exp(-\frac{\Delta t}{\tau}) + C_{B_v,t_0}(1 - \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}))) \| e^n \|_\infty + \\ & C_{t_0}[\Delta t - \tau(1 - \exp(-\frac{\Delta t}{\tau})) + (1 - \exp(-\frac{\Delta t}{\tau}))(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})]\end{aligned} \tag{5.44}$$

Now for Δt small enough, (5.44) becomes :

$$\| e^{n+1} \|_\infty \leq (1 + C_{B_v,t_0} \frac{\Delta t}{\tau}) \| e^n \|_\infty + [\frac{\Delta t^2}{2\tau} + \frac{\Delta t}{\tau}(\epsilon^2 + \Delta v^2 + \frac{\Delta x^m}{\epsilon^m})]$$

Applying a discrete Gronwall lemma and noticing that $e^0 = 0$ ends the proof of Theorem 5.3.1. □

The number of particles

The aim of this part is to determine theoretically the influence of the number of particles on the method.
We are going to optimize the part of (5.44) corresponding to the particle approximation, i.e. :

$$\frac{\Delta x^m}{\epsilon^m} + \Delta v^2 + \epsilon^2 \tag{5.45}$$

where $r = 2$ is the order of the first moment different from zero and m measures the regularity of the cut-off function. This term is optimized when ϵ and Δx are chosen such that $\epsilon^{-m} \, \Delta x^m$ is proportional to ϵ^2 which gives ϵ proportional to $\Delta x^{\frac{m}{2+m}}$. With such a choice, (5.45) becomes :

$$\Delta x^{\frac{2m}{2+m}} + \Delta v^2 \tag{5.46}$$

Let us denote by N_p the total number of particles. It is proportional to $\dfrac{1}{\Delta x \, \Delta v}$. Consequently, (5.46) becomes :

$$(\frac{1}{N_p \, \Delta v})^{\frac{2m}{2+m}} + \Delta v^2$$

The optimal parameters are obtained for Δv proportional to $N_p^{-\frac{2m}{2(2+m)+2m}}$. Finally choosing such parameters, we find that the error on the kinetic density f, for Δt small enough is bounded as follows :

$$\sup_{i \in I, t_n \leq t_0} | f_{B_v}(t_n, x_i(t_n), v_i) - f_i^n | \leq C(\Delta t + (N_p)^{-\frac{m}{1+m}})(\exp(\frac{C}{\tau}) - 1)$$

5.4 Numerical experiments

In order to validate the method, we performed two test cases:

1. The Sod shock tube: this classical one-dimensional test case was selected here for we can compare the numerical results to the exact solution in the limit $\tau \to 0$. We recall that Euler system of equations can be derived from the conservation laws for the moments of the distribution f in the limit process, see [2] for example.
2. A normal shock: this test case was chosen for it allows us to validate the numerical treatment of the boundary conditions.

We refer the reader to [17] for numerical simulations in two space dimensions.

5.4.1 The Sod shock tube

In terms of fluid dynamics, the Sod shock tube problem [31] corresponds to a Riemann problem in $I\!R$ with the following initial data:

$$\begin{cases} \rho_L^0 = 1 & U_L^0 = 0 & P_L^0 = 1 \\ \rho_R^0 = \dfrac{1}{8} & U_R^0 = 0 & P_R^0 = \dfrac{1}{10} \end{cases}$$

The subscripts L and R refer to left and right states respectively. The initial distribution function f^0 is given by: $f^0 = M(\rho^0,(\rho U)^0,E^0)$ where M is given by (5.2). The classical slip condition turns here into specular reflection:

$$f(t,x,v) = f(t,x,-v) \quad x = 0,1.$$

In this experiment we used the described scheme with $\tau = 10^{-8}$. The computed density, pressure,temperature and velocity are plotted on the figures 5.1.a,5.1.b,5.1.c,5.1.d at time $t = 0.16$ and compared to the exact Euler solution (dotted lines). The results show a slight amount of numerical dissipation which is particularly visible on the rarefaction and the contact discontinuity waves. This dissipation is usually attributed to the presence of large velocities which induce some diffusion, see [27]. Despite this diffusion, one can claim that the results are quite good.

5.4.2 Normal shock

Initially, the gas is supposed to be in thermal equilibrium. The free-stream flow is defined by the following data:

$$\rho_\infty = 1 \quad u_\infty = -8 \quad RT_\infty = 1.85$$

We suppose that there is a solid boundary in $x = 0$ where the molecules are specularly reflected. Consequently a normal shock is produced with a Mach number about 6.2. The domain of computation is $[0{,}25\,\lambda_\infty]$, where λ_∞ is the infinite mean free path. We refer the reader to [6] for comparisons with other numerical results. One may precise that C.Buet has proposed a deterministic method to compute the solutions of the Boltzmann equation itself in the case of monoatomic species. The computed density, temperature and velocity are plotted on figures 5.2.a,5.2.b,5.2.c. Despite some numerical diffusion and the relative simplicity of the model, the results can be compared to those obtained in [6].

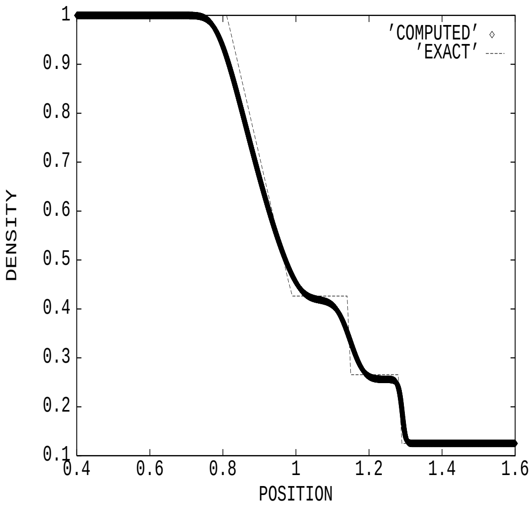


FIG 5.1.a: Density at time t=0.16

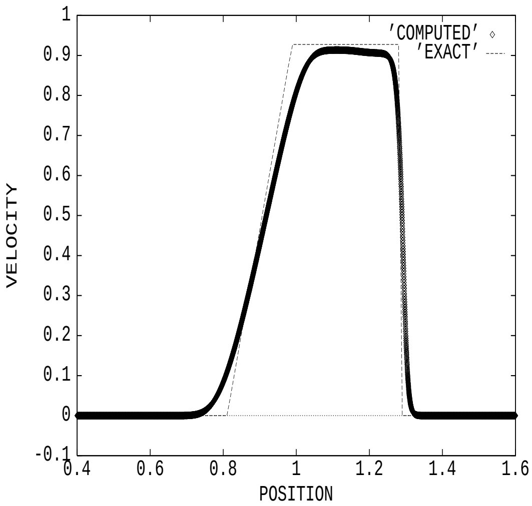


FIG 5.1.b: Velocity at time t=0.16

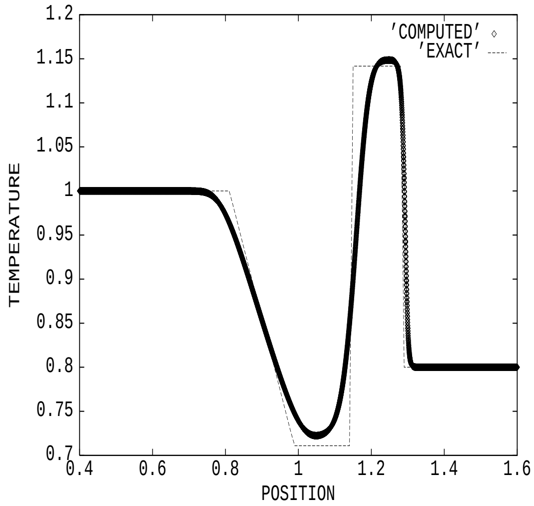


FIG 5.1.c: Temperature at time t=0.16

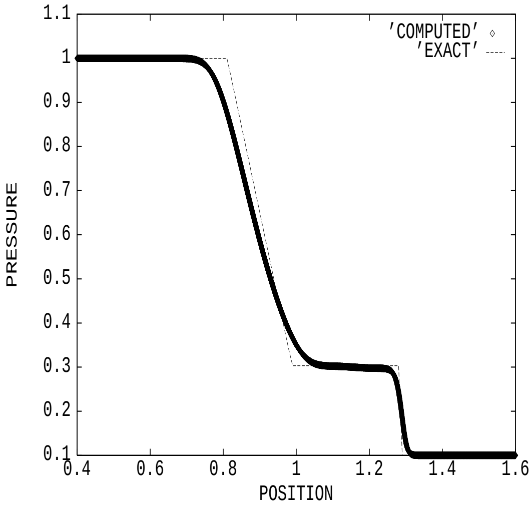


FIG 5.1.d: Pressure at time t=0.16

FIG. 5.1 – *Macroscopic quantities*

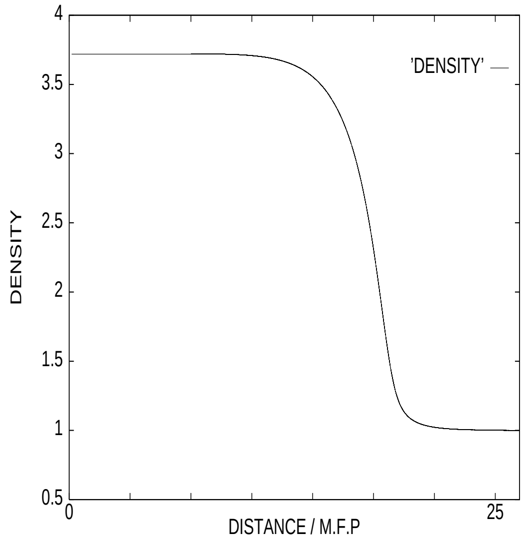


FIG 5.2.a: Density

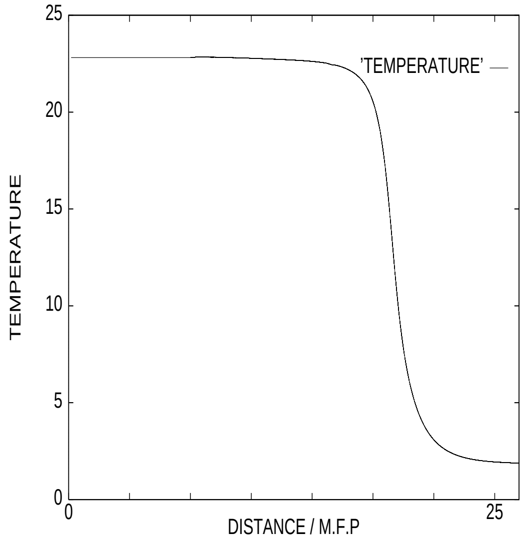


FIG 5.2.b: Temperature

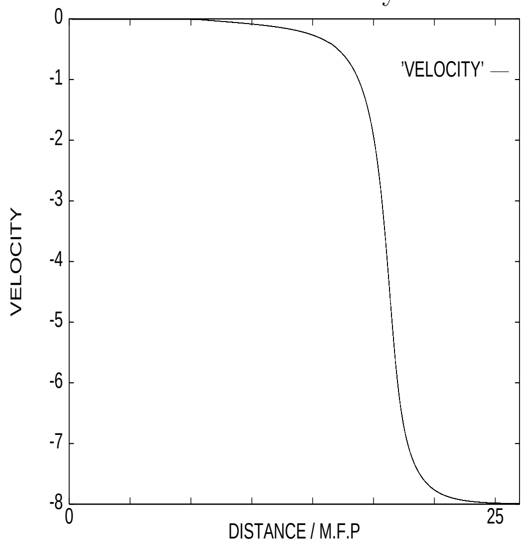


FIG 5.2.c: Velocity

Fig. 5.2 – *Macroscopic quantities*

5.5 Conclusion

The numerical approach is based on a deterministic particle method and on a non classical time integration scheme. We have proved that for fixed τ and B_v the above scheme is a first-order time scheme. Numerical solutions for the Sod shock tube and a normal shock were presented and compared to the exact solution in the first case and to a deterministic Boltzmann simulation in the second case. We note that the B.G.K. solutions compare well with the full Boltzmann simulations. Because of the low accuracy of the scheme used, we are interested in using time integration schemes, like Runge-Kutta schemes, which are more precise. The study and the implementation of such schemes are in progress.

Chapitre 6

Calcul massivement parallèle

6.1 Introduction

Les méthodes particulaires, qu'elles soient de type déterministe ou de type probabiliste, nécessitent un grand nombre de particules pour simuler des phénomènes complexes. Ceci constitue une limite sur les ordinateurs classiques de type séquentiel. L'avènement de machines massivement parallèles suscite l'espoir de simuler ce type de phénomènes en des temps raisonnables. De nombreux travaux, parmi lesquels nous pouvons citer L.N.Long, M.Kamon et J.Myczkowski [19], F.Coron, P.Homsi [8], ont permis des avancées dans ce domaine.
En ce qui concerne les calculateurs parallèles, il existe un grand nombre d'architectures disponibles: machines synchrones (SIMD) ou asynchrones (MIMD), machines à grain fin ou à grain moyen, diversité des topologies physiques d'interconnexion des éléments de calcul. Nous avons utilisé, dans cette étude, une machine massivement parallèle de type SIMD, la Connection Machine et une machine de type MIMD, la Meiko-CS1. Nous rapportons les résultats de performance obtenus sur ces deux types de machine, voir [16] et [15], qui représentent les deux grands modèles existant à ce jour dans le parallélisme massif.
Nous allons présenter pour chacune des machines parallèles utilisées ses principales caractéristiques ainsi que l'algorithme employé. Enfin nous présenterons les résultats de performance obtenus pour les machines ci-dessus et les comparerons à ceux obtenus sur un Cray-YMP.

6.2 Parallélisme SIMD

Nous rappelons tout d'abord que le type **SIMD** (**S**ingle **I**nstruction **M**ultiple **D**ata) met en jeu des processeurs qui, à un instant donné, exécutent la même instruction sur des données différentes. La Connection Machine **CM200** est un calculateur à architecture massivement parallèle de type SIMD à mémoire distribuée comprenant de **4 K** à **64 K** processeurs (1 K=1024 processeurs) disposant chacun d'une mémoire locale. Ces processeurs sont physiquement regroupés par **noeuds** (1 noeud est constitué de 32 processeurs, d'une interface de calcul et d'une unité de calcul flottant 32 ou 64 bits). Ces noeuds sont reliés entre eux par un réseau de communication de type hypercube.

Il existe essentiellement deux types de communication :

- NEWS (North-East-West-South) : mécanisme permettant de faire communiquer des processeurs voisins dans une grille définie par l'utilisateur.
- Le Router : mécanisme général permettant de faire communiquer des processeurs quelconques. Ce modéle de communication est néanmoins plus coûteux que le précédent.

Le système de la Connection Machine permet de simuler un nombre de processeurs supérieur au nombre de processeurs physiques, par une division de la mémoire locale de chaque processeur. Le rapport du nombre de processeurs à simuler sur le nombre de processeurs physiques est appelé **VPR** (**V**irtual **P**rocessor **R**atio). Parmi les langages de haut niveau existant sur la Connection Machine, nous avons utilisé durant ce travail le CM Fortran, qui est basé sur le Fortran 77 standard mais qui reprend certaines extensions vectorielles du Fortran 90. Le lecteur qui le souhaite pourra trouver des renseignements plus précis dans [32].

Description de l'algorithme

Il s'agit tout d'abord de choisir la manière d'organiser la répartition des données entre les processeurs. Le choix optimal est celui qui minimise les communications entre processeurs, n'entraîne pas d'opérations redondantes et ne nécessite pas de stockage supplémentaire en némoire. Une telle répartition n'existe pas toujours, ondoit alors trouver un compromis entre ces trois contraintes.

Pour le modéle B.G.K., il y a essentiellement deux manières de répartir les données:

1. Le choix naturel semble être d'associer une particule à un processeur. La partie convection de l'algorithme est ainsi parfaitement parallélisée, et aucune communication n'est nécessaire pour déterminer les nouvelles positions des particules. Cependant une telle répartition est moins bien adaptée à la phase de collision car cette phase fait intervenir des particules associées à des processeurs différents et donc nécessitera des communications. Comme de plus cette phase de collision est très coûteuse du point de vue des opérations un tel choix de répartition des données conduirait à un algorithme très peu efficace sur la Connection Machine. Par conséquent nous avons préféré faire un autre choix concernant la répartition des données.

2. Comme nous venons de le voir il est nécessaire que la structure de données choisie se prête bien à la phase de collision. Il faut donc faire en sorte de minimiser les commumications entre les processeurs durant la phase de collision. Une manière possible de respecter cette contrainte consiste àassocier à chaque processeur les informations nécessaires au calcul de l'opérateur de collision. Cependant un tel choix va entraîner un stockage redondant en mémoire et pourrait donc conduire à une limitation concernant le nombre de particules.

Nous rappelons que nous avons choisi une fonction cut-off à support compact dans $]-1,1[^3$, on introduit ainsi une discrétisation fictive de l'espace physique en cellules de même taille (ϵ). Chaque cellule ainsi définie sera associée à un processeur virtuel. Par conséquent, pour calculer l'opérateur de collision sans qu'aucune communication n'intervienne, il est nécessaire de stocker dans la mémoire locale de chaqueprocesseur virtuel les données des cellules voisines (2 en dimension 1, 8 en dimension 2), voir

figure 6.1.
Ainsi il ne sera nécessaire de communiquer qu'après la phase de convection des par-

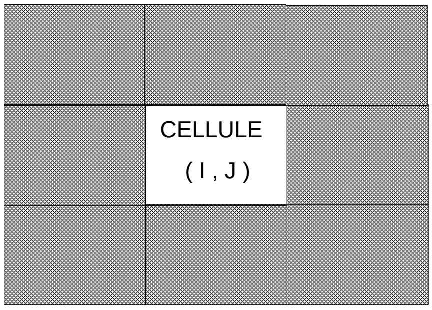


FIG. 6.1 – *Cellule (I,J) et ses voisines*

ticules. Après chaque pas de temps, la nouvelle position de la particule i est donnée par :

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \Delta t \mathbf{v}_i^n$$

Sans contrainte sur Δt, une particule peut quitter sa cellule initiale et atteindre une autre cellule non nécessairement voisine. Dans ce cas, le mécanisme de communication le plus général (Router) sera utilisé et le coût des communications peut être alors très important.
Pour minimiser le coût des communications, on choisit Δt de telle façon qu'une particule ne puisse atteindre en un pas de temps qu'une des cellules avoisinantes (figure 6.1). Ainsi les communications n'ont lieu qu'entre processeurs voisins et on peut donc utiliser NEWS pour communiquer et diminuer ainsi de façon significative le coût des communications.

L'algorithme

L'algorithme peut se résumer ainsi :
A chaque pas de temps Δt :

1. *Phase de convection*
2. *Prise en compte des conditions aux limites*
3. *Phase de communication*
4. *Calcul de l'opérateur de collision*
5. *Mise à jour des solutions*

6.3 Parallélisme MIMD

Contrairement au type SIMD, le type **MIMD** (**M**ultiple **I**nstruction **M**ultiple **D**ata) met en jeu plusieurs processeurs indépendants pouvant exécuter des tâches différentes sur des données différentes. Nous décrivons brièvement les caractéristiques de la machine utilisée.
La Meiko "Concerto" est une machine parallèle à mémoire distribuée de type MIMD. La configuration utilisée comprend 16 processeurs Intel 860 (pour les calculs flottants).

Chacun de ces processeurs est relié à 2 transputers T800 (ayant chacun 4 liens physiques) pour les communications. Il est à noter que pour des raisons techniques, seuls 14 processeurs i860 étaient disponibles durant nos simulations. Nous avons utilisé, au cours de cette étude, le compilateur Fortran Greenhills (g860apx).

Décomposition du domaine de calcul

La parallélisation du code s'effectue en décomposant le domaine de calcul en plusieurs sous-domaines et en associant chaque sous-domaine à un processeur. L'algorithme utilisé ici ressemble beaucoup au précédent.
En effet après la phase de convection il y a une phase de communication où les processeurs s'échangent les informations concernant les particules ayant quitté le sous-domaine où elles se trouvaient. Notons au passage que comme précédemment on s'impose une contrainte sur le pas de temps Δt de telle façon qu'une particule ne puisse atteindre en un pas de temps qu'un sous-domaine voisin.
Concernant la phase de collision, nous rappelons que le choix d'une fonction cut-off à support compact entraîne que seules les particules situées dans le cube de centre x et de côté 2ϵ interviennent dans le calcul de la Maxwellienne au point x. Par conséquent pour qu'aucune communication ne soit nécessaire durant la phase de collision, il faut associer à chaque processeur un sous-domaine défini précédemment ainsi qu'un voisinage de longueur ϵ autour de ce sous domaine (figure 6.2). On parlera alors de recouvrement des sous-domaines.

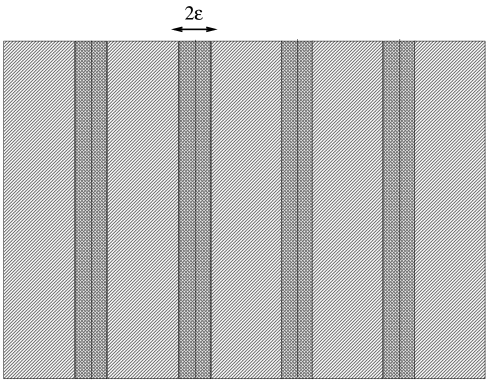


FIG. 6.2 – *Décomposition du domaine de calcul*

Utilisation de PARMACS

Pour assurer une portabilité maximale entre différentes machines parallèles de type MIMD et pour adapter facilement un code séquentiel sur une de ces machines nous avons utilisé le logiciel PARMACS qui contient des librairies de communication. L'utilisation de ces librairies permet de gérer plus facilement les échanges de message, d'une part et décharge l'utilisateur de l'assignation des tâches aux processeurs d'autre part. L'utilisation de ce logiciel rend ainsi le programme moins dépendant de la machine utilisée.

6.4 Résultats de performance

Nous donnons ici des résultats de performance obtenus en considérant le modèle B.G.K. en dimension N=2. Plus précisément, nous considérons l'évolution de particules dans un domaine rectangulaire, décomposé en sous-domaines de même taille ce qui assure une répartition quasi équitable des tâches entre processeurs.
Nous comparons les résultats obtenus sur les trois machines suivantes: la CM200 (avec 8 K ou 16 K processeurs), la Meiko-CS1 avec 14 processeurs i860 et le Cray-YMP mono-processeur. Nous donnons des résultats en simple et en double précision (respectivement notée S.P et D.P) pour les deux premières machines. Notons que nous avons utilisé les librairies de vectorisation VAST, pour optimiser les performances sur la Meiko-CS1. Nous présentons aussi les résultats obtenus avec et sans vectorisation sur les figures 6.3 et 6.4. Le gain obtenu en vectorisant est de l'ordre de 40% en moyenne. Nous donnons dans les tables ci-dessous, le temps CPU par itération, les Mflops en fonction du nombre de particules. Nous avons fait varier ce nombre tout en laissant constant le nombre de particules par cellule.
Nous tenons à préciser que le seul critère objectif de comparaison entre les différentes

Nb parti.	Machine	Nb procs	Mflops	Temps CPU s/iter
101376 101376	Meiko CS1 CM200	14 8 K	234 748	9.1 7.8
202752 202752	Meiko CS1 CM200	14 8 K	230.2 879	18.7 13.2
405504 405504	Meiko CS1 CM200	14 8 K	220.4 966	39.2 24
811008 811008 811008	Meiko CS1 CM200 CM200	14 8 K 16 K	219 1017 1950	78.9 45.6 23.8
1216512 1216512	Meiko CS1 CM200	14 8 K	217 1036	119.5 67.2

TAB. 6.1 – *Résultats de performance en simple précision*

machines nous parait être le temps CPU, car les algorithmes sont légèrement différents (notamment entre la Meiko CS1 et la CM200), bien que le nombre d'itérations pour

Nb parti.	Machine	Nb procs	Mflops	Temps CPU s/iter
101376	Meiko CS1	7	87.8	24.6
101376	Meiko CS1	14	174.2	12.4
101376	Cray YMP	1	150.8	14.2
101376	CM200	8 K	400	10.9
202752	Meiko CS1	7	86.9	49.7
202752	Meiko CS1	14	174.2	24.8
202752	Cray YMP	1	150.2	28.7
202752	CM200	8 K	540	18.9
405504	Meiko CS1	7	86.7	99.6
405504	Meiko CS1	14	173.8	49.7
405504	Cray YMP	1	150	57.6
405504	CM200	8 K	646	35.9
811008	Meiko CS1	14	172.9	99.9
811008	Cray YMP	1	149.8	117
811008	CM200	8 K	707	65.6

Tab. 6.2 – *Résultats de performance en double précision*

atteindre la solution physique soit identique pour toutes les machines. Il apparaît qu'en double précision, la CM200 8 K est environ 1,5 fois plus rapide que la Meiko-CS1 et 1,8 fois plus rapide que la Cray-YMP. En simple précision ces rapports deviennent respectivement 1,7 et 2,5. Nous remarquons également que lorsqu'on multiplie le nombre de particules et le nombre de processeurs par un même rapport, le temps CPU par itération reste à peu près constant, aussi bien pour la CM200 que pour la Meiko-CS1. D'autre part, le coût des communications est très faible: environ 5 % du temps CPU sur la Connection Machine et de l'ordre de 1 % sur la Meiko-CS1.

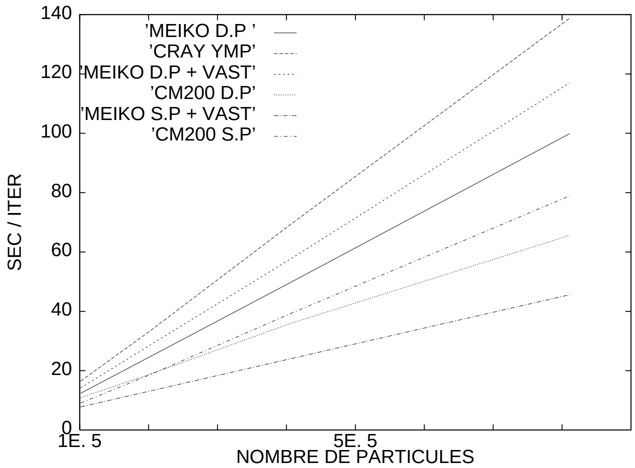


FIG. 6.3 – *Temps CPU par itération*

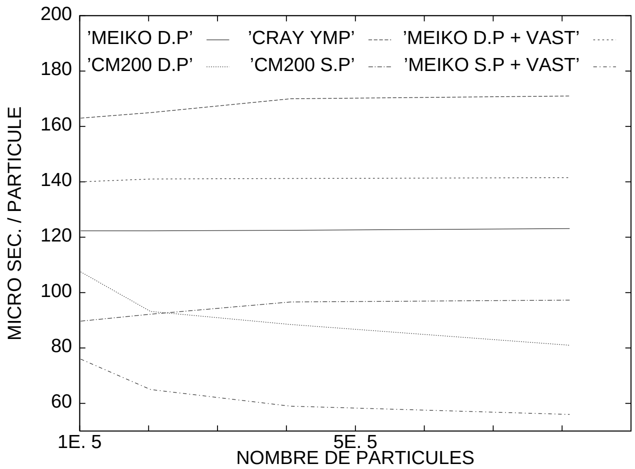


FIG. 6.4 – *Temps CPU par particule*

6.5 Conclusion

Les résultats de performance montrent, aussi bien sur la Connection Machine que sur la Meiko-CS1, le haut niveau de parallélisme de la méthode. On notera que les performances obtenues sur la Connection Machine sont supérieures à celles obtenues sur la Meiko-CS1 et ce en simple et double précision. D'autre part, les performances enregistrées sur ces deux machines sont supérieures à celles obtenues sur un ordinateur vectoriel : le Cray-YMP mono-processeur. Nous tenons à préciser que l'implémentation de la méthode a été plus rapide sur la Meiko-CS1 et que d'autre part avec l'utilisation du logiciel PARMACS, il est possible de porter le code sur d'autres machines parallèles de type MIMD, comme un nCUBE ou l'iPSC860, par exemple. De tels résultats sont encourageants et montrent tout l'intérêt du parallélisme massif. Ces premiers résultats incitent à l'extension de ces méthodes, d'une part, à des géométries plus complexes et, d'autre part, à des écoulements tridimensionnels.

Chapitre 7

Conclusion

Nous avons présenté dans cette partie une méthode particulaire déterministe pour résoudre le modèle B.G.K. pour l'équation de Boltzmann. Nous avons proposé un schéma d'intégration en temps qui nous permette de considérer des valeurs pour le temps de relaxation τ variant de 0 (limite fluide) à l'infini (transport libre). Nous avons également étudié des schémas de Runge-Kutta et démontré l'existence de coefficients de Runge-Kutta permettant de préserver la positivité de la solution.
Nous avons présenté des résultats numériques en une dimension d'espace: le tube à choc de Sod et comparé la solution numérique obtenue à la solution exacte des équations d'Euler et en deux dimensions d'espace où nous avons étudié l'écoulement d'un gaz raréfié sur une plaque plane avec et sans incidence. De plus dans ce dernier cas nous avons pu comparer nos résultats à ceux obtenus à l'aide d'une méthode de Monte-Carlo pour la résolution de l'équation de Boltzmann. Les résultats numériques présentés ont permis de valider la méthode proposée.
Nous avons développé une analyse théorique complète de la convergence et démontré qu'à τ fixé le schéma proposé était du premier ordre en temps. Nous avons également démontré l'existence de solutions régulières pour le modèle B.G.K..
Nous avons implémenté la méthode présentée sur des calculateurs massivement parallèles d'architecture aussi diverses que la Connection Machine et la Meiko-CS1. Les résultats de performance enregistrés sur ces deux machines sont supérieurs à ceux obtenus sur un ordinateur vectoriel: le Cray-YMP mono-processeur. Les résulats présentés sont très encourageants et montrent tout l'intérêt du parallélisme massif.
Ces premiers travaux incitent à l'extension de ces méthodes, d'une part, à des géométries plus complexes et, d'autre part, à des écoulements tridimensionnels.

Bibliographie

[1] C. BARDOS, P.DEGOND and F.GOLSE, *A priori estimates and existence results for the Vlasov and Boltzmann equations*, Lectures in Appl. Math., 23, (1988) pp. 189-207.

[2] C. BARDOS, F. GOLSE and D. LEVERMORE, *Fluid Dynamic Limits of Kinetic Equations : Formal Derivations*, J. of Stat. Phys., **63**, (1991) pp.323-344.

[3] P.L. BHATNAGAR, E.P. GROSS and M. KROOK, *A model for Collision Processes in Gases*, Phys.Rev.,**94**, (1954) p.511.

[4] G.A. BIRD, *Shock wave-boundary layer interactions in rarefied gas flows*, AIAA Paper, 91-1312, (1991).

[5] G.A. BIRD, *Molecular gas dynamics*, Clarendon Press, Oxford, (1976).

[6] C. BUET, *Résolution déterministe de l'equation de Boltzmann*, Rapport CEA, (1993).

[7] C. CERCIGNANI, *The Boltzmann Equation and Its Applications*, Springer Verlag, New-York, Berlin, (1988).

[8] F. CORON, P. HOMSI, *Utilisation du Parallélisme Massif en calcul d'écoulements raréfiés*, Contrat DRET, 90/587.

[9] G.H. COTTET, S. MAS-GALLIC, *A particle method to solve the Navier-Stokes system*, Numer. Math, **57**, pp. 1-23, (1990).

[10] G.H. COTTET, S. MAS-GALLIC, P.A. RAVIART, *Vortex methods for the incompressible Euler and Navier-Stokes equations*, in Comp. Fluid Dyn., Springer-Verlag, Berlin, (1988).

[11] G. H. COTTET, P. A. RAVIART, *Particle methods for the one-dimensional Vlasov-Poisson equations*, SIAM J. Numer. Anal., **21** (1984), pp.52-76.

[12] R. GLASSEY, J. SCHAEFFER, *Convergence of a particle method for the relativistic Vlasov-Maxwell system*, SIAM J. Numer. Anal., **28** (1991), pp.1-25.

[13] E. HAIRER, S.P. NORSETT and G. WANNER, *Solving ordinary differential equations 1, nonstiff problems*, Springer-Verlag, (1987).

[14] D. ISSAUTIER, *Convergence of a particle method for solving the B.G.K. equation*, SIAM J. on Num. Anal.

[15] D. ISSAUTIER, *Algorithmes particulaires pour calculateurs à architecture massivement parallèle*, Rapport CERMICS 93-20, (1993).

[16] D. ISSAUTIER, F. POUPAUD, L. FEZOUI, J.P. CIONI, *A parallel weighted particle algorithm for solving the Boltzmann (B.G.K.) equation on the Connection Machine*, Rapport CERMICS 93-14, (1993).

[17] D. ISSAUTIER, F. POUPAUD, L. FEZOUI, J.P. CIONI, *A parallel weighted particle algorithm for solving the Boltzmann (B.G.K.) equation on parallel computers*, submitted to Journal of SuperComputing.

[18] C. JACOBINI, L. REGGIANI, Rev. Mod. Phys., **55**, p.645, (1983).

[19] L.N. LONG, M. KAMON and J.MYCZKOWSKI, *A Massively Parallel Algorithm to solve the Boltzmann (B.G.K.) Equation*, AIAA Paper, 92–0563.

[20] Y. L. MARTIN, F. ROGIER, J. SCHNEIDER, *Une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann inhomogène*, C.R.A.S, **314**, pp. 483-487, (1992).

[21] S. MAS–GALLIC, *A deterministic particle method for the linearized Boltzmann Equation*, Trans.Theory Stat.Phys., **16**, (1987) pp.885-887.

[22] S. MAS–GALLIC and F. POUPAUD, *Approximation of the Transport Equation by a weighted particle method*, Trans.Theory Stat.Phys., **17**, (1988) pp.311-345.

[23] S. MAS-GALLIC, P.A. RAVIART, *A particle method for first order symetric systems*, Numer. Math., **51**, pp.323-352, (1987).

[24] B. NICLOT, P. DEGOND, F. POUPAUD, *Deterministic particle simulations of the Boltzmann transport equation of Semiconductors*, J. Comput. Phys., **78**, p. 313, (1988).

[25] A. A. PERACCHIO, *Kinetic theory analysis for the flowfield of a two-dimensional nozzle exhausting to a vacuum*, AIAA Journal, **8**, No. 11, (1970).

[26] B. PERTHAME, *Global Existence to the B.G.K. model of Boltzmann Equation*, J.Diff.Eq, **82**, (1989) pp.191-205.

[27] B. PERTHAME, *Boltzmann type schemes for gas dynamics and the entropy property* SIAM J. Numer. Anal., **27** (1990) pp. 1405-1421.

[28] B. PERTHAME, M. PULVIRENTI, *Weighted L^∞ bounds and uniqueness for the Boltzmann B.G.K. model*, Arch. Rat. Mech. Anal. 125(3) (1993), pp.289-295.

[29] P. C. PHILIPPI and R. BRUN, *Kinetic modeling of polyatomic gas mixture*, Physica **105** A , p.147, (1981).

[30] P. A. RAVIART, *An analysis of particle methods in Numerical Methods in Fluids Dynamics*, Lect. Notes in Math. **1127**, F. Bezzi ed., Springer Verlag, Berlin, (1985).

[31] G.A. SOD, *A survey of several finite difference methods for systems of non linear hyperbolic conservation laws* J. Comp. Phys., **27**, (1977).

[32] *Technical summary*, Thinking Machines Corporation, Version 6.0 (1990).

[33] H. D. VICTORY JR., G. TUCKER, K. GANGULY, *The convergence analysis of fully discretized particle methods for solving Vlasov-Poisson systems*, SIAM J. Numer. Anal., **28** (1991), pp.955-989.

Deuxième partie

Le système de Vlasov-Maxwell

Chapitre 1

Introduction

L'étude du transport des particules chargées intervient dans des secteurs variés de la physique et de la technologie; à titre d'exemple on peut citer les plasmas, les semiconducteurs, les dispositifs hyperfréquences, les canons à électrons, les faisceaux de particules chargées. Et de manière plus générale tous les problèmes de propagation d'ondes électromagnétiques et leur couplage avec l'évolution de particules chargées en prenant en compte les champs propres. La modélisation et la simulation numérique de l'ensemble de ces phénomènes font l'objet actuellement de nombreuses recherches fondamentales et appliquées. Pour ce type de problèmes, le modèle mathématique le plus général est fourni par les équations couplées de Vlasov et de Maxwell. De plus, la plupart des applications que l'on rencontre nécessite la résolution de ces équations dans des géométries tridimensionnelles complexes.
De nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre les équations de Vlasov-Maxwell [24]. Un solveur Vlasov-Maxwell est constitué de deux parties principales:

- Un intégrateur de trajectoires de particules relativistes.
- Une méthode pour résoudre les équations de Maxwell et ainsi obtenir une approximation du champ électromagnétique. De plus cette méthode doit nous permettre de considérer des géométries complexes.

Dans cette partie nous allons présenter une méthode pour résoudre les équations de Vlasov-Maxwell. Nous utilisons une méthode particulaire pour la partie Vlasov. Pour résoudre les équations de Maxwell, nous utilisons une formulation mixte Eléments finis-Volumes finis sur des maillages non structurés utilisant des fonctions de flux numériques décentrés. L'utilisation de maillages non structurés présente le double avantage d'une part, de prendre en compte de façon naturelle des géométries complexes et d'autre part, de permettre des raffinements locaux du maillage lorsque cela est nécessaire.
Le plan de cette partie qui comprend cinq chapitres est le suivant:
Dans le chapitre 2, nous présentons en détail les équations de Vlasov-Maxwell et nous effectuons l'adimensionnement de ces équations.
Dans le chapitre suivant, nous nous intéresserons au système de Maxwell et plus particulièrement aux relations de divergence (lois de Gauss) qui sont redondantes au niveau continu. Cependant au niveau discret, ces relations ne sont plus nécessairement vérifiées. Dans un premier temps, nous présentons une revue générale des schémas proposés pour la résolution des équations de Maxwell et des solutions proposées pour

tenir compte des lois de Gauss. Puis nous présentons la méthode que nous proposons pour prendre en compte au niveau discret les relations de divergence. Pour ce faire, nous proposerons une nouvelle formulation des équations de Maxwell que nous appellerons formulation (MV) du système de Maxwell et nous présenterons des résultats concernant cette nouvelle formulation.
Le chapitre 4 est consacré à la présentation détaillée de la méthode numérique utilisée. Dans un premier temps nous présentons la formulation mixte Eléments finis-Volumes finis utilisée pour l'approximation du système de Maxwell classique, on obtiendra en utilisant une approche MUSCL des schémas précis à l'ordre deux et trois en espace. D'autre part, comme l'on considère des phénomènes instationnaires, on a besoin de schémas d'intégration en temps précis, pour ce faire nous utiliserons des schémas de Runge-Kutta explicites d'ordre élevé. Dans un deuxième temps, nous présenterons l'approximation utilisée pour la formulation (MV) du système de Maxwell. Cette approximation s'inspire largement de celle utilisée pour les équations de Maxwell classique. Et enfin nous considèrerons l'équation de Vlasov qui sera approchée par une méthode particulaire. En fait, il faut résoudre les équations du mouvement d'un ensemble de macro-particules représentant chacune un grand nombre de particules réelles.
Dans le chapitre 5, nous commençons par étudier, dans le cas bidimensionnel, la stabilité des schémas présentés pour le système de Maxwell classique et sa nouvelle formulation (MV). A notre connaissance, il n'y a pas eu d'étude de stabilité concernant le système de Maxwell, excepté dans des cas particuliers. Puis dans un second temps, nous établissons les équations équivalentes ce qui nous permettra de montrer pourquoi la nouvelle formulation (MV) du système de Maxwell permet de mieux vérifier les relations de divergence (lois de Gauss).
Dans le dernier chapitre, nous présenterons des résultats numériques permettant de valider la méthode proposée. Nous commencerons par considérer le système de Maxwell et nous présenterons des résultats numériques, calcul de résonance et de SER, en deux et trois dimensions d'espace. Puis nous présenterons un cas test Vlasov-Maxwell en deux dimensions d'espace.

Chapitre 2

Equations de Vlasov-Maxwell et adimensionnement

2.1 Equations

Nous considèrerons, dans cette étude, une seule espèce de particules chargées (les électrons). Néanmoins tout ce que nous allons présenter peut s'étendre à plusieurs epèces de particules chargées.
Une population de particules chargées de masse au repos m et de charge q est caractérisée par sa fonction de distribution $f = f(t,\mathbf{x},\mathbf{p})$ dans l'espace des phases $(\mathbf{x},\mathbf{p})$ où $\mathbf{x}$ et $\mathbf{p}$ désignent respectivement les variables de position et d'impulsion. En l'absence de collisions, la fonction de distribution f est solution de l'équation de Vlasov relativiste:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0 \tag{2.1}$$

où $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$ est la force électromagnétique et la vitesse $\mathbf{v}$ se déduit de $\mathbf{p}$, dans le cas relativiste, par la relation:

$$\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v} \quad , \quad \gamma = (1 - \frac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}} \tag{2.2}$$

L'induction magnétique $\mathbf{B} = \mathbf{B}(t,\mathbf{x})$ et le champ électrique $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t,\mathbf{x})$ sont solutions des équations de Maxwell dans le vide:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 rot(\mathbf{B}) = -\dfrac{1}{\epsilon_0}\mathbf{j} \\ div(\mathbf{E}) = \dfrac{\rho}{\epsilon_0} \\ div(\mathbf{B}) = 0 \end{array} \right. \tag{2.3}$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, μ_0 la perméabilité magnétique et c la vitesse de la lumière. Ces quantités vérifient la relation: $\epsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$.

Les densités de charge et de courant $\rho = \rho(t,\mathbf{x})$ et $\mathbf{j} = \mathbf{j}(t,\mathbf{x})$ sont déterminées à partir de la fonction de distribution f par les relations:

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p} \tag{2.4}$$

Les relations (2.4) assurent le couplage entre l'équation de Vlasov (2.1) et les équations de Maxwell (2.3).
Les densités de charge et de courant vérifient l'équation de conservation de la charge:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div(\mathbf{j}) = 0 \tag{2.5}$$

On résout les équations (2.1)-(2.3) dans un domaine $\Omega \times I\!R^3$ de l'espace des phases où Ω est un ouvert borné de $I\!R^3$ de frontière Γ. On note $\boldsymbol{\nu}$ le vecteur unitaire de la normale à Γ dirigée vers l'extérieur de Ω. On adjoint à ces équations des conditions aux limites appropriées.
Pour l'équation de Vlasov on impose:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = g(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) \, , \ \ \mathbf{x} \in \Gamma \, , \ \ \mathbf{v}.\boldsymbol{\nu} < 0 \tag{2.6}$$

Pour le système de Maxwell, on considère soit une condition de conducteur parfait:

$$\mathbf{E} \times \boldsymbol{\nu} = 0 \text{ sur } \Gamma_c \tag{2.7}$$

soit une condition artificielle de type Silver-Müller:

$$(\mathbf{E} - c\mathbf{B} \times \boldsymbol{\nu}) \times \boldsymbol{\nu} \text{ donné } , \text{ sur } \Gamma_\infty \ , \ \text{ où } \Gamma = \Gamma_c \cup \Gamma_\infty \tag{2.8}$$

Concernant le système de Vlasov-Maxwell, R.J. Diperna et P.L. Lions ont démontré l'existence de solutions faibles globales en temps au problème de Cauchy [12]. Leur démonstration repose sur un résultat de régularité en moyenne des solutions des équations cinétiques. Plus récemment, d'autres travaux [4], [15] ont repris les techniques développées en [12] pour inclure dans leur analyse des conditions aux limites pour les problèmes d'évolution.

2.2 Adimensionnement

D'un point de vue pratique, la résolution d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. Pour adimensionner ces équations, on introduit des grandeurs de référence (indicées par $_*$).

t_*: temps (en seconde: s)
x_*: longueur (en mètre: m)
v_*: vitesse (en mètre par seconde: m/s)
q_*: charge (en coulomb: C)
B_*: induction magnetique (en tesla: T)
E_*: champ électrique (en volt par mètre: V/m)
ρ_*: densité de charge (en coulomb par mètre cube: C/m^3)
j_*: densité de courant (en ampère par mètre carré: A/m^2)
f_*: densité de particules (en s^3/m^6)

Cela revient à poser $\bar{t} = \dfrac{t}{t_*}$,... (les quantités $^-$ étant sans dimension) et à les reporter dans les équations précédentes.

2.2.1 Système de Maxwell

On obtient ainsi:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{\mathbf{B}}}{\partial \bar{t}} + \dfrac{t_* E_*}{x_* B_*} rot(\overline{\mathbf{E}}) = 0 \\ \dfrac{\partial \overline{\mathbf{E}}}{\partial \bar{t}} - \dfrac{c^2 t_* B_*}{x_* E_*} rot(\overline{\mathbf{B}}) = -\dfrac{t_* j_*}{\epsilon_0 E_*} \bar{\mathbf{j}} \end{cases}$$

Si on choisit : $x_* = ct_*$ et $E_* = cB_*$ on obtient:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \overline{\mathbf{B}}}{\partial \bar{t}} + rot(\overline{\mathbf{E}}) = 0 \\ \dfrac{\partial \overline{\mathbf{E}}}{\partial \bar{t}} - rot(\overline{\mathbf{B}}) = -\dfrac{t_* j_*}{\epsilon_0 E_*} \bar{\mathbf{j}} \end{cases}$$

2.2.2 Equation de Vlasov

On obtient:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{t}} + \frac{t_* v_*}{x_*} \bar{\mathbf{v}}.\nabla_{\bar{\mathbf{x}}} \bar{f} + \frac{q_* t_*}{p_*} \bar{q}(E_* \overline{\mathbf{E}} + v_* B_* \bar{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}).\nabla_{\bar{\mathbf{p}}} \bar{f} = 0$$

Or on a choisi x_* et t_* tels que: $x_* = ct_*$ d'où $\dfrac{t_* v_*}{x_*} = \dfrac{v_*}{c} = V$. De plus, $E_* = cB_*$ et on choisit p_* tel que: $p_* = mv_*$. L'équation de Vlasov s'écrit alors:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{t}} + V \bar{\mathbf{v}}.\nabla_{\bar{\mathbf{x}}} \bar{f} + \frac{q_* t_* c B_*}{m v_*} \bar{q}(\overline{\mathbf{E}} + V \bar{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}).\nabla_{\bar{\mathbf{p}}} \bar{f} = 0$$

Les densités de charge et de courant sont déduites de la fonction de distribution f par:

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p}$$

D'où:

$$\bar{\rho} = \frac{q_* f_* (m v_*)^3}{\rho_*} \bar{q} \int_{I\!R^3} \bar{f} \, d\bar{\mathbf{p}} \quad , \quad \bar{\mathbf{j}} = \frac{q_* f_* v_* (m v_*)^3}{j_*} \bar{q} \int_{I\!R^3} \bar{v} \bar{f} \, d\bar{\mathbf{p}}$$

On choisit maintenant: $\rho_* = q_* f_* (mv_*)^3$ et $j_* = q_* f_* v_* (mv_*)^3$, d'où $j_* = v_* \rho_*$.
On détermine maintenant j_* tel que:

$$\frac{j_* t_*}{\epsilon_0 E_*} = 1$$

D'autre part l'équation de Vlasov peut s'écrire sous la forme:

$$\frac{d\overline{f}}{d\overline{t}}(\overline{\mathbf{X}}(\overline{t}),\overline{\mathbf{P}}(\overline{t})) = 0 \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{d\overline{\mathbf{X}}}{d\overline{t}} = V\overline{\mathbf{v}} = V\dfrac{\overline{\mathbf{p}}}{\gamma} \\ \dfrac{d\overline{\mathbf{P}}}{d\overline{t}} = \dfrac{q_* t_* c B_*}{m v_*}\overline{q}(\overline{\mathbf{E}} + V\overline{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}) \end{array} \right.$$

avec: $\gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1-\frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}}} = \sqrt{1+V^2 \mid \overline{\mathbf{p}} \mid^2}$.

En posant: $K = \dfrac{q_* t_* c B_*}{m v_*}$ et $q_* = e = 1.6\,10^{-19}\,C$ (d'où $\bar{q} = -1$ si l'on considère des électrons), les équations de Vlasov-Maxwell sous forme adimensionnée s'écrivent (en supprimant la notation $^-$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - rot(\mathbf{B}) = -\mathbf{j} \end{array} \right. \tag{2.9}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + Kq(\mathbf{E} + V\mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0 \tag{2.10}$$

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f\, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f\, d\mathbf{p} \tag{2.11}$$

où l'on rappelle que $V = \dfrac{v_*}{c}$.

Remarque: Nous avons choisi dans cet adimensionnement la vitesse de la lumière c comme vitesse de référence plutôt qu'une vitesse caractéristique au niveau des particules. Néanmoins dans le cas $v_* = c$, le système adimensionné s'écrit:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - rot(\mathbf{B}) = -\mathbf{j} \end{array} \right.$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + Kq(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0 \qquad \text{où } K = \frac{q_* t_* B_*}{m}$$

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f\, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f\, d\mathbf{p}$$

Chapitre 3

Une nouvelle formulation des équations de Maxwell

3.1 Introduction

Nous allons nous intéresser ici aux relations de divergence incluses dans le système de Maxwell:

$$\begin{cases} div(\mathbf{E}) = \dfrac{\rho}{\epsilon_0} \\ div(\mathbf{B}) = 0 \end{cases} \tag{3.1}$$

Nous commençons par rappeler le résultat suivant. Si à l'instant initial on se donne un champ électromagnétique ($\mathbf{E_0}$,$\mathbf{B_0}$) qui vérifie les contraintes (3.1) alors pour tout temps $t > 0$, le champ électromagnétique ($\mathbf{E}$,$\mathbf{B}$) vérifie (3.1).
En effet, si l'on prend la divergence des deux premières équations du système de Maxwell (2.3) et en utilisant le fait que $div\,(rot\,\mathbf{E}) = 0$, $div\,(rot\,\mathbf{B}) = 0$, on obtient:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(div\mathbf{B})}{\partial t} = 0 \\ \dfrac{\partial(div\mathbf{E})}{\partial t} = -\dfrac{1}{\epsilon_0} div\mathbf{j} \end{cases}$$

Si les densités de charge et de courant ρ et $\mathbf{j}$ vérifient l'équation de conservation de la charge (2.5) on a: $-\dfrac{1}{\epsilon_0}div\mathbf{j} = \dfrac{1}{\epsilon_0}\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$. Par conséquent on obtient le résultat annoncé:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(div\mathbf{B})}{\partial t} = 0 \\ \dfrac{\partial}{\partial t}(div(\mathbf{E}) - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}) = 0 \end{cases}$$

Si l'équation de conservation de la charge (2.5) est vérifiée, les équations (3.1) sont donc redondantes. Au niveau continu, on peut ainsi ne considérer que les deux premières équations du système de Maxwell.
Néanmoins au niveau discret deux problèmes apparaissent:

- La méthode d'approximation numérique de l'équation de Vlasov donne en général

des densités de charge et de courant ρ_h,$\mathbf{j}_h$ qui ne vérifient pas exactement l'équation de conservation de la charge (2.5).
- Les opérateurs divergence et rotationnel discrets, rot_h et div_h, ne vérifient pas toujours la relation: $div_h(rot_h(.)) = 0$.

Nous allons maintenant exposer succintement les solutions utilisées pour remédier à ces problèmes.

3.2 Solutions utilisées

On considère d'abord le cas où l'équation de conservation de la charge (2.5) n'est pas vérifiée au niveau discret. Dans ce cas, la solution classique consiste à introduire des multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes (3.1), on dispose ainsi d'inconnues supplémentaires permettant de satisfaire les contraintes (3.1), voir [2], [16]. Dans [2] plutôt que le système de Maxwell, on résout un problème du second ordre où chaque champ $\mathbf{B}$ et $\mathbf{E}$ est caractérisé en tant que solution d'une équation des ondes.
Considérons maintenant le cas où il n'y a pas de charges ($\rho = 0$,$\mathbf{j} = \mathbf{0}$), les relations de divergence (3.1) s'écrivent alors:

$$div(\mathbf{E}) = 0 \quad , \quad div(\mathbf{B}) = 0 \tag{3.2}$$

Les équations de Maxwell sont résolues numériquement en utilisant des méthodes de différences finies, de volumes finis ou d'éléments finis.
Certaines méthodes de différences finies vérifient les relations (3.2) mais sont traditionnellement limitées au cas de grilles cartésiennes [29], même si ces méthodes ont pu être étendues au cas de grilles non cartésiennes. Mais la plupart des problèmes physiques nécessite la résolution de ces équations pour des géométries complexes ce qui nécessite l'utilisation de maillages non structurés.
Les méthodes de volumes finis permettent de vérifier les relations (3.2) mais elles utilisent des maillages duaux. Hermeline a développé, dans [16], une méthode de volumes finis utilisant des maillages duaux orthogonaux de Delaunay-Voronoï.
Cependant la construction pratique de triangulations de Delaunay-Voronoï dans des géométries complexes est encore mal maîtrisée plus spécialement au voisinage de la frontière du domaine de calcul dans le cas tridimensionnel.
Les méthodes d'éléments finis ne vérifient pas à priori les contraintes (3.2). Néanmoins des algorithmes ont été proposés permettant de vérifier ces contraintes. Dans [21], ceci est réalisé en considérant l'équation des ondes qui satisfait naturellement les lois de divergence. Des méthodes de correction de la divergence ont été développées dans [2], [30]. Une autre solution consiste à utiliser des éléments finis de type $H(rot)$ ou $H(div)$, on pourra se référer à [22, 19].
La méthode que nous allons présenter, qui est une méthode mixte Eléments finis-Volumes finis, consiste à résoudre une nouvelle formulation des équations de Maxwell de façon à vérifier les contraintes (3.2). Nous allons maintenant introduire une nouvelle formulation des équations de Maxwell classiques qui va garder le caractère de type loi de conservation du système.

3.3 Une nouvelle formulation du système de Maxwell

La formulation que nous proposons consiste à introduire un terme de viscosité dans les équations de Maxwell classiques.
Soient α et δ deux constantes positives qui ont pour dimension des s/m^2 c'est à dire l'inverse de la dimension d'un coefficient de viscosité. On considère la nouvelle formulation (MV) des équations de Maxwell classiques:

$$\begin{cases} \text{Pour } (t,\mathbf{x}) \in I\!R^+ \times \Omega : \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) - \dfrac{1}{\delta}\nabla(div\mathbf{B}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 rot(\mathbf{B}) - \dfrac{1}{\alpha}\nabla(div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}) = -\dfrac{1}{\epsilon_0}\mathbf{j} \\ \text{Avec les conditions aux limites pour } t \in I\!R^+ : \\ div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma \\ div\mathbf{B} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma \\ \mathbf{E} \times \boldsymbol{\nu} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_c \\ (\mathbf{E} - c\mathbf{B} \times \boldsymbol{\nu}) \times \boldsymbol{\nu} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_\infty \end{cases} \tag{MV}$$

On se donne également des conditions initiales $\mathbf{E}(0,\mathbf{x}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}(0,\mathbf{x}) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x})$ qui satisfont, comme pour le système de Maxwell classique, aux relations:

$$\begin{cases} div\mathbf{E}_0 = \dfrac{\rho(0,\mathbf{x})}{\epsilon_0} \qquad \mathbf{x} \in \Omega \\ div\mathbf{B}_0 = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Omega \\ \mathbf{E}_0 \times \boldsymbol{\nu} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_c \\ (\mathbf{E}_0 - c\mathbf{B}_0 \times \boldsymbol{\nu}) \times \boldsymbol{\nu} = 0 \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_\infty \end{cases} \tag{3.3}$$

Remarque 3.3.1 *Lorsque α et δ tendent vers l'infini, on retrouve le système de Maxwell classique.*

Concernant cette nouvelle formulation des équations de Maxwell, on a les résultats suivants:

Proposition 3.3.1 *Les formulations classiques (2.3)-(2.7)-(2.8) et (MV) du système de Maxwell sont formellement équivalentes si:*

- *Les données initiales $(\mathbf{B_0},\mathbf{E_0})$ vérifient (3.3).*
- *Les densités de charge et de courant ρ et $\mathbf{j}$ vérifient l'équation de conservation de la charge (2.5).*

Proposition 3.3.2 *La formulation (MV) préserve les estimations d'énergie.*

Preuve de la proposition 3.3.1: De façon évidente une solution des équations de Maxwell classiques est aussi solution de (MV).

Réciproquement en prenant la divergence de chacune des équations de (MV), on obtient:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(div\mathbf{B})}{\partial t} - \dfrac{1}{\delta}\Delta(div\mathbf{B}) = 0 \\ \dfrac{\partial(div\mathbf{E})}{\partial t} - \dfrac{1}{\alpha}\Delta(div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}) = -\dfrac{1}{\epsilon_0}div\mathbf{j} \end{cases}$$

Si l'équation de conservation de la charge (2.5) est vérifiée on a: $-\dfrac{1}{\epsilon_0}div\mathbf{j} = \dfrac{1}{\epsilon_0}\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$.
On obtient ainsi:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial(div\mathbf{B})}{\partial t} - \dfrac{1}{\delta}\Delta(div\mathbf{B}) = 0 & (t,\mathbf{x}) \in I\!R^+ \times \Omega \\ div\mathbf{B} = 0 & (t,\mathbf{x}) \in I\!R^+ \times \Gamma \\ \dfrac{\partial(div\mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0})}{\partial t} - \dfrac{1}{\alpha}\Delta(div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}) = 0 & (t,\mathbf{x}) \in I\!R^+ \times \Omega \\ div\mathbf{E} = \dfrac{\rho}{\epsilon_0} & (t,\mathbf{x}) \in I\!R^+ \times \Gamma \end{cases}$$

Ces deux équations de la chaleur pour $div\mathbf{B}$ et $div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0}$ impliquent (3.1) si les conditions initiales $(\mathbf{B_0},\mathbf{E_0})$ vérifient (3.3). Donc une solution de (MV) est solution des équations de Maxwell classiques. Ce qui conclut la démonstration de la proposition 3.3.1.

Preuve de la proposition 3.3.2: Soit Φ une fonction de $I\!R^3 \longrightarrow I\!R$ telle que: $div(\nabla\Phi) = \rho$. On fait le produit scalaire des deux équations de (MV) par respectivement $\dfrac{1}{\mu_0}\mathbf{B}$ et $(\epsilon_0\mathbf{E} - \nabla\Phi)$. On additionne les deux expressions, on intègre par rapport à la variable d'espace $\mathbf{x}$ pour obtenir:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{I\!R^3}(\frac{|\mathbf{B}|^2}{\mu_0} + \epsilon_0 |\mathbf{E}|^2)d\mathbf{x} - \int_{I\!R^3}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}.\nabla\Phi d\mathbf{x} + \frac{1}{\mu_0}\int_{I\!R^3}(rot\mathbf{E}.\mathbf{B} - rot\mathbf{B}.\mathbf{E})d\mathbf{x} + \\ &c^2\int_{I\!R^3} rot\mathbf{B}.\nabla\Phi d\mathbf{x} - \frac{1}{\delta\mu_0}\int_{I\!R^3}\nabla(div\mathbf{B}).\mathbf{B}d\mathbf{x} - \frac{\epsilon_0}{\alpha}\int_{I\!R^3}\nabla(div\mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0}).(\mathbf{E} - \frac{1}{\epsilon_0}\nabla\Phi)d\mathbf{x} \\ &\qquad = -\frac{1}{\epsilon_0}\int_{I\!R^3}\mathbf{j}.(\epsilon_0\mathbf{E} - \nabla\Phi)d\mathbf{x} \end{aligned}$$

Or: $\displaystyle\int_{I\!R^3} rot\mathbf{B}.\nabla\Phi d\mathbf{x} = 0$, $\displaystyle\int_{I\!R^3}\nabla(div\mathbf{B}).\mathbf{B}d\mathbf{x} = \int_{I\!R^3}(div\mathbf{B})^2 d\mathbf{x}$
et $\displaystyle\int_{I\!R^3} rot\mathbf{E}.\mathbf{B}d\mathbf{x} = \int_{I\!R^3} rot\mathbf{B}.\mathbf{E}d\mathbf{x}$, ce qui donne:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{I\!R^3}(\frac{|\mathbf{B}|^2}{\mu_0} + \epsilon_0 |\mathbf{E}|^2)d\mathbf{x} + \frac{1}{\delta\mu_0}\int_{I\!R^3}(div\mathbf{B})^2 d\mathbf{x} + \frac{\epsilon_0}{\alpha}\int_{I\!R^3}(div\mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0})^2 d\mathbf{x} \\ &\qquad = \int_{I\!R^3}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}.\nabla\Phi d\mathbf{x} - \frac{1}{\epsilon_0}\int_{I\!R^3}\mathbf{j}.(\epsilon_0\mathbf{E} - \nabla\Phi)d\mathbf{x} \end{aligned}$$

De façon analogue, en effectuant le produit scalaire des deux équations de (MV) par respectivement $\dfrac{\partial(rot\mathbf{E})}{\partial t}$ et $\dfrac{\partial(rot\mathbf{B})}{\partial t}$. En soustrayant les deux expressions obtenues puis en intégrant par rapport à **x** on obtient:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{IR^3}(\mid rot\mathbf{E}\mid^2 + c^2 \mid rot\mathbf{B}\mid^2)d\mathbf{x} + \int_{IR^3}(\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}.\frac{\partial rot\mathbf{E}}{\partial t} - \frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}.\frac{\partial rot\mathbf{B}}{\partial t})d\mathbf{x} -$$
$$\frac{1}{\delta}\int_{IR^3}\nabla(div\mathbf{B}).\frac{\partial rot\mathbf{E}}{\partial t}d\mathbf{x} + \frac{1}{\alpha}\int_{IR^3}\nabla(div\mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0}).\frac{\partial rot\mathbf{B}}{\partial t}d\mathbf{x} = -\frac{1}{\epsilon_0}\int_{IR^3}\mathbf{j}.\frac{\partial rot\mathbf{B}}{\partial t}d\mathbf{x}$$

En utilisant les mêmes arguments que précédemment on obtient:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_{IR^3}(\mid rot\mathbf{E}\mid^2 + c^2 \mid rot\mathbf{B}\mid^2)d\mathbf{x} = \frac{1}{\epsilon_0}\frac{d}{dt}\int_{IR^3}\mathbf{j}.rot\mathbf{B}d\mathbf{x} - \frac{1}{\epsilon_0}\int_{IR^3}\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial t}.rot\mathbf{B}d\mathbf{x}$$

Ceci achève la démonstration de la proposition 3.3.2.
On va maintenant écrire sous forme adimensionnée l'équation de Vlasov couplée avec la formulation (MV) des équations de Maxwell.

3.4 Adimensionnement

D'un point de vue pratique, la résolution d'un tel système se fait sur des équations adimensionnées afin de mettre en évidence les différentes échelles de grandeur. Pour adimensionner ces équations, on introduit des grandeurs de référence (indicées par $_*$).

t_*: temps (en seconde: s)
x_*: longueur (en mètre: m)
v_*: vitesse (en mètre par seconde: m/s)
q_*: charge (en coulomb: C)
B_*: induction magnetique (en tesla: T)
E_*: champ électrique (en volt par mètre: V/m)
ρ_*: densité de charge (en coulomb par mètre cube: C/m^3)
j_*: densité de courant (en ampère par mètre carré: A/m^2)
f_*: densité de particules (en s^3/m^6)

Cela revient à poser $\bar{t} = \dfrac{t}{t_*}$,... (les quantités $^-$ étant sans dimension) et à les reporter dans les équations précédentes.

Système de Maxwell modifié

On obtient ainsi:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\overline{\mathbf{B}}}{\partial\bar{t}} + \dfrac{t_*E_*}{x_*B_*}rot(\overline{\mathbf{E}}) - \dfrac{t_*}{\delta x_*^2}\nabla(div\overline{\mathbf{B}}) = 0 \\ \dfrac{\partial\overline{\mathbf{E}}}{\partial\bar{t}} - \dfrac{c^2t_*B_*}{x_*E_*}rot(\overline{\mathbf{B}}) - \dfrac{t_*}{\alpha x_*^2}\nabla(div\overline{\mathbf{E}} - \dfrac{x_*\rho_*}{\epsilon_0E_*}\overline{\rho}) = -\dfrac{t_*j_*}{\epsilon_0E_*}\bar{\mathbf{j}} \end{cases}$$

Si on choisit : $x_* = ct_*$ et $E_* = cB_*$ on obtient:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\overline{\mathbf{B}}}{\partial\bar{t}} + rot(\overline{\mathbf{E}}) - \dfrac{t_*}{\delta x_*^2}\nabla(div\overline{\mathbf{B}}) = 0 \\ \dfrac{\partial\overline{\mathbf{E}}}{\partial\bar{t}} - rot(\overline{\mathbf{B}}) - \dfrac{t_*}{\alpha x_*^2}\nabla(div\overline{\mathbf{E}} - \dfrac{x_*\rho_*}{\epsilon_0E_*}\overline{\rho}) = -\dfrac{t_*j_*}{\epsilon_0E_*}\bar{\mathbf{j}} \end{cases}$$

Equation de Vlasov

On obtient:

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{t}} + \frac{t_* v_*}{x_*} \overline{\mathbf{v}}.\nabla_{\overline{\mathbf{x}}} \overline{f} + \frac{q_* t_*}{p_*} \overline{q}(E_* \overline{\mathbf{E}} + v_* B_* \overline{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}).\nabla_{\overline{\mathbf{p}}} \overline{f} = 0$$

Or on a choisi x_* et t_* tels que: $x_* = ct_*$ d'où $\frac{t_* v_*}{x_*} = \frac{v_*}{c} = V$. De plus, $E_* = cB_*$ et on choisit p_* tel que: $p_* = mv_*$. L'équation de Vlasov s'écrit alors:

$$\frac{\partial \overline{f}}{\partial \overline{t}} + V \overline{\mathbf{v}}.\nabla_{\overline{\mathbf{x}}} \overline{f} + \frac{q_* t_* c B_*}{m v_*} \overline{q}(\overline{\mathbf{E}} + V \overline{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}).\nabla_{\overline{\mathbf{p}}} \overline{f} = 0$$

Les densités de charge et de courant sont déduites de la fonction de distribution f par:

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p}$$

D'où:

$$\overline{\rho} = \frac{q_* f_* (m v_*)^3}{\rho_*} \overline{q} \int_{I\!R^3} \overline{f} \, d\overline{\mathbf{p}} \quad , \quad \overline{\mathbf{j}} = \frac{q_* f_* v_* (m v_*)^3}{j_*} \overline{q} \int_{I\!R^3} \overline{v} \overline{f} \, d\overline{\mathbf{p}}$$

On choisit maintenant: $\rho_* = q_* f_* (mv_*)^3$ et $j_* = q_* f_* v_* (mv_*)^3$, d'où $j_* = v_* \rho_*$.
On détermine maintenant ρ_* et j_* tels que:

$$\frac{\rho_* x_*}{\epsilon_0 E_*} = 1 \quad \text{donc} \quad \frac{j_* t_*}{\epsilon_0 E_*} = \frac{v_*}{c} = V$$

D'autre part l'équation de Vlasov peut s'écrire sous la forme:

$$\frac{d\overline{f}}{d\overline{t}}(\overline{\mathbf{X}}(\overline{t}), \overline{\mathbf{P}}(\overline{t})) = 0 \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{d\overline{\mathbf{X}}}{d\overline{t}} = V \overline{\mathbf{v}} = V \dfrac{\overline{\mathbf{p}}}{\gamma} \\ \dfrac{d\overline{\mathbf{P}}}{d\overline{t}} = \dfrac{q_* t_* c B_*}{m v_*} \overline{q}(\overline{\mathbf{E}} + V \overline{\mathbf{v}} \times \overline{\mathbf{B}}) \end{array} \right.$$

avec: $\gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1 - \frac{|\mathbf{v}|^2}{c^2}}} = \sqrt{1 + V^2 \mid \overline{\mathbf{p}} \mid^2}$. Finalement, en posant $K = \dfrac{q_* t_* c B_*}{m v_*}, \overline{\delta} = \dfrac{\delta x_*^2}{t_*}$ et $\overline{\alpha} = \dfrac{\alpha \mathrm{x}_*^2}{\mathrm{t}_*}$, les équations de Vlasov-Maxwell sous forme adimensionnée s'écrivent (en supprimant la notation $^-$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) - \dfrac{1}{\delta} \nabla(div \mathbf{B}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - rot(\mathbf{B}) - \dfrac{1}{\alpha} \nabla(div \mathbf{E} - \rho) = -V \mathbf{j} \end{array} \right. \tag{3.4}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + Kq(\mathbf{E} + V \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0 \tag{3.5}$$

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \quad , \quad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p} \tag{3.6}$$

Remarque: Nous avons choisi dans cet adimensionnement la vitesse de la lumière c comme vitesse de référence plutôt qu'une vitesse caractéristique au niveau des particules. Néanmoins dans le cas $v_* = c$, le système adimensionné s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + rot(\mathbf{E}) - \dfrac{1}{\delta}\nabla(div\mathbf{B}) = 0 \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - rot(\mathbf{B}) - \dfrac{1}{\alpha}\nabla(div\mathbf{E} - \rho) = -\mathbf{j} \end{array}\right.$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + Kq(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0 \qquad \text{où } K = \frac{q_* t_* B_*}{m}$$

$$\rho = q \int_{I\!R^3} f \, d\mathbf{p} \qquad , \qquad \mathbf{j} = q \int_{I\!R^3} \mathbf{v} f \, d\mathbf{p}$$

Chapitre 4

Approximation numérique

Dans cette partie, nous présentons les schémas numériques utilisés pour résoudre numériquement le système de Maxwell classique puis la nouvelle formulation des équations de Maxwell et enfin l'équation de Vlasov. L'approximation numérique est présentée dans le cas tridimensionnel.

4.1 Equations de Maxwell

Nous allons considérer ici les équations de Maxwell sous forme adimensionnées (2.9). On peut les écrire sous la forme conservative suivante:

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z = \mathbf{J} \tag{4.1}$$

avec:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = {}^t(B_1,B_2,B_3,E_1,E_2,E_3) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,-E_3,E_2,0,B_3,-B_2) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_3,0,-E_1,-B_3,0,B_1) \\ \mathbf{F_3}(\mathbf{Q}) = {}^t(-E_2,E_1,0,B_2,-B_1,0) \\ \mathbf{J} = -{}^t(0,0,0,j_1,j_2,j_3) \end{cases}$$

ou de façon équivalente:

$$\mathbf{Q}_t + \nabla.\mathbb{F}(\mathbf{Q}) = \mathbf{J} \tag{4.2}$$

où $\mathbb{F}(\mathbf{Q}) ={}^t (\mathbf{F_1}(\mathbf{Q})\,;\,\mathbf{F_2}(\mathbf{Q})\,;\,\mathbf{F_3}(\mathbf{Q}))$

Hyperbolicité du système de Maxwell

On montre que le système (4.2) est hyperbolique. En effet considérons une combinaison linéaire de flux :

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}(\mathbf{Q},\boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\eta}.\mathbb{F}(\mathbf{Q})$$

où $\boldsymbol{\eta}=(\eta_1,\eta_2,\eta_3)$ est un vecteur non nul quelconque de $I\!R^3$. La matrice jacobienne $\mathcal{A}$ définie par :

$$\mathcal{A}(\mathbf{Q},\boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\eta}.\mathbb{F}'(\mathbf{Q}) = \eta_1\mathcal{A}_1 + \eta_2\mathcal{A}_2 + \eta_3\mathcal{A}_3 \quad , \quad (\mathcal{A}_i)_{i=1,\ldots,3} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{Q}}\mathbf{F_i}(\mathbf{Q})$$

est diagonalisable pour tout vecteur $\boldsymbol{\eta}$ non nul de $I\!R^3$ et pour tout vecteur $\mathbf{Q}$ de $I\!R^6$. Ses trois valeurs propres réelles de multiplicité double sont données par :

$$\begin{cases} \lambda_1 &= \parallel \boldsymbol{\eta} \parallel \\ \lambda_2 &= - \parallel \boldsymbol{\eta} \parallel \\ \lambda_3 &= 0 \end{cases} \tag{4.3}$$

Deux types de polarisation sont particulièrement intéressantes en électromagnétisme: les polarisations tranverse électrique appelées **TE** ($\mathbf{E}.\mathbf{e_z} = 0$) et transverse magnétique appelées **TM** ($\mathbf{B}.\mathbf{e_z} = 0$).

Cas bidimensionnel

En deux dimensions d'espace, on peut découpler le système de Maxwell, selon ces deux types de polarisations **TE** et **TM**, en deux sous systèmes de dimension trois. En deux dimensions le système de Maxwell peut se réécrire sous la forme:

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y = \mathbf{J}$$

avec dans le cas **TE**:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = {}^t(B_3,E_1,E_2) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_2,0,B_3) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(-E_1,-B_3,0) \\ \mathbf{J} = -{}^t(0,j_1,j_2) \end{cases}$$

et dans le cas **TM**:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = {}^t(B_1,B_2,E_3) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,-E_3,-B_2) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_3,0,B_1) \\ \mathbf{J} = {}^t(0,0,0) \end{cases}$$

Ces deux sous systèmes sont également hyperboliques.

4.1.1 Formulation variationnelle

Le système de Maxwell (2.3) est très similaire à ceux de la mécanique des fluides, tant par sa forme conservative que par son caractère hyperbolique. Ces caractéristiques justifient l'approximation numérique basée sur des schémas décentrés. Pour des applications d'algorithmes utilisés en mécanique des fluides aux équations de Maxwell, on pourra se référer à [25, 20, 23]. Soit $\mathcal{T}_h$ une discrétisation par éléments finis du domaine Ω_h, approximation par des tétraèdres du domaine de calcul Ω. A chaque noeud S_i, est associée une cellule C_i (voir Fig. 4.1). La réunion des cellules forme une nouvelle partition de Ω_h:

$$\Omega_h = \bigcup_{i=1}^{ns} C_i$$

où ns est le nombre de noeuds.
On rappelle que le système de Maxwell peut s'écrire sous la forme:

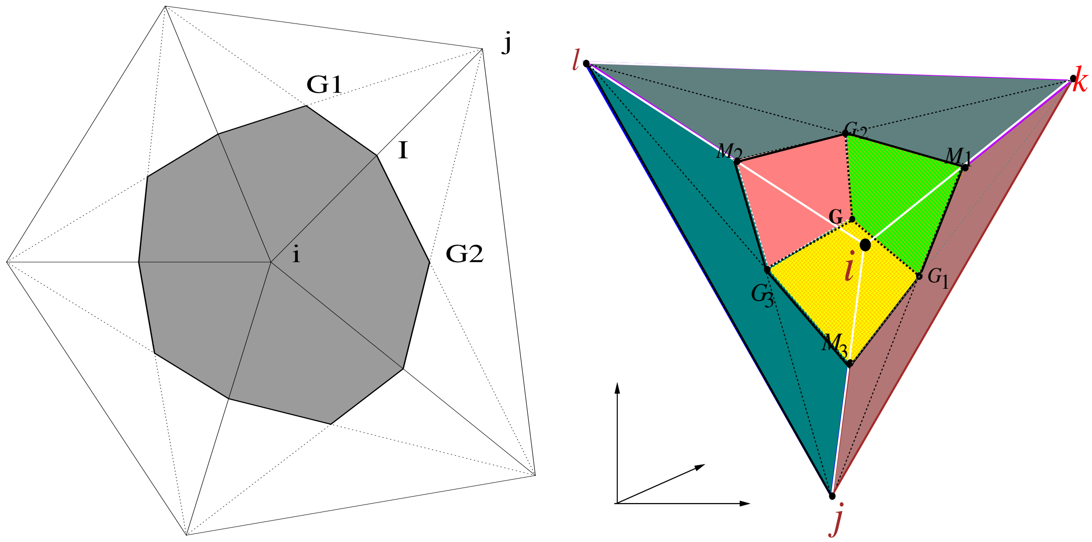


FIG. 4.1 – *Construction d'une cellule en deux et trois dimensions.*

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z = \mathbf{J}$$

où $(\mathbf{F_i}(\mathbf{Q}))_{i=1..3}$,$\mathbf{J}$ ont été définis précédemment.
Nous recherchons les solutions faibles du problème précédent. Nous approchons le problème continu défini sur $\overline{\Omega} \times I\!R^+$ par le problème discret défini sur $\overline{\Omega}_h \times [0,T]$. La formulation variationnelle s'écrit alors:

$$\int_{\Omega_h} (\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z)\Psi_h d\mathbf{x} = \int_{\Omega_h} \mathbf{J}\Psi_h d\mathbf{x} \tag{4.4}$$

Nous allons utiliser une formulation de type volumes finis pour laquelle la fonction test Ψ_h est la fonction caractéristique de la cellule de contrôle C_i associée au noeud S_i. On obtient ainsi:

$$\int_{C_i} (\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z) d\mathbf{x} = \int_{C_i} \mathbf{J} d\mathbf{x}$$

En utilisant la formule de Green, on obtient:

$$\int_{C_i} \mathbf{Q}_t d\mathbf{x} + \int_{\partial C_i} (\mathbf{F_1}\nu_{ix} + \mathbf{F_2}\nu_{iy} + \mathbf{F_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma} = \int_{C_i} \mathbf{J} d\mathbf{x}$$

où $d\boldsymbol{\sigma}$ représente l'élément de longueur sur ∂C_i et $\boldsymbol{\nu}_i = (\nu_{ix},\nu_{iy},\nu_{iz})$ la normale extérieure sur ∂C_i.
Il ne reste plus qu'à évaluer chaque terme de cette équation. On note $\mathbf{Q}^n = \mathbf{Q}(t^n,\mathbf{x})$ et $\mathbf{Q}_i$ la valeur au noeud S_i de $\mathbf{Q}^n$, t^n représente le temps à la n^{ieme} itération.
Le terme de dérivée temporelle et la densité de courant $\mathbf{J}$ sont supposés comstants sur la cellule de contrôle C_i, l'intégration est alors immédiate:

$$\int_{C_i} \mathbf{Q}_t d\mathbf{x} = (\mathbf{Q}_i)_t Vol(C_i)$$
$$\int_{C_i} \mathbf{J} d\mathbf{x} = \mathbf{J}_i Vol(C_i)$$

On s'intéresse maintenant à l'approximation des termes convectifs du système, soit:

$$\int_{\partial C_i} (\mathbf{F_1}\nu_{ix} + \mathbf{F_2}\nu_{iy} + \mathbf{F_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma}$$

que l'on approche de la façon suivante:

$$\sum_{j=1}^{N_i} \Phi_{ij} \ + \ \text{termes de bord} \tag{4.5}$$

où N_i est le nombre de voisins du noeud S_i, et Φ_{ij} une approximation que nous allons définir des termes convectifs. Les termes de bord seront pour leur part explicités ultérieurement.

Flux décentré d'ordre un

Nous choisissons une approximation décentrée pour les flux numériques Φ_{ij}. Pour le calcul de ces flux internes, on introduit la notation:

$$\boldsymbol{\eta}_i = \int_{\partial C_i \cap \partial C_j} \boldsymbol{\nu}_i d\boldsymbol{\sigma}$$

Le système de Maxwell dans le vide étant linéaire à coefficients constants, tous les schémas décentrés du premier ordre sont identiques et se réduisent au schéma **I.C.R.** (Isaac-Courant-Reeves) [18]. La fonction flux numérique Φ_{ij} s'écrit alors, en utilisant la décomposition de flux de Steger-Warming [26]:

$$\Phi_{ij} = \Phi(\mathbf{Q}_i,\mathbf{Q}_j,\boldsymbol{\eta}_i) = \mathcal{A}^+\mathbf{Q}_i + \mathcal{A}^-\mathbf{Q}_j \tag{4.6}$$

où $\mathcal{A} = \mathcal{A}(\mathbf{Q},\boldsymbol{\eta})$ a été défini précédemment et $\mathcal{A}^+$ et $\mathcal{A}^-$ sont respectivement les parties positive et négative de $\mathcal{A}$. Plus précisément: $\mathcal{A}^\pm = T\Lambda^\pm T^{-1}$ avec $\Lambda^+ = diag(max(\lambda_k,0))$ et $\Lambda^- = \Lambda - \Lambda^+$.

Approximation d'ordre supérieur

Nous construisons maintenant un schéma d'ordre trois en espace en utilisant l'extension de la méthode MUSCL (Monotonic Upwind Schemes for Conservation Laws) de Van Leer aux éléments finis [13]. Une manière d'obtenir un schéma d'ordre supérieur est d'augmenter le degré de l'interpolation dans une cellule et d'évaluer les flux à l'aide de valeurs extrapolées $\mathbf{Q}_{ij}$ et $\mathbf{Q}_{ji}$ à l'interface ∂C_{ij}. Cette extension nécessite l'évaluation du gradient de la solution à chaque noeud. On notera que l'obtention de schémas d'ordre supérieur est assez directe par cette méthode puisque seule une modification des arguments de la fonction Φ est à réaliser par rapport au flux d'ordre un. La fonction de flux d'ordre supérieur s'écrit :

$$\left\{\begin{aligned} \Phi_{ij} &= \Phi(\mathbf{Q}_{ij},\mathbf{Q}_{ji},\boldsymbol{\eta}_i) \\ \mathbf{Q}_{ij} &= \mathbf{Q}_i + \frac{1}{2}\,(\nabla\mathbf{Q})_i.\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j \\ \mathbf{Q}_{ji} &= \mathbf{Q}_j - \frac{1}{2}\,(\nabla\mathbf{Q})_j.\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j \end{aligned}\right. \tag{4.7}$$

Les gradients nodaux $(\nabla\mathbf{Q})_{i,j}$ peuvent être définis de plusieurs manières. Un choix possible comme définition est par exemple celle des gradients dits hermitiens qui sont une moyenne des gradients de Galerkin autour d'un noeud S_i:

$$\nabla\mathbf{Q}_i^H \;=\; \frac{1}{Vol(C_i)}\int_{C_i}\nabla\mathbf{Q}\,d\mathbf{x}$$

$\nabla\mathbf{Q}$ est le gradient de l'interpolée classique P-1 Lagrange de la variable $\mathbf{Q}$, d'où:

$$\nabla\mathbf{Q}_i^H \;=\; \frac{1}{Vol(C_i)}\sum_{T,S_i\in T}\frac{Vol(T)}{3}\sum_{k=1}^{4}\mathbf{Q}\mid_{S_{i_k}}\nabla\varphi\mid_{S_{i_k}}(T) \tag{4.8}$$

où $\varphi\mid_{S_j}$ est la fonction P-1 associée au noeud S_j.
Pour des raisons de précision et de stabilité [11], nous calculons en fait les nouvelles valeurs aux interfaces des cellules à l'aide d'une combinaison convexe des gradients hermitiens et centrés. Ce calcul est réalisé en introduisant un paramètre de décentrage et les schémas résultants sont connus sous le nom de β-schémas. Les valeurs interpolées sont calculées de la manière suivante :

$$\left\{\begin{aligned} \Phi_{ij} &= \Phi(\mathbf{Q}_{ij},\mathbf{Q}_{ji},\boldsymbol{\eta}_i) \\ \mathbf{Q}_{ij} &= \mathbf{Q}_i + \frac{1}{2}\{\,(1-2\,\beta)(\mathbf{Q}_j-\mathbf{Q}_i) + 2\,\beta\nabla\mathbf{Q}_i^H.\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\,\} \\ \mathbf{Q}_{ji} &= \mathbf{Q}_j - \frac{1}{2}\{\,(1-2\,\beta)(\mathbf{Q}_j-\mathbf{Q}_i) + 2\,\beta\nabla\mathbf{Q}_j^H.\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j\,\} \end{aligned}\right. \quad ,\beta\in(0,1)\,. \tag{4.9}$$

Cette formule a été écrite par analogie au cas monodimensionnel. Finalement, nous prenons $\beta = \frac{1}{3}$ comme paramètre de décentrage afin d'obtenir un schéma d'ordre trois en espace dans le cas de maillages structurés, i.e. un schéma à dispersion nulle. L'ordre trois de ce schéma a été montré pour l'équation d'advection bidimensionnelle [11]. La diffusion numérique, qui doit rester minimale également, peut être contrôlée à l'aide de ce paramètre de décentrage. En effet, on retrouve pour $\beta = 0$ un schéma centré qui minimise la diffusion numérique mais la dispersion numérique n'est plus nulle. Ce schéma centré étant instable (pour une intégration en temps de Runge-Kutta à deux ou trois pas par exemple), des valeurs de β entre 0 et $\frac{1}{3}$ peuvent être choisies suivant que l'on veuille minimiser la dispersion ou la diffusion numérique. Il est donc possible de contrôler dans une certaine mesure la diffusion numérique des schémas décentrés et cette technique s'adapte parfaitement aux maillages non structurés; les techniques consistant à rajouter de la viscosité artificielle à des schémas centrés l'est beaucoup moins. Cependant, les β-schémas ne sont plus TVD pour toute valeur de β.

4.1.2 Traitement des conditions aux limites

Pour imposer les conditions aux limites pour un problème de diffraction, par exemple, on distingue la frontière de l'obstacle Γ_c et la frontière artificielle Γ_∞ délimitant le domaine de calcul.
Pour un objet métallique parfaitement conducteur, on impose sur Γ_c la condition (en termes de champ électrique) : $\mathbf{E} \times \boldsymbol{\nu} = 0$. Il nous faut donc préciser l'approximation des termes: $\displaystyle\int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \mathbb{F}(\mathbf{Q}).\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma} = \int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} (\mathbf{F_1}\nu_{ix} + \mathbf{F_2}\nu_{iy} + \mathbf{F_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma}$
Ce dernier terme s'écrit, en utilisant la définition des $\mathbf{F}_i$ donnée précédemment :

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} \nu_{iy}E_3 - \nu_{iz}E_2 \\ -\nu_{ix}E_3 + \nu_{iz}E_1 \\ \nu_{ix}E_2 - \nu_{iy}E_1 \\ -\nu_{iy}B_3 + \nu_{iz}B_2 \\ \nu_{ix}B_3 - \nu_{iz}B_1 \\ -\nu_{ix}B_2 + \nu_{iz}B_1 \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma} = \int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\nu_{iy}B_3 + \nu_{iz}B_2 \\ \nu_{ix}B_3 - \nu_{iz}B_1 \\ -\nu_{ix}B_2 + \nu_{iz}B_1 \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma}$$

où l'on a utilisé la relation: $\mathbf{E} \times \boldsymbol{\nu} = 0$. Finalement ce dernier terme est évalué de la façon suivante:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\nu_{iy}B_3 + \nu_{iz}B_2 \\ \nu_{ix}B_3 - \nu_{iz}B_1 \\ -\nu_{ix}B_2 + \nu_{iz}B_1 \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma} \simeq B_{i1} \int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\nu_{iz} \\ \nu_{iy} \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma} + B_{i2} \int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \nu_{iz} \\ 0 \\ -\nu_{ix} \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma}$$

$$+ B_{i3} \int_{\partial C_i \cap \Gamma_c} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\nu_{iy} \\ \nu_{ix} \\ 0 \end{pmatrix} d\boldsymbol{\sigma}$$

où B_{i3} représente la valeur de la troisième composante du champ $\mathbf{B}$ au sommet S_i.
Notons que la condition $\mathbf{E} \times \boldsymbol{\nu} = 0$ est prise en compte faiblement.
Sur la frontière artificielle Γ_∞, on utilise un décentrage d'ordre un, ce qui permet de

garder le même type d'approximation que pour les points internes. On utilise également une décomposition des flux de Steger-Warming :

$$\Phi_{i\infty} = \mathcal{A}^{+}\mathbf{Q}_i + \mathcal{A}^{-}\mathbf{Q}_\infty \ ,$$

où $\mathbf{Q}_i$ est la valeur du champ calculée sur Γ_∞ et $\mathbf{Q}_\infty$ la solution à l'infini (à l'extérieur du domaine de calcul plus précisément) qui est connue. Pour plus de précisions sur la prise en compte des conditions aux limites on pourra se référer à [8].

4.1.3 Intégration en temps

La précision en temps pour les problèmes instationnaires est importante ce qui nous conduit à choisir des intégrateurs temporels hautement précis. Pour cela, nous utilisons des schémas de Runge-Kutta explicites.
L'algorithme $RK\,r$ associé à notre méthode de volumes finis s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{l} \mathbf{Q}^0 = \mathbf{Q}^n \\ \mathbf{Q}^l = \mathbf{Q}^0 - \dfrac{\Delta t}{(r+1-l)}\Phi(\mathbf{Q}^{l-1}) \quad l = 1,2,\ldots,r \\ \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^r \end{array}\right.$$

où Φ représente la somme des flux sur la cellule C_i, et Δt vérifie : $t^n = n\Delta t$. Pour $r = 3$, on obtient un schéma d'ordre trois en temps, du fait de la linéarité du système de Maxwell.

4.2 Nouvelle formulation du système de Maxwell

On considère la formulation (MV) du système de Maxwell en variables adimensionnées (3.4), qui peut s'écrire sous la forme conservative suivante:

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z = \mathbf{J} + \mathbf{G_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{G_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{G_3}(\mathbf{Q})_z \quad (4.10)$$

avec:

$$\left\{\begin{array}{l} \mathbf{Q} = {}^t(B_1,B_2,B_3,E_1,E_2,E_3) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,-E_3,E_2,0,B_3,-B_2) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_3,0,-E_1,-B_3,0,B_1) \\ \mathbf{F_3}(\mathbf{Q}) = {}^t(-E_2,E_1,0,B_2,-B_1,0) \\ \mathbf{J} = -V\,{}^t(0,0,0,j_1,j_2,j_3) \\ \mathbf{G_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(\dfrac{1}{\delta}(div\mathbf{B}),0,0,\dfrac{1}{\alpha}(div\mathbf{E}-\rho),0,0) \\ \mathbf{G_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,\dfrac{1}{\delta}(div\mathbf{B}),0,0,\dfrac{1}{\alpha}(div\mathbf{E}-\rho),0) \\ \mathbf{G_3}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,0,\dfrac{1}{\delta}(div\mathbf{B}),0,0,\dfrac{1}{\alpha}(div\mathbf{E}-\rho)) \end{array}\right.$$

Cas bidimensionnel

En deux dimensions d'espace, on peut également découpler le système (MV), selon les polarisations **TE** et **TM**, en deux sous systèmes de dimension trois. On obtient ainsi:

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y = \mathbf{J} + \mathbf{G_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{G_2}(\mathbf{Q})_y$$

avec dans le cas **TE**:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = {}^t(B_3,E_1,E_2) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_2,0,B_3) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(-E_1,-B_3,0) \\ \mathbf{J} = -V\,{}^t(0,j_1,j_2) \\ \mathbf{G_1}(\mathbf{Q} = {}^t(0,\dfrac{1}{\alpha}(div\mathbf{E}-\rho),0) \\ \mathbf{G_2}(\mathbf{Q} = {}^t(0,0,\dfrac{1}{\alpha}(div\mathbf{E}-\rho)) \end{cases}$$

et dans le cas **TM**:

$$\begin{cases} \mathbf{Q} = {}^t(B_1,B_2,E_3) \\ \mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) = {}^t(0,-E_3,-B_2) \\ \mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) = {}^t(E_3,0,B_1) \\ \mathbf{J} = {}^t(0,0,0) \\ \mathbf{G_1}(\mathbf{Q} = {}^t(\dfrac{1}{\delta}(div\mathbf{B}),0,0) \\ \mathbf{G_2}(\mathbf{Q} = {}^t(0,\dfrac{1}{\delta}(div\mathbf{B}),0) \end{cases}$$

4.2.1 Formulation variationnelle

Soit $\mathcal{T}_h$ une discrétisation par éléments finis du domaine Ω_h, approximation par des tétraèdres du domaine de calcul Ω. A partir de cette discrétisation, on définit, comme précédemment, une nouvelle partition de Ω_h.
Nous recherchons les solutions faibles du problème (4.10). Nous approchons le problème continu défini sur $\overline{\Omega} \times \mathbb{R}^+$ par le problème discret défini sur $\overline{\Omega}_h \times [0,T]$. La formulation variationnelle de type volumes finis s'écrit alors:

$$\int_{C_i} (\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{F_3}(\mathbf{Q})_z)d\mathbf{x} = \int_{C_i} \mathbf{J}d\mathbf{x} + \int_{C_i} (\mathbf{G_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{G_2}(\mathbf{Q})_y + \mathbf{G_3}(\mathbf{Q})_z)d\mathbf{x}$$

En utilisant la formule de Green, on obtient:

$$\int_{C_i} \mathbf{Q}_t d\mathbf{x} + \int_{\partial C_i} (\mathbf{F_1}\nu_{ix} + \mathbf{F_2}\nu_{iy} + \mathbf{F_3}\nu_{iz})d\boldsymbol{\sigma} = \int_{C_i} \mathbf{J}d\mathbf{x} + \int_{\partial C_i} (\mathbf{G_1}\nu_{ix} + \mathbf{G_2}\nu_{iy} + \mathbf{G_3}\nu_{iz})d\boldsymbol{\sigma}$$

où $d\boldsymbol{\sigma}$ représente l'élément de longueur sur ∂C_i et $\boldsymbol{\nu}_i = (\nu_{ix},\nu_{iy},\nu_{iz})$ la normale extérieure sur ∂C_i.

Il ne reste plus qu'à évaluer chaque terme de cette équation. On note $\mathbf{Q}^n = \mathbf{Q}(t^n,\mathbf{x})$ et $\mathbf{Q}^i$ la valeur au noeud S_i de $\mathbf{Q}^n$, t^n représente le temps à la n^{ieme} itération.
L'approximation des termes de dérivée temporelle et de densité de courant ainsi que des termes convectifs est identique à celle du système de Maxwell classique.

Termes diffusifs

Nous allons préciser maintenant l'approximation des termes diffusifs, soit:

$$\int_{\partial C_i} (\mathbf{G_1}\nu_{ix} + \mathbf{G_2}\nu_{iy} + \mathbf{G_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma}$$

De par la définition de $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2$ et $\mathbf{G}_3$, l'intégrale précédente se ramène au calcul des quantités suivantes:

$$\int_{\partial C_i} div\mathbf{B}\,\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma} \qquad , \qquad \int_{\partial C_i} (div\mathbf{E} - \rho)\,\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma}$$

Pour évaluer ces termes, on suppose que $div\mathbf{B}$ et $div\mathbf{E} - \rho$ sont constants par tétraèdre. Plus précisément, on considère que sur chaque tétraèdre T de sommets $(S_j)_{j=1,..,4}$, on a:

$$div\mathbf{B}\mid_T = \sum_{j=1}^{4} (B_1^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial x} + B_2^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial y} + B_3^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial z})$$

où B_i^j représente la valeur de la i^{eme} composante de $\mathbf{B}$ au sommet S_j, $\dfrac{\partial \varphi_j^T}{\partial x} = (\dfrac{\partial \varphi_j}{\partial x}) \mid_T$ et φ_j est la fonction P-1 associée au noeud S_j. De même:

$$(div\mathbf{E} - \rho)\mid_T = div\mathbf{E}\mid_T - \rho\mid_T = \sum_{j=1}^{4} (E_1^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial x} + E_2^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial y} + E_3^j \frac{\partial \varphi_j^T}{\partial z}) - \rho_T$$

avec $\rho\mid_T = \dfrac{1}{4}\displaystyle\sum_{j=1}^{4} \rho_j$, où ρ_j représente la valeur de la densité de charge ρ au sommet S_j. On obtient alors pour la discrétisation des termes diffusifs:

$$\left\{ \begin{array}{l} \displaystyle\int_{\partial C_i} div\mathbf{B}\,\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma} = \sum_{T,\,S_i \in T} (div\mathbf{B})\mid_T \int_{\partial C_i \cap T} \boldsymbol{\nu}\, d\boldsymbol{\sigma} \\ \displaystyle\int_{\partial C_i} (div\mathbf{E} - \rho)\,\boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma} = \sum_{T,\,S_i \in T} (div\mathbf{E} - \rho)\mid_T \int_{\partial C_i \cap T} \boldsymbol{\nu}\, d\boldsymbol{\sigma} \end{array} \right.$$

On peut montrer facilement qu'une discrétisation par éléments finis classiques des termes diffusifs donne un résultat identique.
Pour la prise en compte des conditions aux limites, on se reportera au paragraphe précédent.

4.2.2 Traitement des conditions aux limites

Par rapport au système de Maxwell classique, il faut tenir compte des conditions aux limites supplémentaires:

$$div\mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0} = 0 \quad \text{et} \quad div\mathbf{B} = 0 \qquad \text{sur } \Gamma$$

Ces conditions sont prises en compte au niveau des termes diffusifs:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma} (\mathbf{G_1}\nu_{ix} + \mathbf{G_2}\nu_{iy} + \mathbf{G_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma}$$

De par la définition de $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2$ et $\mathbf{G}_3$, l'intégrale précédente se ramène au calcul des quantités suivantes:

$$\int_{\partial C_i \cap \Gamma} div\mathbf{B}\, \boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma} \qquad , \qquad \int_{\partial C_i \cap \Gamma} (div\mathbf{E} - \rho)\, \boldsymbol{\nu} d\boldsymbol{\sigma}$$

Or sur la frontière Γ on a: $div\mathbf{E} - \dfrac{\rho}{\epsilon_0} = 0$ et $div\mathbf{B} = 0$.

D'où finalement: $\displaystyle\int_{\partial C_i \cap \Gamma} (\mathbf{G_1}\nu_{ix} + \mathbf{G_2}\nu_{iy} + \mathbf{G_3}\nu_{iz}) d\boldsymbol{\sigma} = 0$.

Les conditions aux limites de type conducteur parfait ou de Silver-Müller sont prises en compte comme pour le système de Maxwell classique.

4.2.3 Intégration en temps

Comme pour le système de Maxwell classique, nous utilisons un schéma de Runge-Kutta explicite pour l'avancement en temps de la solution numérique.

4.3 Equation de Vlasov

4.3.1 Méthode particulaire

On s'intéresse ici à l'approximation de l'équation de Vlasov adimensionnée:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + Kq(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0$$

Nous allons utiliser une méthode particulaire déterministe afin de résoudre l'équation de Vlasov. Elle consiste à approcher la fonction de distribution $f(t,.,.)$ au temps t par une combinaison linéaire de masses de Dirac dans l'espace des phases $(\mathbf{x},\mathbf{p})$:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = \sum_{k=1}^{N} w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k(t)) \otimes \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_k(t)) \tag{4.11}$$

où N est le nombre de particules, w_k le poids associé à la particule k et $(\mathbf{x}_k(t),\mathbf{p}_k(t))$ représentent respectivement la position et l'impulsion de la particule k au temps t.

La distribution (4.11) est solution de l'équation de Vlasov si $(\mathbf{x}_k(t),\mathbf{p}_k(t))$ sont solutions du système différentiel:

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{d\mathbf{x}_k}{dt} = V\mathbf{v}_k = V\dfrac{1}{\gamma_k}\mathbf{p}_k \quad , \quad \gamma_k = (1+V \mid \mathbf{p}_k \mid^2)^{\frac{1}{2}} \\ \dfrac{d\mathbf{p}_k}{dt} = Kq(\mathbf{E}(t,\mathbf{x}_k(t)) + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}(t,\mathbf{x}_k(t))) \end{array}\right. \tag{4.12}$$

Les équations de Vlasov et de Maxwell sont couplées par l'intermédiaire des densités de charge et de courant ρ et $\mathbf{j}$. En utilisant (4.11), on obtient les expressions suivantes pour ρ et $\mathbf{j}$:

$$\left\{\begin{array}{l} \rho(t,\mathbf{x}) = \displaystyle\sum_{k=1}^{N} w_k \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k(t)) \\ \mathbf{j}(t,\mathbf{x}) = \displaystyle\sum_{k=1}^{N} w_k \mathbf{v}_k \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_k(t)) \end{array}\right.$$

On a ainsi obtenu des expressions pour les densités de charge et de courant ρ et $\mathbf{j}$ en fonction de masses de Dirac.
Cependant la résolution des équations de Maxwell (ou de la formulation (MV)) nécessite la connaissance des valeurs de ρ et $\mathbf{j}$ aux noeuds du maillage, on ne peut donc utiliser les expressions précédentes. Il convient donc de déduire des représentations continues de ρ et $\mathbf{j}$.
Pour ce faire, on généralise aux maillages non structurés le procédé d'assignement utilisé pour coupler des méthodes particulaires avec des méthodes de différences finies pour résoudre les équations de Maxwell [5]. On définit les valeurs des densités de charge et de courant aux sommets S_i du maillage par les formules suivantes:

$$\left\{\begin{array}{l} \rho(t,S_i) = \dfrac{1}{V_i}\displaystyle\int \rho(t,.)\varphi_i \, d\mathbf{x} = \dfrac{q}{V_i}\sum_{k=1}^{N} w_k \varphi_i(\mathbf{x}_k(t)) \\ \mathbf{j}(t,S_i) = \dfrac{1}{V_i}\displaystyle\int \mathbf{j}(t,.)\varphi_i \, d\mathbf{x} = \dfrac{q}{V_i}\sum_{k=1}^{N} w_k \mathbf{v}_k(t) \varphi_i(\mathbf{x}_k(t)) \end{array}\right. \tag{4.13}$$

où $V_i = \displaystyle\int \varphi_i \, d\mathbf{x}$ et φ_i est la fonction P-1 associée au noeud S_i. On obtient ainsi les représentations continues pour ρ et $\mathbf{j}$:

$$\left\{\begin{array}{l} \rho(t,\mathbf{x}) = \displaystyle\sum_{i=1}^{ns} \rho(t,S_i)\varphi_i(\mathbf{x}) \\ \mathbf{j}(t,\mathbf{x}) = \displaystyle\sum_{i=1}^{ns} \mathbf{j}(t,S_i)\varphi_i(\mathbf{x}) \end{array}\right. \tag{4.14}$$

Un calcul simple montre que ρ et $\mathbf{j}$ définis par (4.14) ne vérifient pas l'équation de conservation de la charge (2.5). D'où l'intérêt de considérer la nouvelle formulation (MV) des équations de Maxwell.

Avant de présenter le schéma d'intégration temporelle du système couplé, il nous reste deux choses à préciser concernant le couplage:

- Pour résoudre le système différentiel (4.12), il faut calculer le champ électromagnétique ($\mathbf{B}$,$\mathbf{E}$) aux points de localisation des particules. On utilise, pour ce faire, l'interpolée P-1 Lagrange des variables ($\mathbf{B}$,$\mathbf{E}$):

$$\mathbf{B}(t,\mathbf{x}_k(t)) = \sum_{i=1}^{ns} \mathbf{B}(t,S_i)\varphi_i(\mathbf{x}_k(t)) \quad , \quad \mathbf{E}(t,\mathbf{x}_k(t)) = \sum_{i=1}^{ns} \mathbf{E}(t,S_i)\varphi_i(\mathbf{x}_k(t))$$

  où φ_i est la fonction P-1 Lagrange associée au sommet S_i.
- Le repérage des particules dans un maillage non structuré. Plus précisément, pour chaque particule k il faut déterminer le tétraèdre T_k où elle se situe. Pour repérer les particules dans un mailage non structuré on pourra se référer à [3].

Conditions aux limites

La frontière du domaine de calcul Ω est toujours notée Γ. On note $\boldsymbol{\nu}$ le vecteur unitaire de la normale à Γ dirigée vers l'extérieur de Ω. On considère habituellement des conditions aux limites de l'une des trois formes suivantes:

- Une frontière émettrice Γ_e correspondant à l'émission de particules:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = g(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) \qquad \mathbf{p}.\boldsymbol{\nu} < 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_e$$

  Dans les expériences physiques, Γ_e correspond à la cathode et la fonction g décrit le mode d'émission des particules. Numériquement des particules k sont émises, au cours du temps, à la position $\mathbf{x}_k \in \Gamma_e$ avec l'impulsion $\mathbf{p}_k$ et un poids w_k dépendant de la fonction g.
- Une frontière Γ_a correspondant à l'absorption de particules:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = 0 \qquad \mathbf{p}.\boldsymbol{\nu} < 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_e$$

  Numeriquement, lorsqu'une particule atteint la frontière Γ_a elle est absorbée et n'intervient plus dans les calculs.
- Une frontière Γ_r où les particules sont réflechies. On considère généralement au niveau de Γ_r des réflexions spéculaires, soit:

$$f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = f(t,\mathbf{x},\mathbf{p} - 2(\mathbf{p}.\boldsymbol{\nu})\boldsymbol{\nu})$$

  Numériquement lorsqu'une particule atteint Γ_r, elle est réémise au même point avec une impulsion $\mathbf{p}' = \mathbf{p} - 2(\mathbf{p}.\boldsymbol{\nu})\boldsymbol{\nu}$ où $\mathbf{p}$ représente l'impulsion de la particule atteignant Γ_r.

4.3.2 Intégration en temps

Il nous reste à préciser le schéma d'intégration temporelle utilisé pour résoudre le système différentiel (4.12).

Pour résoudre une équation différentielle il existe une grande variété de schémas, voir

[5, 17], nous allons en considérer plusieurs que nous comparerons afin de déterminer celui que nous allons choisir. On se restreindra à des schémas explicites.
Nous allons considérer le système (4.12) dans le cas où le champ électromagnétique ($\mathbf{B}$,$\mathbf{E}$) est donné. Dans un premier temps, supposons que le champ électrique $\mathbf{E}$ est nul et le champ magnétique $\mathbf{B}$ est constant ($\mathbf{B} = (0{,}0{,}B_z)$). On s'intéresse donc au système simplifié:

$$\left\{\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \mathbf{v} \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= \mathbf{v} \times \mathbf{B} \end{aligned}\right. \tag{4.15}$$

Dans ce cas les particules décrivent un cercle dont le rayon est proportionnel à $\dfrac{\mid \mathbf{v} \mid}{B_z}$ et l'énergie cinétique des particules $\mid \mathbf{v} \mid^2$ est constante. Le système (4.15) peut être résolu à l'aide d'un schéma de Runge-Kutta explicite qui s'écrit ici:

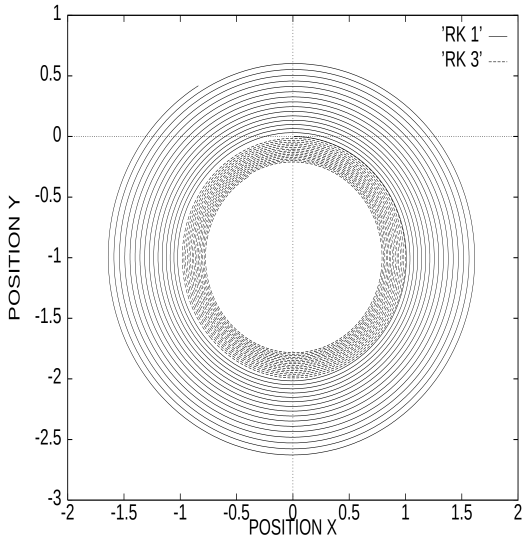
$$\left\{\begin{aligned} (\mathbf{x}^0,\mathbf{v}^0) &= (\mathbf{x}^n,\mathbf{v}^n) \\ \mathbf{x}^l &= \mathbf{x}^n + \frac{\Delta t}{k+1-l}\mathbf{v}^{l-1} \qquad\qquad l = 1,\ldots,k \\ \mathbf{v}^l &= \mathbf{v}^0 + \frac{\Delta t}{k+1-l}\mathbf{v}^{l-1} \times \mathbf{B} \\ (\mathbf{x}^{n+1},\mathbf{v}^{n+1}) &= (\mathbf{x}^k,\mathbf{v}^k) \end{aligned}\right. \tag{4.16}$$

où $\mathbf{x}^n$ représente la valeur de $\mathbf{v}$ au temps $t^n = n\Delta t$, où Δt est le pas de temps que nous supposerons constants. Nous avons utilisé les schémas de Runge-Kutta d'ordre 1 et 3 (k=1,3). Nous représentons respectivement sur les figures ci-dessous la trajectoire d'une particule et son énergie cinétique en fonction du temps, pour chacun des deux schémas.
On remarque que la trajectoire n'est pas un cercle ceci est du au fait que l'énergie cinétique n'est conservée par aucun des deux schémas. Les schémas de Runge-Kutta, quelque soit l'ordre de précision, ne permettent pas de conserver l'énergie cinétique.
On considère maintenant le schéma "saute-mouton" (leap frog) d'ordre 2 qui s'écrit ici:

$$\left\{\begin{aligned} \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} &= \mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}}}{2} \times \mathbf{B} \end{aligned}\right.$$

On remarque qu'en prenant le produit scalaire de l'équation en vitesse par $\dfrac{\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}}}{2}$ on obtient $\mid \mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} \mid = \mid \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}} \mid$. L'énergie cinétique est ainsi conservée.
On considère maintenant le cas où le champ électrique $\mathbf{E}$ est non nul, mais constant. Le schéma "saute-mouton" s'écrit:

$$\left\{\begin{aligned} \frac{\mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n}{\Delta t} &= \mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} \\ \frac{\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{v}^{n-\frac{1}{2}}}{2} \times \mathbf{B} \end{aligned}\right. \tag{4.17}$$



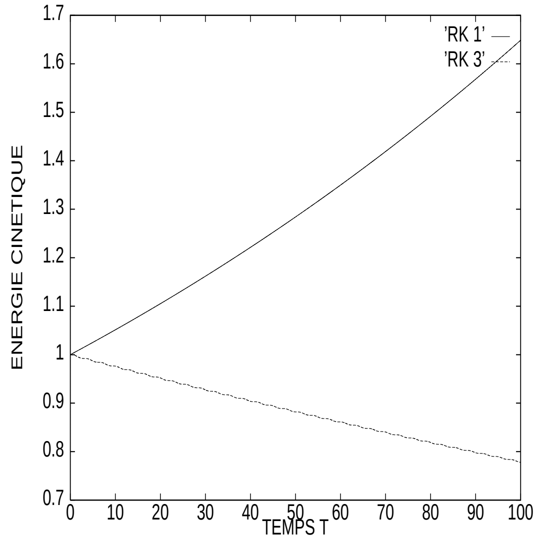


FIG. 4.2 – *Trajectoire et Energie cinétique*

On va pouvoir comparer les schémas de Runge-Kutta (RK1 et RK 3) au schéma "saute-mouton". On représente sur la figure 4.3 le logarithme de l'erreur en position en fonction du temps pour les schémas RK1, RK3 et "saute-mouton".

Au vu de ces résultats, le schéma "saute-mouton" est plus précis que les schémas RK1 et RK3. Nous allons donc utiliser ce schéma pour résoudre le système différentiel (4.12).

4.4 Discrétisation temporelle

Dans cette partie nous allons présenter le schéma d'intégration temporelle pour le système de Vlasov-Maxwell. On se donne un pas de temps constant Δt, on pose $t^n = n\Delta t$ et $t^{n+\frac{1}{2}} = (n+\frac{1}{2})\Delta t$.
Les schémas d'intégration en temps que nous avons choisis pour résoudre les équations de Maxwell (ou la formulation (MV) de ces mêmes équations) étaient de type Runge-Kutta explicites. Le système différentiel (4.12) est résolu par un schéma "saute-mouton". Supposons que soient connues les quantités $\mathbf{B}^n$,$\mathbf{E}^n$,ρ^n,$\mathbf{x}^n$ et $\mathbf{p}^{n-\frac{1}{2}}$,$\mathbf{j}^{n-\frac{1}{2}}$.

Evaluation de $\mathbf{p}^{n+\frac{1}{2}}$

En utilisant le schéma "saute-mouton" (4.17), on a:

$$\frac{\mathbf{p}_k^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{p}_k^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} = Kq(\mathbf{E}_k^n + \frac{\mathbf{p}_k^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{p}_k^{n-\frac{1}{2}}}{2\gamma_k^n} \times \mathbf{B}_k^n) \tag{4.18}$$

où $\mathbf{E}_k^n$ représente la valeur du champ $\mathbf{E}$ à l'instant t^n au point $\mathbf{x}_k(t^n)$.
On rappelle que $\gamma_k^n = (1 + V \mid \mathbf{p}_k^n \mid^2)^{\frac{1}{2}}$. Or $\mathbf{p}_k$ n'est connu qu'à l'instant $t^{n-\frac{1}{2}}$. Nous

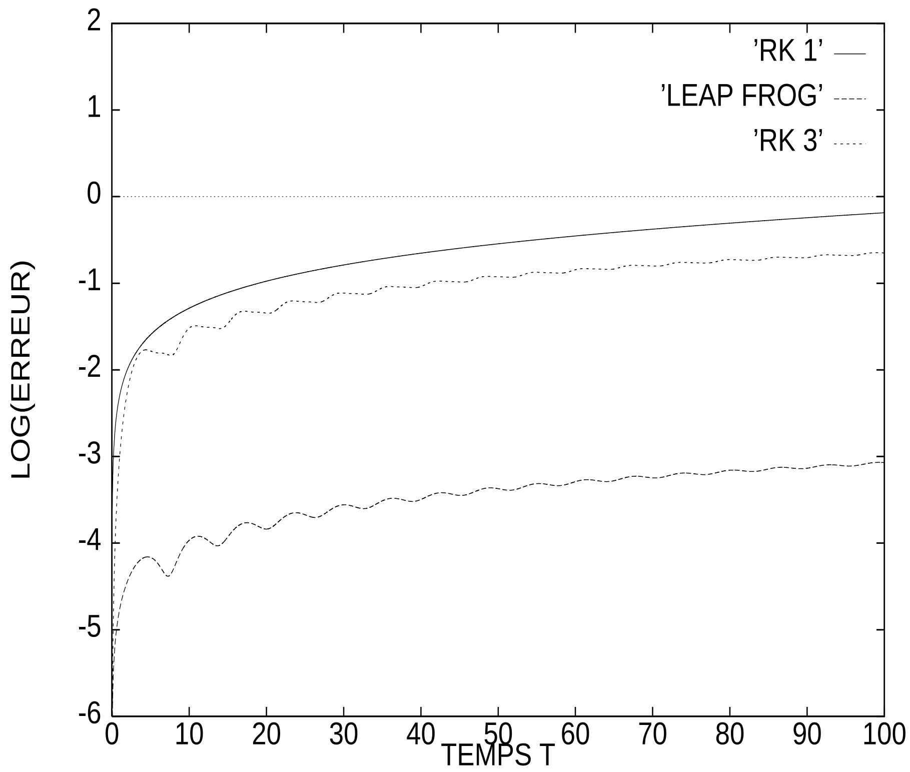


FIG. 4.3 – *Erreur en position pour différents schémas*

allons donc déterminer une prédiction $\overline{\mathbf{p}}^n$ de $\mathbf{p}^n$, voir [6]:

$$|\ \overline{\mathbf{p}}_k^n\ | = |\ \mathbf{p}_k^{n-\frac{1}{2}}\ | + Kq\frac{\Delta t}{2}\ |\ \mathbf{E}_k^n\ |$$

ainsi on obtient: $\gamma_k^n = (1 + V\ |\ \overline{\mathbf{p}}_k^n\ |)^{\frac{1}{2}}$.
Le schéma (4.18) est implicite, $\mathbf{p}^{n+\frac{1}{2}}$ est déterminé en résolvant un système linéaire de trois équations à trois inconnues.

Evaluation de $\mathbf{x}^{n+1}$

La position de la particule k à l'instant t^{n+1} est donnée par:

$$\frac{\mathbf{x}_k^{n+1} - \mathbf{x}_k^n}{\Delta t} = V\frac{\mathbf{p}_k^{n+\frac{1}{2}}}{\gamma_k^{n+\frac{1}{2}}} \tag{4.19}$$

où $\gamma_k^{n+\frac{1}{2}} = (1 + V\ |\ \mathbf{p}_k^{n+\frac{1}{2}}\ |^2)^{\frac{1}{2}}$.
Connaissant $\mathbf{x}^{n+1}$ et $\mathbf{p}^{n+\frac{1}{2}}$, on calcule ρ^{n+1} et $\mathbf{j}^{n+\frac{1}{2}}$ aux sommets du maillage à l'aide de (4.13).

Evaluation de $\mathbf{B}^{n+1}$ et $\mathbf{E}^{n+1}$

On note $\mathbf{Q}^n = (\mathbf{B}^n,\mathbf{E}^n)$. Le schéma s'écrit:

$$\begin{cases} \mathbf{Q}_i^0 = \mathbf{Q}_i^n \\ \mathbf{Q}_i^l = \mathbf{Q}_i^0 + \dfrac{\Delta t}{(r+1-l)}(-\Phi(\mathbf{Q}^{l-1}) + \mathbf{J}_i^{n+\frac{1}{2}} + \Psi(\mathbf{Q}^{l-1},\rho^{n+1})) \quad l = 1,2,...,r \\ \mathbf{Q}^{n+1} = \mathbf{Q}^r \end{cases} \tag{4.20}$$

où Φ et Ψ représentent la somme des flux convectifs et diffusifs sur la cellule C_i. Ces flux ont été explicités précédemment.

Remarques:

- Le schéma saute-mouton utilisé pour résoudre numériquement les équations du mouvement des particules est précis à l'ordre deux pour **E** et **B** donnés.
- La méthode présentée pour résoudre numériquement la formulation (MV) du système de Maxwell est d'ordre deux en espace lorsque l'on utilise le β-schéma présenté précédemment lorsque les densités de charge et de courant sont données. En ce qui concerne la précision du schéma d'intégration en temps, elle dépend du schéma de Runge-Kutta utilisé. Si l'on utilise un schéma de Runge-Kutta à deux pas, on obtient alors un schéma précis à l'ordre deux à la fois en temps et en espace.
- Il est également possible d'évaluer la précision de l'approximation des densités de charge et de courant, voir [17].
- Néanmoins l'ordre de la méthode ainsi obtenue pour résoudre les équations de Vlasov-Maxwell est difficile à déterminer. C'est un problème ouvert.

Chapitre 5

Analyse de stabilité et équations équivalentes

Nous allons nous intéresser ici à l'analyse de stabilité du système de Maxwell et de la formulation (MV) de ce même système en deux dimensions d'espace en l'absence de charges dans le cas d'une onde **TE**.
On rappelle la formulation (MV) des équations de Maxwell dans le cas bidimensionnel:

$$\mathbf{Q}_t + \mathbf{F_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{F_2}(\mathbf{Q})_y = \mathbf{J} + \mathbf{G_1}(\mathbf{Q})_x + \mathbf{G_2}(\mathbf{Q})_y$$

avec :

$$\begin{aligned}
\mathbf{Q} &= {}^t(Q_1,Q_2,Q_3)\\
\mathbf{F_1}(\mathbf{Q}) &= {}^t(Q_3,0,Q_1)\\
\mathbf{F_2}(\mathbf{Q}) &= {}^t(-Q_2,-Q_1,0)\\
\mathbf{J} &= -V\,{}^t(0,0,0)\\
\mathbf{G_1}(\mathbf{Q}) &= {}^t(0,\frac{1}{\alpha}(div\mathbf{Q}),0)\\
\mathbf{G_2}(\mathbf{Q}) &= {}^t(0,0,\frac{1}{\alpha}(div\mathbf{Q}))\\
div\mathbf{Q} &= \frac{\partial Q_2}{\partial x} + \frac{\partial Q_3}{\partial y}
\end{aligned} \tag{5.1}$$

5.1 Analyse de stabilité

Nous avons introduit un terme de viscosité dans les équations de Maxwell pour faire en sorte de mieux vérifier numériquement l'équation:

$$div\mathbf{Q} = 0 \tag{5.2}$$

Le but de cette partie va être de déterminer une stratégie pour le choix du paramètre α.
Si l'on prend la divergence de (5.1), on obtient une équation de la chaleur pour $div\mathbf{Q}$:

$$\frac{\partial(div\mathbf{Q})}{\partial t} - \frac{1}{\alpha}\Delta(div\mathbf{Q}) = 0$$

Etant donné le caractère dissipatif de cette équation, $div\mathbf{Q} \to 0$ quand $t \to +\infty$ d'autant plus vite que le coefficient de viscosité $\dfrac{1}{\alpha}$ est grand (soit lorsque α est petit). Donc (5.2) sera mieux vérifiée lorsque α est petit. Hélas, au niveau numérique, si l'on considère un α "trop" petit nous serons obligés d'utiliser un pas de temps Δt "petit", pour des raisons évidentes de stabilité, ce qui rendra le schéma trop coûteux en termes de temps calcul. Il faudra donc trouver un compromis entre ces deux exigences.
On va donc étudier ici la stabilité linéaire des schémas volumes finis, présentés précédemment, pour des maillages réguliers (de pas Δx,Δy) en rectangles et en triangles. Les schémas volumes finis pour des maillages en quadrangles sont présentés dans [10].
On considèrera tout d'abord les schémas précis à l'ordre un. Puis dans un deuxième temps nous considèrerons les schémas d'ordre supérieur pour lesquels on étudiera en particulier l'influence du paramètre de décentrage β sur la stabilité.
Pour ce faire, nous utilisons une analyse de Fourier et posons :

$$\mathbf{Q}^n_{j+p,k+q} = \hat{\mathbf{Q}}^n e^{i(px_j+qy_k)} \qquad (p,q) \in \mathbb{Z}^2$$

avec i^2=-1, $x_j = j\Delta x$, $y_k = k\Delta y$ et (p,q) le vecteur d'onde.
On définit: $\theta_1 = p\Delta x$ et $\theta_2 = q\Delta y$.
On obtient alors la relation:

$$\hat{\mathbf{Q}}^{n+1} = G_{\theta_1,\theta_2}\, \hat{\mathbf{Q}}^n$$

où G_{θ_1,θ_2} est la matrice d'amplification de dimension trois dépendant de Δt, θ_1, θ_2.
La condition nécessaire et suffisante de stabilité du schéma s'écrit:

$$\rho(G_{\theta_1,\theta_2}) \leq 1 \;\; \forall \;\; (\theta_1,\theta_2) \in [0,2\pi]^{\,2}, \tag{5.3}$$

où $\rho(G_{\theta_1,\theta_2})$ désigne le rayon spectral de G_{θ_1,θ_2}.

5.1.1 Schémas précis à l'ordre un

On pose $G_1 = G_{\theta_1,\theta_2}$.

Système de Maxwell classique

On effectue l'étude de stabilité par l'analyse de Fourier sur le schéma volumes finis appliqué au système de Maxwell (2.3). Dans le cas d'un maillage en triangles les limites de stabilité sont déterminées numériquement tandis que pour un maillage en rectangles une étude analytique a pu être menée [9].
Nous allons représenter sur les figures 5.1 et 5.2 les domaines de stabilité des schémas pour des maillages en rectangles et en triangles. Une façon de représenter ces domaines est de tracer les valeurs maximales du couple $(\dfrac{\Delta t}{\Delta x}, \dfrac{\Delta t}{\Delta y})$, telles que $\forall\, \theta_1, \theta_2, |G_1| \leq 1$.
Pour tracer ce domaine, on choisit les variables: $\alpha_1 = \dfrac{\Delta t}{\Delta x}$ en abscisse, $\alpha_2 = \dfrac{\Delta t}{\Delta y}$ en ordonnée.

– Cas d'un maillage rectangulaire.

Proposition 5.1.1 *Le schéma en volumes finis d'ordre un pour un maillage rectangulaire, appliqué au système de Maxwell classique est stable si et seulement si:*

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{\Delta y} \leq 1.$$

Pour la démonstration de cette proposition on pourra se référer à [9].
Remarques: On note que la condition de stabilité obtenue est la même que celle ob-

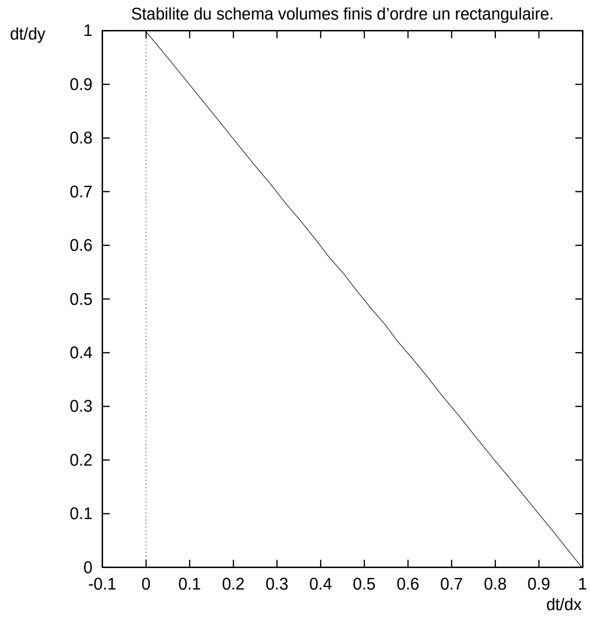


FIG. 5.1 – *Maillage en rectangles*

tenue pour un schéma décentré d'ordre un appliqué à l'équation d'advection scalaire bidimensionnelle :
$u_t + u_x + u_y = 0$.
De plus quand Δx (resp. Δy) tend vers l'infini, c'est à dire lorsqu'on étire le maillage dans une direction d'espace, on retrouve bien la condition de stabilité du cas monodimensionnel: $\dfrac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$ (resp. $\dfrac{\Delta t}{\Delta y} \leq 1$).

– Cas d'un maillage triangulaire.

On observe sur la figure 5.2 que, dans le cas d'un maillage triangulaire, le domaine de stabilité obtenu pour le système de Maxwell est plus petit que celui obtenu lorsqu'on considère l'équation d'advection scalaire $u_t + u_x + u_y = 0$.
D'autre part le domaine de stabilité en triangles est plus grand que celui obtenu en rectangles pour des valeurs de Δx proches de Δy. Par contre, quand Δx ou Δy sont infinis, c'est à dire quand on se ramène au cas monodimensionnel, la limite de stabilité est plus grande en rectangles qu'en triangles.

Formulation (MV) du système de Maxwell

L'étude de stabilité du schéma volumes finis appliqué à la formulation (MV) du système de Maxwell a pour but de préciser le choix du paramètre α. On sait, en

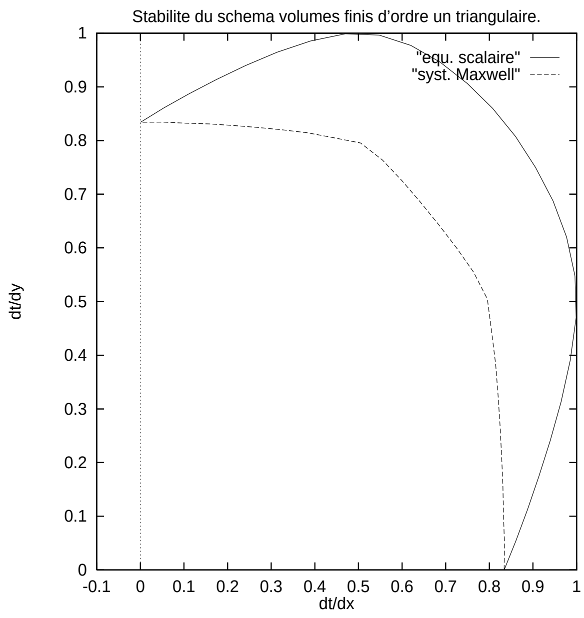


FIG. 5.2 – *Maillage en triangles*

effet, que le terme de viscosité a une grande influence sur la stabilité du schéma. En particulier, lorsque le coefficient de diffusion $(1/\alpha)$ augmente, le domaine de stabilité devient très réduit [14].

Définition 5.1.1 *On appellera α_{opt}, la plus petite valeur du paramètre α pour laquelle la condition de stabilité est la même que pour le système de Maxwell classique. Pour une telle valeur de α, on pourra donc utiliser le même pas de temps Δt que pour la résolution des équations de Maxwell classiques.*

– Cas d'un maillage rectangulaire.

On représente sur la figure 5.3 les domaines de stabilité en fonction de Δt et de α pour différentes valeurs de $h = \Delta x = \Delta y$. On voit sur ces courbes qu'il existe une valeur de α optimale α_{opt} au sens défini précédemment. Ainsi pour des valeurs de $\alpha \geq \alpha_{opt}$ le terme de pénalisation n'impose pas de contrainte supplémentaire sur le pas de temps puisqu'on peut utiliser le même Δt que dans le cas du système de Maxwell classique $(\alpha \to +\infty)$.
On remarque également que lorsque h devient grand, le pas de temps Δt augmente et la valeur de α_{opt} diminue: autrement dit pour des pas d'espace de plus en plus grands, on donne une importance de plus en plus grande au terme de viscosité.
On résume dans le tableau 5.4 les valeurs α_{opt} obtenues pour différentes valeurs de h.
On a vu qu'à la valeur $\alpha = \alpha_{opt}$ correspond un pas de temps maximal, il s'agit du pas de temps vérifiant la condition: $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, ce qui peut encore s'écrire, pour $\Delta x = \Delta y = h$:

$$\Delta t_{max} = \frac{h}{2}$$

On observe numériquement (voir le tableau 5.4) que le coefficient de viscosité $(1/\alpha_{opt})$ suit une loi linéaire en h.

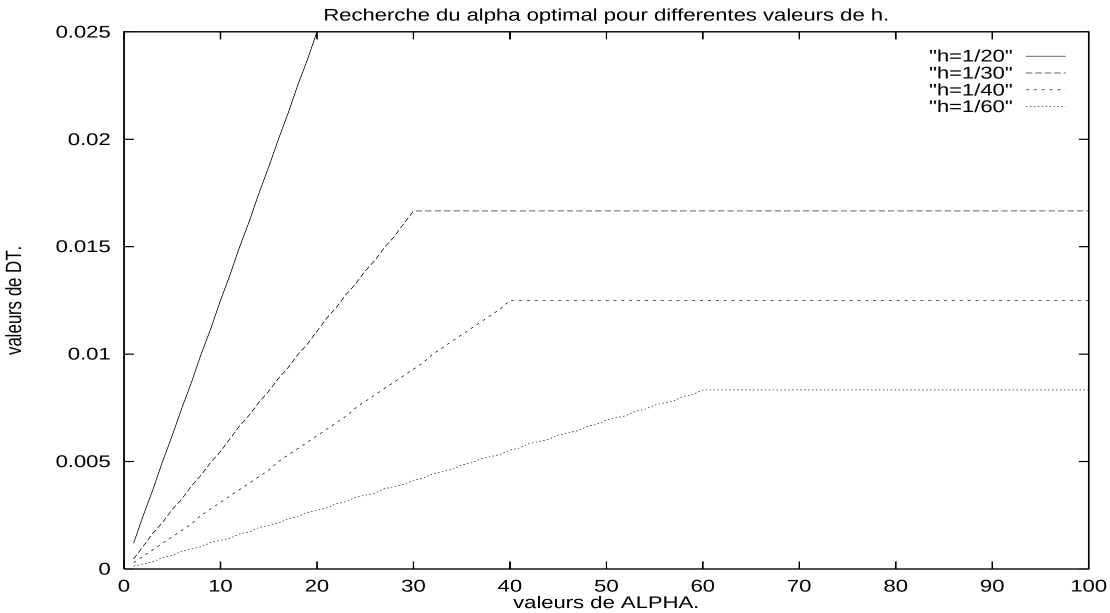


FIG. 5.3 – *Maillage en rectangles*

h	Δt_{max}	α_{opt}
$1/20$	$2.5\ 10^{-2}$	20
$1/30$	$1.66\ 10^{-2}$	30
$1/40$	$1.25\ 10^{-2}$	40
$1/60$	$8.33\ 10^{-3}$	60
$1/250$	$2\ 10^{-3}$	250

FIG. 5.4 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de h*

Plus précisément pour $h \leq \frac{1}{20}$, $\alpha_{opt} = \frac{1}{h} = \frac{1}{2\Delta t_{max}}$.

– Cas d'un maillage triangulaire.

On représente sur la figure 5.5 les domaines de stabilité en fonction de Δt et α pour différentes valeurs de $h = \Delta x = \Delta y$. On remarque sur la figure 5.5 que pour h fixé,

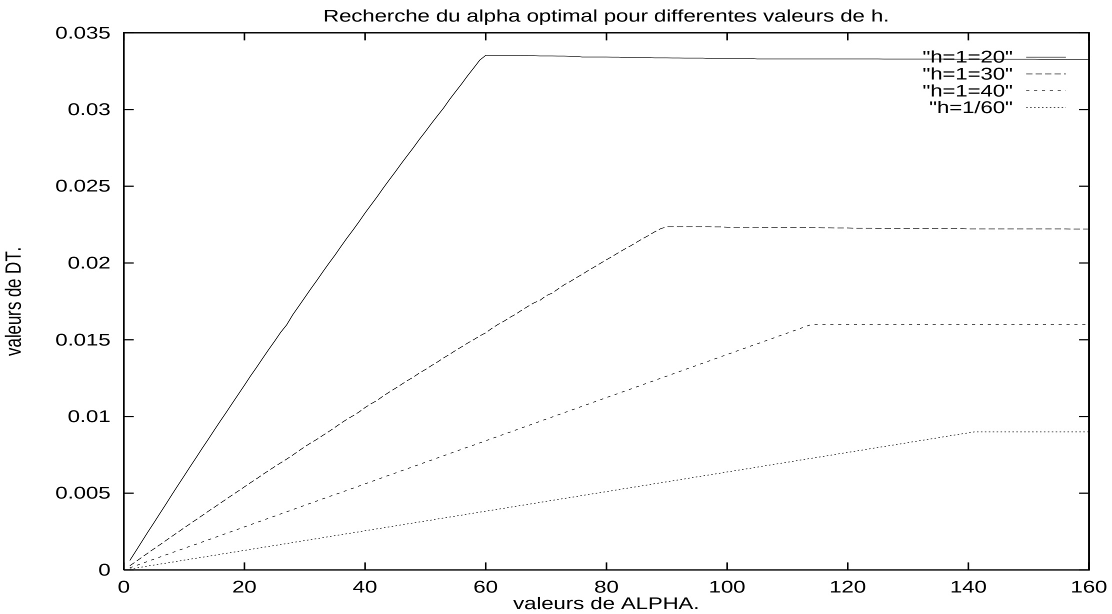


FIG. 5.5 – *Maillage en triangles*

le pas de temps maximal obtenu est plus grand que celui obtenu dans le cas d'un maillage en rectangles. Cela s'explique par le fait que la limite de stabilité du schéma en triangles est nettement supérieure à celle obtenue pour un maillage en rectangles, dans le cas Δx=Δy=h. D'autre part, à h fixé ou à Δt fixé, on remarque que la valeur de α_{opt} est plus grande que pour le schéma en rectangles.

On résume dans le tableau 5.6 les valeurs α_{opt} obtenues pour différentes valeurs de h.

Le tableau 5.6 nous montre que, de même que pour un maillage rectangulaire, le

h	Δt_{max}	α_{opt}
1/15	$4.4\ 10^{-2}$	45
1/20	$3.3\ 10^{-2}$	60
1/30	$2.2\ 10^{-2}$	90
1/40	$1.6\ 10^{-2}$	120
1/60	$9\ 10^{-3}$	145

FIG. 5.6 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de h*

coefficient de diffusion $(1/\alpha_{opt})$ suit une loi linéaire en h.

Plus précisément pour $h \leq \frac{1}{15}$, $\alpha_{opt} = \frac{3}{h}$.

5.1.2 Schémas d'ordre supérieur

Dans le cas d'une méthode d'intégration en temps de type Runge-Kutta à trois pas, on introduit le polynôme caractéristique:

$$G(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{6}.$$

Pour $z = A\Delta t$, on rappelle que le polynôme $G(A\ \Delta t)$ représente la matrice d'amplification de la méthode de Runge-Kutta appliquée à l'intégration du système d'équations différentielles ordinaires $\mathbf{Q}_t = A\ \mathbf{Q}$. Dans notre cas, A est la matrice associée à l'approximation spatiale. Si $\hat{\mathbf{Q}}$ désigne le vecteur des modes de Fourier, on obtient:

$$\hat{\mathbf{Q}}^{n+1} = G(A_{\theta 1,\theta_2}\ \Delta t)\ \hat{\mathbf{Q}}^n$$

La condition nécessaire et suffisante de stabilité du schéma s'écrit:

$$\rho(G(A_{\theta_1,\theta_2}\,\Delta t)) \leq 1 \ \ \forall \ \ (\theta_1,\theta_2) \ \in [0,2\pi]^{\,2}, \tag{5.4}$$

où $\rho(G(A_{\theta_1,\theta_2}\,\Delta t))$ désigne le rayon spectral de $G(A_{\theta_1,\theta_2}\,\Delta t)$.

Système de Maxwell classique

Les limites de stabilité sont obtenues numériquement aussi bien pour le schéma en rectangles que pour celui en triangles.

– Cas d'un maillage rectangulaire.

On représente sur la figure 5.7 le domaine de stabilité pour différentes valeurs du paramètre de décentrage β (avec $\alpha_1 = \dfrac{\Delta t}{\Delta x}$ en abscisse, $\alpha_2 = \dfrac{\Delta t}{\Delta y}$ en ordonnée.)
On rappelle que pour $\beta = 0$ on obtient un schéma centré; pour $\beta = 1$, le schéma est décentré, et pour $\beta = \dfrac{1}{2}$, on a un schéma demi-décentré.
On note que plus le schéma est décentré (β proche de 1), plus la limite de stabilité devient petite.

– Cas d'un maillage triangulaire.

On représente sur la figure 5.8 le domaine de stabilité pour différentes valeurs du paramètre de décentrage β. On observe sur les figures 5.7 et 5.8 que les domaines de stabilité s'ordonnent de la même manière en fonction de β pour un maillage en triangles que pour un maillage en rectangles.
Pour Δx proche de Δy on note que la limite de stabilité obtenue avec un maillage en triangles est supérieure à celle obtenue avec un maillage en rectangles, excepté pour $\beta = 0$ où le domaine de stabilité est le plus grand en rectangles. En général le maillage en triangles privilégie la direction $\Delta x = \Delta y$ en ce qui concerne la stabilité et le choix du pas de temps.
Dans le cas où une des directions Δx ou Δy est grande devant l'autre alors il est plus avantageux, pour le choix du pas de temps, d'utiliser le maillage en rectangles.

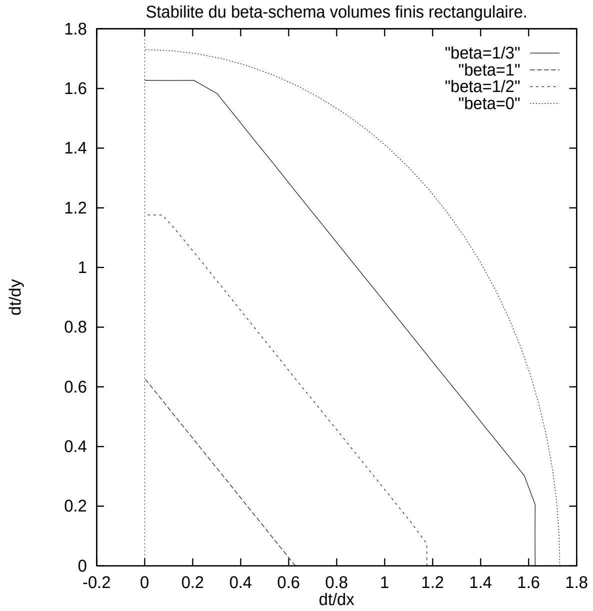


FIG. 5.7 – *Maillage en rectangles*

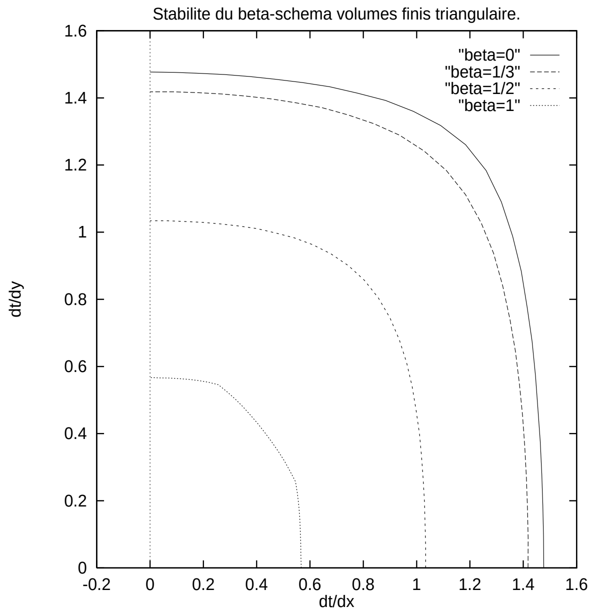


FIG. 5.8 – *Maillage en triangles*

Formulation (MV) du système de Maxwell

De même que précédemment, on cherche à déterminer le α_{opt} nous permettant d'utiliser le pas de temps le plus grand possible, dans le cas d'un schéma volumes finis d'ordre deux au moins en espace et d'ordre trois en temps.

– Cas d'un maillage rectangulaire.

On fixe $\Delta x = \Delta y = h = \dfrac{1}{20}$. On représente sur la figure 5.9 les domaines de stabilité en fonction de Δt et α pour différentes valeurs du paramètre β.

On voit sur la figure 5.9 que plus la valeur de β diminue (ie plus on se rapproche

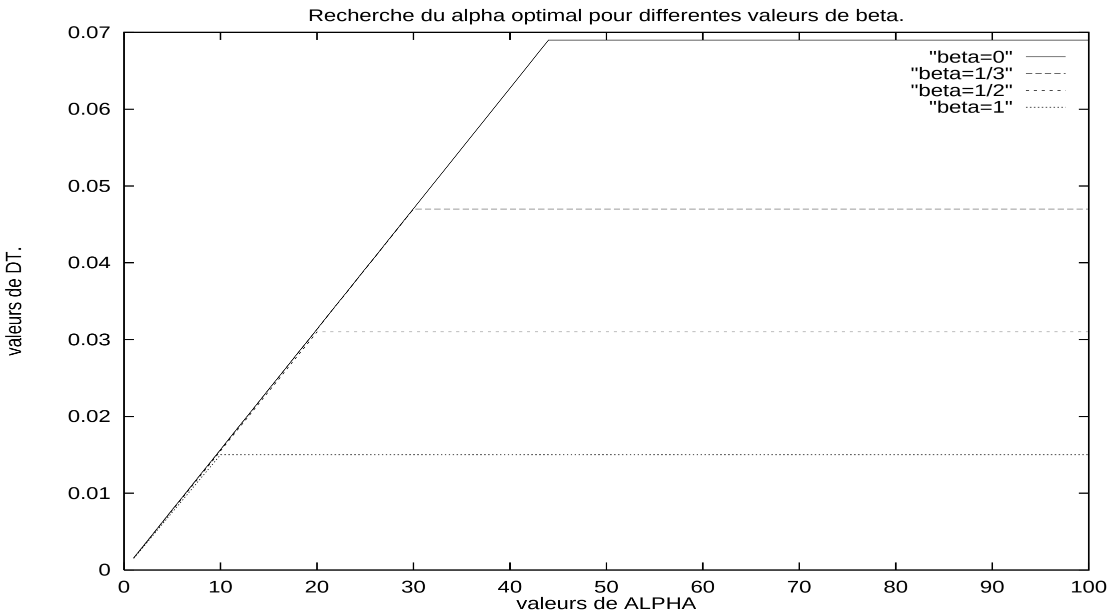


FIG. 5.9 – *Maillage en rectangles*

d'un schéma totalement centré) plus le pas de temps optimal augmente; ce qui est en accord avec les limites de stabilité obtenues pour le système de Maxwell classique. De même, plus la valeur de β diminue plus la valeur α_{opt} augmente, c'est à dire que pour un schéma centré l'influence du terme de viscosité est moins importante que dans le cas d'un schéma décentré. On remarque également que le pas de temps maximal varie linéairement avec α_{opt} quand on fait varier β.

On résume dans le tableau 5.10 les valeurs de α_{opt} pour différentes valeurs du paramètre β.

On considère maintenant le cas $\beta = \dfrac{1}{3}$: on a alors un schéma exactement d'ordre trois en espace et en temps (en l'absence du terme de viscosité). On représente sur la figure 5.11 les domaines de stabilité en fonction de Δt et de α pour différentes valeurs de $h = \Delta x = \Delta y$.

On remarque, sur la figure 5.11 que plus h augmente, plus α_{opt} diminue c'est à dire plus grande est l'importance donnée au terme de viscosité.

Les valeurs du tableau 5.12 montrent que le coefficient de viscosité $(1/\alpha_{opt})$ suit une loi linéaire en h.

β	Δt_{max}	α_{opt}
0	$6.9\ 10^{-2}$	45
$1/3$	$4.7\ 10^{-2}$	30
$1/2$	$3.1\ 10^{-2}$	20
1	$1.5\ 10^{-2}$	10

FIG. 5.10 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de β*

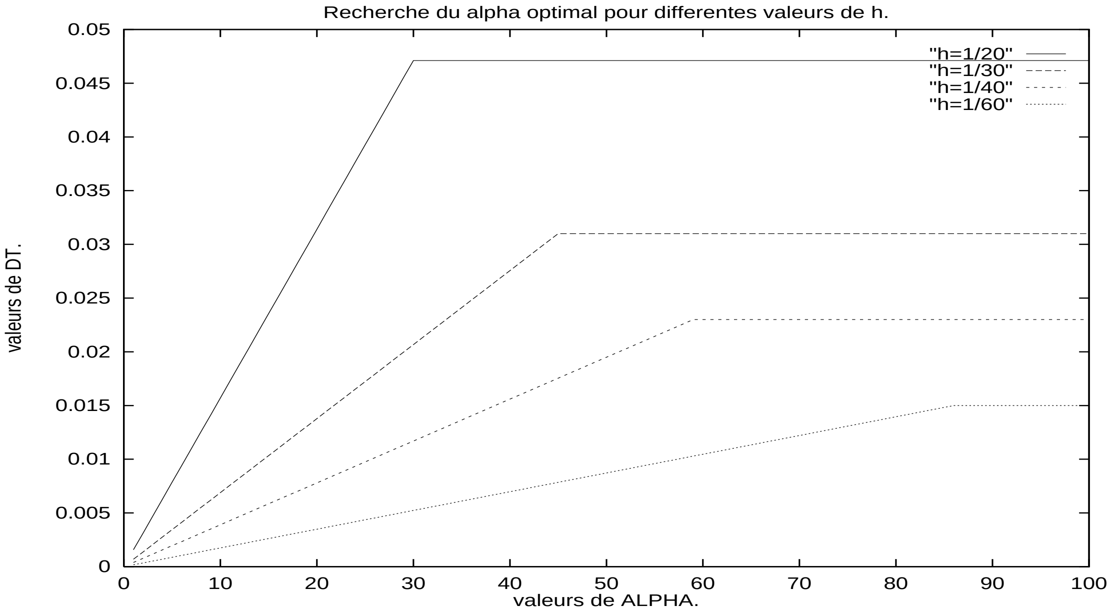


FIG. 5.11 – *Maillage en rectangles*

h	Δt_{max}	α_{opt}
$1/20$	$4.7\ 10^{-2}$	30
$1/30$	$3.1\ 10^{-2}$	45
$1/40$	$2.3\ 10^{-2}$	60
$1/50$	$1.8\ 10^{-2}$	75
$1/60$	$1.5\ 10^{-2}$	90

FIG. 5.12 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de h*

Plus précisément: pour $h \leq \frac{1}{20}$, $\alpha_{opt} = \frac{3}{2h}$

– Cas d'un maillage triangulaire.

De même que pour un maillage en rectangles, nous fixons le pas d'espace $h = \frac{1}{20}$ et on représente sur la figure 5.13 les domaines de stabilité en fonction de Δt et α pour différentes valeurs du paramètre β.

Les courbes varient de la même manière pour un maillage en rectangles ou en triangles.

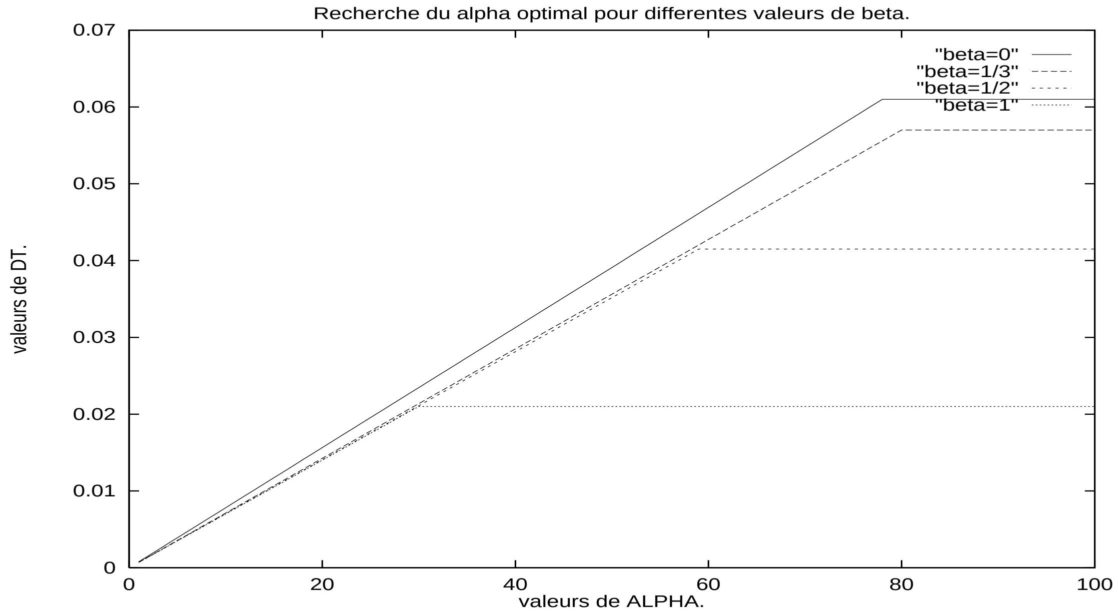


FIG. 5.13 – *Maillage en triangles*

A β fixé, on remarque que le pas de temps maximal est plus grand dans le cas d'un maillage en triangles que pour un maillage en rectangles, sauf dans le cas d'un schéma centré (β=0). De plus, à β fixé, et pour un même pas de temps Δt, on voit que la valeur de α_{opt} est plus petite en rectangles qu'en triangles (d'où une plus grande influence donnée au terme de viscosité pour un maillage en rectangles). Contrairement au schéma sur un maillage en rectangles, ici Δt ne varie pas linéairement avec α_{opt} quand on fait varier β comme le montre le tableau 5.14.

On considère à nouveau le cas particulier où $\beta = \frac{1}{3}$. On représente sur la figure

β	Δt_{max}	α_{opt}
0	$6.1\ 10^{-2}$	78
1/3	$5.7\ 10^{-2}$	80
1/2	$4.1\ 10^{-2}$	58
1	$2.1\ 10^{-2}$	30

FIG. 5.14 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de β*

5.15 les domaines de stabilité en fonction de Δt et de α pour différentes valeurs de $h = \Delta x = \Delta y$.

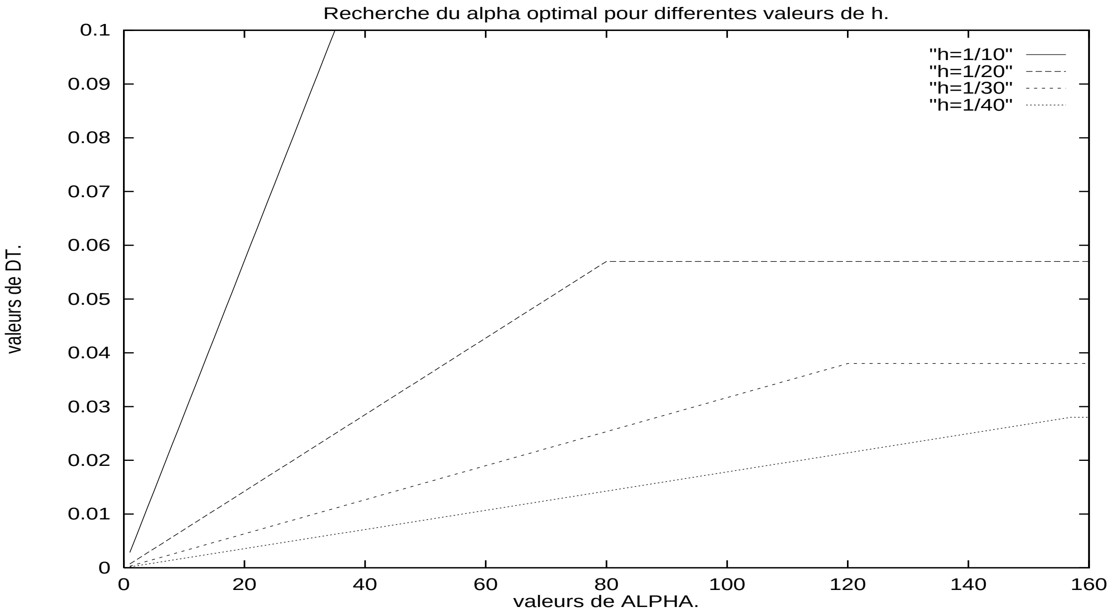


FIG. 5.15 – *Maillage en triangles*

On reporte sur le tableau 5.16 les valeurs de α_{opt} en fonction de $h = \Delta x = \Delta y$.
A h fixé, le pas de temps optimal est plus grand pour un maillage en triangles que

h	Δt_{max}	α_{opt}
1/20	$5.7\ 10^{-2}$	80
1/30	$3.8\ 10^{-2}$	120
1/40	$2.8\ 10^{-2}$	160
1/50	$2.2\ 10^{-2}$	200

FIG. 5.16 – *Valeurs de α_{opt} en fonction de h*

pour un maillage en rectangles, et ce quelle que soit la valeur de h. Toutefois, utiliser un schéma précis en temps s'avère plus intéressant en rectangles. En effet:

$$\frac{\Delta t_{RK3}}{\Delta t_{RK1}} = 1.8 \text{ en rectangles}$$

$$\frac{\Delta t_{RK3}}{\Delta t_{RK1}} = 1.7 \text{ en triangles}$$

On remarque également que le coefficient de viscosité $(1/\alpha_{opt})$ suit une loi linéaire en h.
Plus précisément: pour $h \leq \frac{1}{10}$, $\alpha_{opt} = \frac{4}{h}$
Cette étude de stabilité nous montre que les schémas en triangles permettent, à Δx=Δy=h fixé, un choix de pas de temps plus grand qu'en rectangles. Elle nous a permis de déterminer une valeur optimale de α (α_{opt}) en fonction des schémas et du maillage utilisés. On a vu également, que, quel que soit l'ordre en temps et l'approximation spatiale choisis, le coefficient de diffusion $(1/\alpha_{opt})$ suit une loi linéaire en h. La figure 5.17 nous montre l'influence de ce paramètre sur les différents schémas en

fonction de h. On voit que la valeur de α_{opt} est plus petite pour les schémas en rectangles que pour les schémas en triangles. Donc les schémas en rectangles permettent de donner plus d'importance au terme de viscosité et par conséquent de mieux vérifier numériquement l'équation: $div\mathbf{Q} = 0$.
De même la valeur de α_{opt} devient plus grande quand on augmente la précision du schéma, aussi bien en triangles qu'en rectangles.

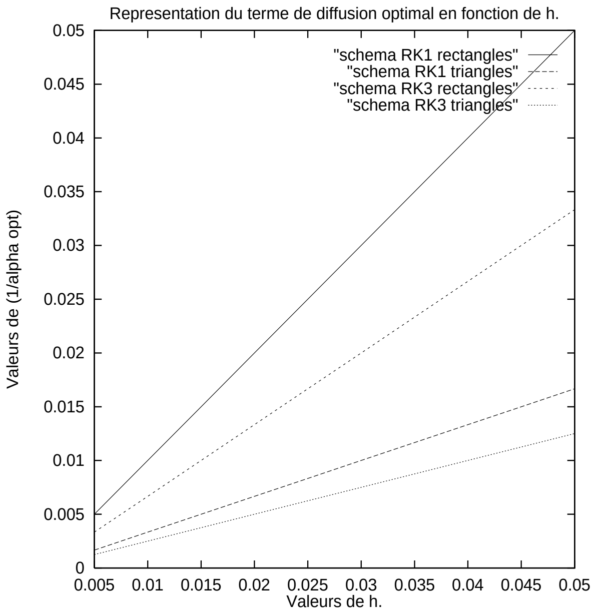


FIG. 5.17 – α_{opt} *en fonction de h*

5.2 Equations équivalentes

Les équations équivalentes, introduites par Warming and Hyett [28] permettent une analyse détaillée et précise des termes d'erreur de troncature; notamment des erreurs de dispersion et de dissipation. Elles donnent les équations que résolvent effectivement nos schémas.
Pour obtenir ces équations, nous appliquons la méthode décrite dans [7] à la formulation (MV) du système de Maxwell . Cette méthode simplifie considérablement les calculs dans le cas linéaire et a l'avantage de rester la même quelque soit le schéma étudié (implicite ou explicite, schéma à plusieurs niveaux comme ceux de Runge-Kutta) et quelle que soit la dimension d'espace.
Pour plus de détails sur cette méthode de calcul, on pourra se référer à [7].
Nous allons, dans cette partie, établir les équations équivalentes des schémas présentés précédemment. Nous nous intéresserons plus particulièrement à l'équation que vérifie $div\mathbf{Q}$ pour justifier l'introduction de la formulation (MV) des équations de Maxwell.
On rappelle que dans le cas bidimensionnel, pour une onde **TE** en l'absence de charges,

la formulation (MV) du système de Maxwell s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{l} \dfrac{\partial Q_1}{\partial t} + \dfrac{\partial Q_3}{\partial x} - \dfrac{\partial Q_2}{\partial y} = 0 \\ \dfrac{\partial Q_2}{\partial t} - \dfrac{\partial Q_1}{\partial y} - \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\partial (div\mathbf{Q})}{\partial x} = 0 \\ \dfrac{\partial Q_3}{\partial t} + \dfrac{\partial Q_1}{\partial x} - \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\partial (div\mathbf{Q})}{\partial y} = 0 \\ div\mathbf{Q} = \dfrac{\partial Q_2}{\partial x} + \dfrac{\partial Q_3}{\partial y} = 0 \end{array}\right. \tag{5.5}$$

5.2.1 Analyse et comparaison des termes d'erreur des schémas d'ordre un.

Par la suite nous noterons: $Q^l_x = \dfrac{\partial Q_l}{\partial x} \quad l = 1,\ldots,3.$

Maillage rectangulaire.

On donne ici les termes d'erreur pour la deuxième composante Q^2, les équations équivalentes des autres composantes s'obtenant par symétrie par rapport à Δx, Δy. Pour la valeur $\alpha = \infty$, on obtient l'équation équivalente du système de Maxwell classique.

$$\begin{aligned} Q^2_t + Q^1_y = &\ \frac{1}{2}(\Delta y - \Delta t)\, Q^2_{yy} + (\frac{\Delta t}{2} + \frac{1}{\alpha})\, Q^3_{xy} + \frac{Q^2_{xx}}{\alpha} \\ & - \frac{\Delta t}{2\alpha^2}(Q^2_{xxxx} + Q^2_{xxyy} + Q^3_{xyyy} + Q^3_{xxxy}) + O(\Delta t,\Delta x,\Delta y)^2 \end{aligned}$$

On voit ici clairement que la nouvelle formulation proposée consiste à ajouter des termes de diffusion d'ordre deux $(\dfrac{E^1_{xx}}{\alpha},\dfrac{E^2_{xy}}{\alpha})$ et d'ordre quatre $(-\dfrac{\Delta t}{2\alpha^2}\,(E^1_{xxxx} + E^1_{xxyy} + E^2_{xyyy} + E^2_{xxxy}))$.
Nous établissons l'équation équivalente sur la divergence que nous obtenons aisément à partir des équations équivalentes du champ $\mathbf{Q}$.
En effet:

$$\begin{aligned} (div\mathbf{Q})_t &= Q^2_{tx} + Q^3_{ty} \\ &= \frac{\Delta y}{2} Q^2_{xyy} + \frac{\Delta x}{2} Q^3_{xxy} + \frac{Q^3_{3y}}{\alpha} + \frac{Q^2_{xyy}}{\alpha} + \frac{Q^2_{3x}}{\alpha} + \frac{Q^3_{xxy}}{\alpha} \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2\alpha^2}\,(Q^2_{5x} + 2Q^2_{xxxyy} + Q^2_{xyyyy} + Q^3_{5y} + 2Q^3_{xxyyy} + Q^3_{xxxxy}) \\ &\quad + O(\Delta t,\Delta x,\Delta y)^2 \end{aligned}$$

ce qui peut encore s'écrire:

$$(div\,\mathbf{Q})_t - \frac{1}{\alpha}\,\Delta\; div\mathbf{Q} + \frac{\Delta t}{2\alpha^2}\,\Delta^2\; div\mathbf{Q} = \frac{\Delta y}{2} Q^2_{xyy} + \frac{\Delta x}{2} Q^3_{xxy} + O(\Delta t,\Delta x,\Delta y)^2 \tag{5.6}$$

où $\Delta^2\ div\mathbf{Q}$ représente le bilaplacien de $div\mathbf{Q}$. Là encore on voit clairement que la nouvelle formulation proposée consiste pour Δx et Δy fixés à rajouter des termes de diffusion sur la divergence du champ $\mathbf{Q}$ et donc de mieux vérifier numériquement l'équation $div\mathbf{Q} = 0$.

Maillage triangulaire

On procède de la même manière que précédemment. Pour ne pas alourdir les calculs, on pose Δx=Δy=h.
On obtient comme équation équivalente pour la deuxième composante du champ $\mathbf{Q}$:

$$
\begin{aligned}
Q_t^2 + Q_y^1 = & (\frac{ah}{6} + \frac{1}{\alpha})\, Q_{xx}^2 + (\frac{ah}{6} - \frac{\Delta t}{2})\, Q_{yy}^2 + \frac{h}{3\sqrt{2}}\, Q_{xy}^2 + \frac{bh}{6}\,(Q_{xx}^3 + Q_{yy}^3) \\
& +(-\frac{h}{3\sqrt{2}} + \frac{\Delta t}{2} + \frac{1}{\alpha})\, Q_{xy}^3 - \frac{\Delta t}{2\alpha^2}(Q_{xxxx}^2 + Q_{xxyy}^2 + Q_{xyyy}^3 + Q_{xxxy}^3) + O(\Delta t,h)^2
\end{aligned}
$$

où on a posé $a = \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{5}}$, $b = \frac{2}{\sqrt{5}} - \frac{1}{\sqrt{2}}$ et $c = \sqrt{2} + \sqrt{5}$.
On remarque que les termes en temps sont les mêmes pour le schéma en triangles que pour le schéma en rectangles. Seuls les termes liés à l'approximation spatiale diffèrent: le schéma est beaucoup plus dissipatif dans le cas d'un maillage triangulaire; en effet parmi les termes d'erreur spatiale interviennent tous les termes de dissipation d'ordre deux pour les composantes Q^2 et Q^3 du champ $\mathbf{Q}$.
L'équation équivalente sur la divergence du champ $\mathbf{Q}$ s'écrit:

$$
\begin{aligned}
(div\mathbf{Q})_t - \frac{1}{\alpha}\,\Delta\ div\mathbf{Q} + \frac{\Delta t}{2\alpha^2}\,\Delta^2\ div\mathbf{Q}\ = & \\
& \frac{h}{6\sqrt{2}}(Q_{xxx}^2 + Q_{xxy}^2 + Q_{yyy}^2 - Q_{xyy}^2 - Q_{xxx}^3 + Q_{yyy}^3 + Q_{xyy}^3 - Q_{xxy}^3) \\
& +\frac{h}{6\sqrt{5}}(Q_{xxx}^2 + 2Q_{xxy}^2 + 2Q_{yyy}^2 + Q_{xyy}^2 + 2Q_{xxx}^3 + Q_{yyy}^3 + 2Q_{xyy}^3 + Q_{xxy}^3) \\
& +O(\Delta t,h)^2
\end{aligned}
$$

L'équation équivalente diffère, au niveau du terme de droite, de celle obtenue pour un maillage en rectangles. Le membre de droite contient les termes d'erreur d'ordre un en temps et en espace inhérents au schéma. Les termes d'erreur en espace comprennent ici toutes les dérivées troisième de $\mathbf{Q}$: ces termes d'erreur proviennent des termes de diffusion spatiale du schéma.

5.2.2 Analyse et comparaison des termes d'erreur des schémas d'ordre supérieur

On se propose dans cette partie d'écrire les équations équivalentes dans le cas d'une approximation spatiale au moins d'ordre deux et d'un schéma en temps RK3.

Maillage rectangulaire.

On donne l'équation équivalente pour la deuxième composante du champ $\mathbf{Q}$:

$$\begin{aligned}
Q_t^2 + Q_y^1 = & -\frac{\Delta y^2}{6}(1-3\beta)\, Q_{3y}^1 - \frac{\beta}{4}\,(Q_{4y}^2 \Delta y^3 + Q_{xxyy}^2 \Delta x^2 \Delta y) \\
& -\frac{\Delta t^3}{24}\,(Q_{4y}^2 + Q_{xxyy}^2 - Q_{xyyy}^3 - Q_{xxxy}^3) + \frac{Q_{xx}^2}{\alpha} + \frac{Q_{xy}^3}{\alpha} \\
& +\frac{1}{12\alpha}\,(Q_{4x}^2 \Delta x^2 + 2\, Q_{xxyy}^2 \Delta y^2 + 2\, Q_{xxxy}^3 \Delta x^2 + 2\, Q_{xyyy}^3 \Delta y^2) \\
& -\frac{\Delta t^3}{24\alpha^4}\,(Q_{8x}^2 + 3\, Q_{6x2y}^2 + 3\, Q_{4x4y}^2 + Q_{2x6y}^2 + Q_{7xy}^3 + 3\, Q_{5x3y}^3 + 3\, Q_{4x4y}^3 + Q_{6x2y}^3) \\
& +O(\Delta t, \Delta x, \Delta y)^4
\end{aligned}$$

Cette équation équivalente nous montre que deux valeurs de β sont intéressantes quand on considère le système de Maxwell classique ($\alpha = \infty$): la valeur $\beta = \dfrac{1}{3}$ annule les termes de dispersion spatiale et permet ainsi d'avoir un schéma d'ordre trois en temps et en espace; avec la valeur β=0 on a toujours un schéma d'ordre deux, mais cette valeur permet d'annuler les termes de dissipation en espace.
En ce qui concerne la formulation (MV) du système de Maxwell, on remarque que l'on obtient des termes d'erreur en $\dfrac{\Delta x^2}{\alpha}, \dfrac{\Delta y^2}{\alpha}$ et également en $\dfrac{\Delta t^3}{24\alpha^4}$, faisant intervenir respectivement les dérivées quatrième et huitième de $\mathbf{Q}$, c'est à dire des termes de dissipation. Comme précédemment, on recherche les termes d'erreur sur la divergence du champ $\mathbf{Q}$. Pour plus de simplicité on donne l'équation équivalente dans le cas $\Delta x = \Delta y = h$.

$$\begin{aligned}
(div\mathbf{Q})_t - \frac{1}{\alpha}\,\Delta\; div\mathbf{Q} + \frac{\Delta t^3}{24\alpha^4}\,\Delta^4 div\mathbf{Q} - \frac{h^2}{6\alpha}\,\Delta^2 div\mathbf{Q} + \frac{h^2}{12\alpha}\,(Q_{5x}^2 + Q_{5y}^3) = \\
-\frac{h^2}{6}(1-3\beta)\,(Q_{xyyy}^1 - Q_{xxxy}^1) - \frac{\beta h^3}{4}\,(Q_{x4y}^2 + Q_{4xy}^3 + Q_{3x2y}^2 + Q_{2x3y}^3) + O(\Delta t, h)^4
\end{aligned}$$

avec $\Delta^4 div\mathbf{Q} = \Delta \circ \Delta \circ \Delta \circ \Delta(div\mathbf{Q})$. Dans le cas du système de Maxwell classique ($\alpha = \infty$), on remarque que l'erreur sur la divergence est a priori d'ordre deux en espace, sauf pour $\beta = \dfrac{1}{3}$, où elle est d'ordre trois. Dans ce cas, les termes d'erreur du second membre proviennent des termes de dissipation spatiale du schéma.
Dans le cas de la formulation (MV) du système de Maxwell, on remarque que les termes d'erreur liés au terme de viscosité sont des termes de dissipation en temps et en espace. Là aussi la méthode proposée rajoute des termes de dissipation sur la divergence de Q.

Maillage triangulaire

On donne l'équation équivalente du β-schéma pour la deuxième composante Q^2. On pose Δx=Δy=h:

$$\begin{aligned}
Q^2_t + Q^1_y = & -\frac{h^2}{6}(1-3\beta)\,(Q^1_{yyy} + Q^1_{xxy} + Q^1_{xyy}) - \beta h^3\, g(.,.) \\
& -\frac{\Delta t^3}{24}\,(Q^2_{4y} + Q^2_{xxyy} - Q^3_{x3y} - Q^3_{3xy}) + \frac{Q^2_{xx}}{\alpha} + \frac{Q^3_{xy}}{\alpha} \\
& +\frac{1}{12\alpha}\,(Q^2_{4x}\Delta x^2 + 2\,Q^3_{3xy}\Delta x^2 + 2\,Q^3_{x3y}\Delta y^2) \\
& -\frac{\Delta t^3}{24\alpha^4}\,(Q^2_{8x} + 3\,Q^2_{6xyy} + 3\,Q^2_{4x4y} + Q^2_{xx6y} \\
& +Q^3_{7xy} + 3\,Q^3_{5x3y} + 3\,Q^3_{4x4y} + Q^3_{6xyy}) + O(\Delta t,\Delta h)^4
\end{aligned}$$

où g dépend linéairement des dérivées quatrième en espace de Q^2 et Q^3.
Dans le cas du système de Maxwell classique ($\alpha = \infty$), comme pour le schéma en rectangles, on voit que la valeur $\beta = \dfrac{1}{3}$ permet d'annuler les termes de dispersion spatiale et que les termes de dissipation spatiale sont fonction de β.
Comme à l'ordre un, les termes d'erreur de dispersion et de dissipation sont plus nombreux en triangles qu'en rectangles. Ici interviennent des termes de dispersion croisés Q^1_{xxy}, Q^1_{xyy}, ainsi que tous les termes de dissipation spatiale des deux premières composantes Q^2, Q^3 dans g. On remarque que les termes en temps sont identiques à ceux obtenus pour le β-schéma en rectangles.
Le β-schéma en maillage triangulaire est donc plus dissipatif que celui en maillage rectangulaire; en effet, l'approximation des flux numériques choisie fait intervenir 19 noeuds de calcul pour le maillage en triangles alors que le schéma en rectangles fait intervenir 9 noeuds de calcul.
Dans le cas de la formulation (MV) du système de Maxwell, les termes liés à α sont des termes de dissipation en temps et en espace, comme pour le schéma en rectangles.
Nous écrivons l'équation équivalente pour la divergence de $\mathbf{Q}$ dans le cas Δx=Δy=h:

$$\begin{aligned}
(div\mathbf{Q})_t - \frac{1}{\alpha}\,\Delta\, div\mathbf{Q} - \frac{h^2}{6\alpha}\,\Delta^2 div\mathbf{Q} + \frac{h^2}{12\alpha}\,(Q^2_{5x} + Q^3_{5y} + 2\,Q^2_{3xyy} + 2\,Q^3_{xx3y}) + \\
\frac{\Delta t^3}{24\alpha^4}\,\Delta^4 div\mathbf{Q} = -\beta h^3\, k(.,.) + O(\Delta t,h)^4
\end{aligned}$$

où k dépend linéairement des dérivées cinquième en espace de Q^2 et Q^3.
Dans le cas particulier Δx=Δy=h, les termes d'erreur provenant de la dispersion du schéma s'annihilent. Dans ce cas-là, l'erreur sur la divergence dans le cas du système de Maxwell classique est d'ordre trois. Les termes d'erreur proviennent alors des termes de dissipation du schéma.
Dans le cas de la formulation (MV) du système de Maxwell, on voit comme précédemment que les termes de viscosité sont des termes de dissipation sur la divergence.
Pour résumer, les équations équivalentes montrent que l'erreur sur la divergence est très sensible à la précision spatiale du schéma: en effet dans le cas du système de Maxwell classique ($\alpha = \infty$), les termes d'erreur sur la divergence proviennent des

termes de dispersion et de dissipation du schéma. La méthode de viscosité proposée ($\alpha < \infty$) consiste à augmenter la diffusion des schémas et ainsi obtenir une équation de la chaleur pour la divergence de $\mathbf{Q}$.

5.3 Résultats numériques

Dans cette partie on s'intéresse plus particulièrement à la vérification numérique des relations de divergence (3.1).
Nous constaterons que l'introduction d'un terme de viscosité dans les équations de Maxwell permet de mieux satisfaire numériquement les contraintes sur la divergence du champ électromagnétique.

En l'absence de charges

On considère la formulation (MV) du système de Maxwell en deux dimensions d'espace pour une onde transverse électrique (**TE**) sur $\Omega =]0,1[\times]0,1[$ avec des conditions aux limites périodiques. On initialise les composantes du champ électromagnétique par une combinaison linéaire d'ondes sinusoïdales de diverses fréquences.
On représente sur les figures 5.18.a et 5.18.b la norme L^1 de la divergence du champ $\mathbf{Q}$, $||div\,\mathbf{Q}||_{L^1(\Omega)}$ en fonction du temps à $\Delta x = \Delta y$ fixé. Ceci est obtenu pour différentes valeurs de α pour un maillage en rectangles pour les schémas d'ordre un et trois.
On représente ensuite la même chose sur les figures 5.19.a et 5.19.b pour un maillage

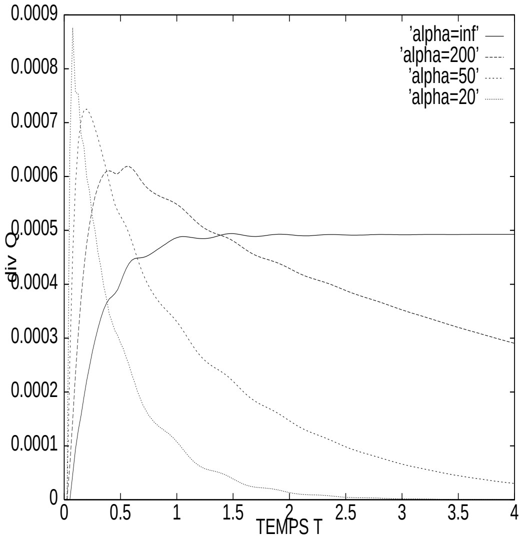


FIG. 5.18.a: *Schéma à l'ordre un*

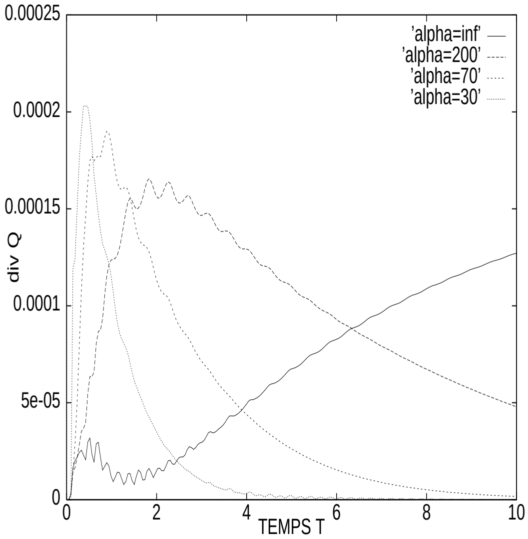


FIG. 5.18.b: *Schéma à l'ordre trois*

FIG. 5.18 – *Maillage en rectangles*

en triangles. On remarque que plus le paramètre α est petit, ce qui correspond à une influence plus importante des termes de viscosité introduits dans les équations de Maxwell, plus la divergence du champ $\mathbf{Q}$ est petite. En contrepartie, le fait d'utiliser une

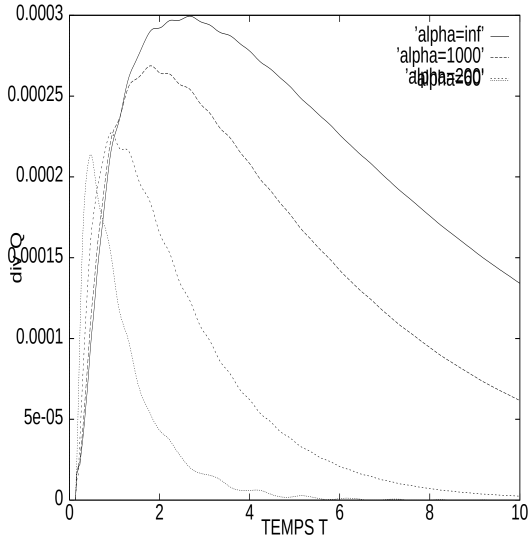


FIG. 5.19.a: *Schéma à l'ordre un*

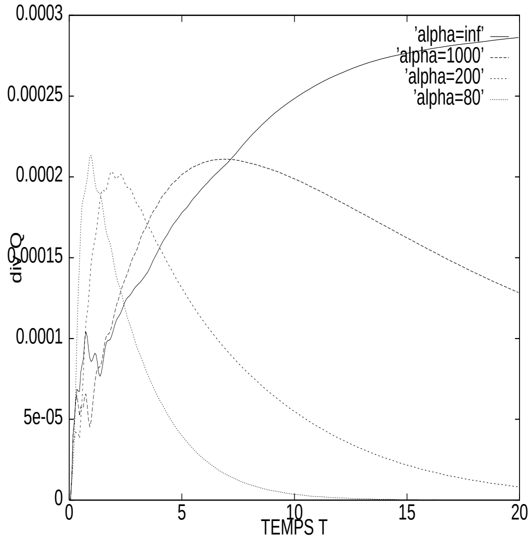


FIG. 5.19.b: *Schéma à l'ordre trois*

FIG. 5.19 – *Maillage en triangles*

valeur de α très petite va entraîner une contrainte sur le pas de temps Δt pour des raisons de stabilité. Néanmoins, nous avons montré précédemment l'existence d'une valeur optimale α_{opt} du paramètre α qui n'introduit aucune contrainte supplémentaire sur le pas de temps Δt. On remarque également que $div\,\mathbf{Q} \to 0$ quand $t \to +\infty$, ceci est dû au caractère dissipatif de la formulation (MV) du système de Maxwell.
On compare maintenant l'influence du maillage en triangles ou en rectangles sur la divergence du champ $\mathbf{Q}$.
On représente sur les figures 5.20.a et 5.20.b, $||div\,\mathbf{Q}||_{L^1(\Omega)}$ en fonction du temps à $\Delta x = \Delta y$ fixé avec la valeur optimale du paramètre de correction pour les schémas d'ordre un et trois.

On remarque, pour les schémas à l'ordre un et à l'ordre trois, que la divergence est plus petite lorsque l'on considère un maillage en rectangles. Ceci est dû au fait que la valeur optimale du paramètre α est plus petite pour le schéma en rectangles, par conséquent l'influence des termes de viscosité est plus importante. Cependant il faut préciser que l'on peut utiliser des pas de temps plus grands pour le schéma en triangles et donc diminuer le temps de calcul.
On va maintenant étudier l'influence du paramètre de décentrage β sur la divergence du champ $\mathbf{Q}$. Plus précisément on représente sur les figures 5.21.a et 5.21.b la norme L^1 de la divergence du champ électrique $\mathbf{Q}$ en fonction du temps à $\Delta x = \Delta y$ fixé. Ceci est obtenu en considérant la valeur optimale du paramètre α pour chaque valeur de β dans le cas des schémas en rectangles et en triangles.

On rappelle que lorque $\beta = 0$ le schéma est centré et lorsque $\beta = 1$ il est décentré. On remarque, aussi bien pour le schéma en triangles que pour le schéma en rectangles, que la divergence diminue lorsque β augmente. Ceci s'explique par le fait que lorsque β augmente, la valeur optimale (α_{opt}) du paramètre α diminue. On note cependant que la contrainte sur le pas de temps augmente avec β. Il semble au vu des résultats qu'il vaut mieux prendre $\beta = 1/3$ valeur pour laquelle le schéma est d'ordre trois en

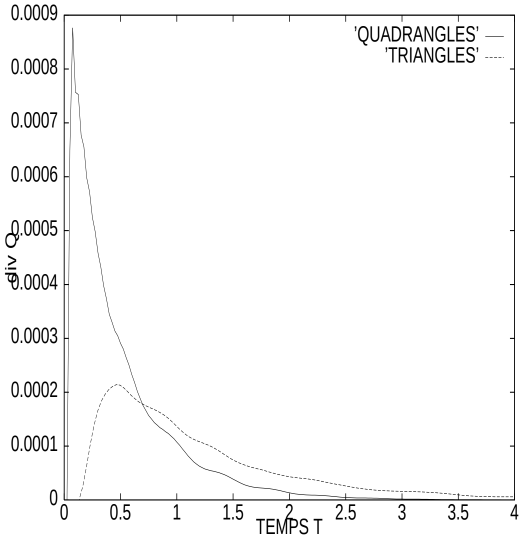


FIG. 5.20.a : *Schémas à l'ordre un*

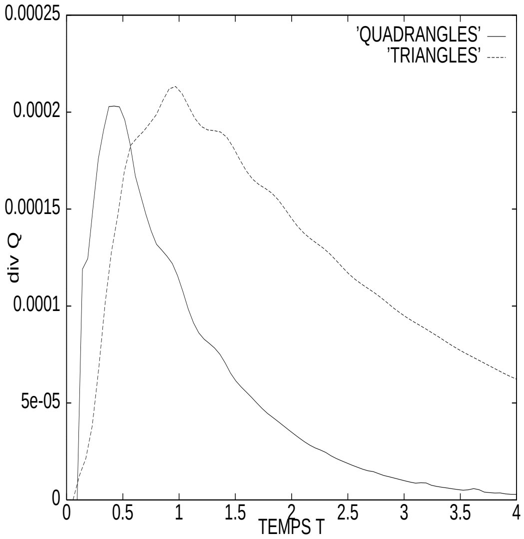


FIG. 5.20.b : *Schémas à l'ordre trois*

FIG. 5.20 – *Comparaison triangles-quadrangles*

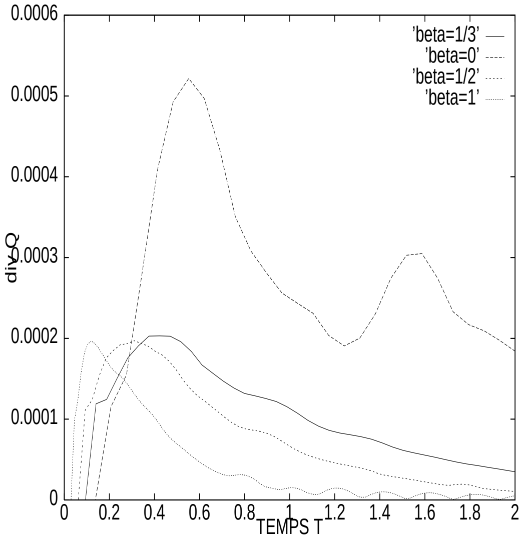


FIG. 5.21.a : *Maillage en rectangles*

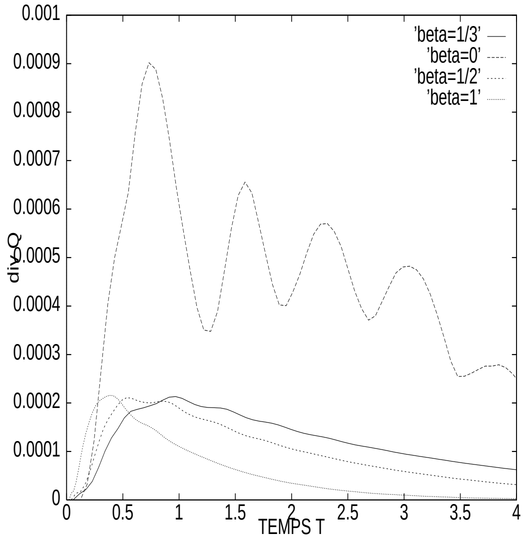


FIG. 5.21.b : *Maillage en triangles*

FIG. 5.21 – *Influence du paramètre de décentrage β*

espace (en l'absence des termes de viscosité).

En présence de charges

On considère la formulation (MV) du système de Maxwell sur un domaine $\Omega =]0,1[^2$. On suppose qu'à l'instant initial le champ électromagnétique est nul et que la frontière $\Gamma = \partial\Omega$ est parfaitement conductrice : $n \times \mathbf{E} = 0$ sur Γ.
On se donne une densité de charges et de courants:

$$\begin{cases} \rho(t,x,y) = \sin(t)(\sin(\pi y) + \sin(\pi x)) \\ j_x(t,x,y) = (\cos(t) - 1)(\pi\cos(\pi x) + \pi^2 x \sin(\pi y)) - x\cos(t)\sin(\pi y) \\ j_y(t,x,y) = (\cos(t) - 1)(\pi\cos(\pi y) + \pi^2 y \sin(\pi x)) - y\cos(t)\sin(\pi x) \end{cases}$$

Pour de telles données, la solution exacte de la formuation (MV) des équations de Maxwell est donnée par:

$$\mathbf{E} = \sin(t)\begin{pmatrix} x\sin(\pi y) \\ y\sin(\pi x) \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = (cos(t) - 1)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \pi y\cos(\pi x) - \pi x\cos(\pi y) \end{pmatrix}$$

On considère ici le schéma à l'ordre trois pour un maillage en triangles du domaine de calcul Ω. On représente sur les figures 5.22.a et 5.22.b, $\| \, div\mathbf{E}_h - \rho \, \|_{L^1(\Omega)}$ et $\| \, \mathbf{E} - \mathbf{E_h} \, \|_{L^1(\Omega)}$ en fonction du temps, pour différentes valeurs du pas de discrétisation $h = \Delta x = \Delta y$ et pour une valeur fixée du paramètre de viscosité α.
On remarque que l'utilisation de maillages fins diminue notablement l'erreur sur le

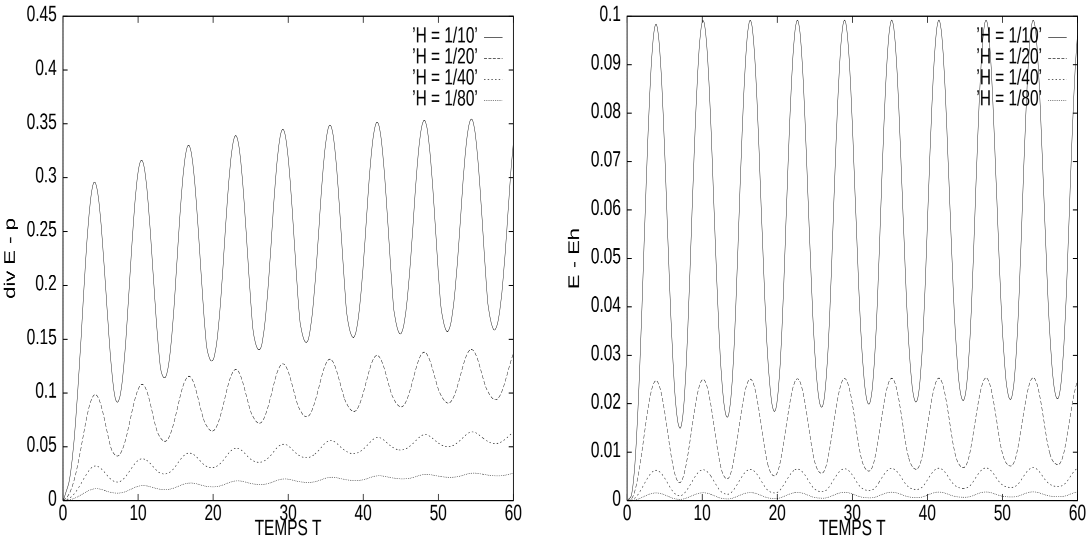


FIG. 5.22.a : *div*$\mathbf{E} - \rho$ *en fonction de h* FIG. 5.22.b : $\mathbf{E} - \mathbf{E}_h$ *en fonction de h*

FIG. 5.22 – *Influence du pas de maillage h*

champ électromagnétique, de même la relation de divergence $div\mathbf{E} - \rho = 0$ est mieux vérifiée.

On représente maintenant, dans le cas d'un maillage en triangles pour le schéma à l'ordre trois, sur la figure 5.23.a $\| div\mathbf{E_h} - \rho \|_{L^1(\Omega)}$ en fonction du temps à $h = \Delta x = \Delta y$ fixé pour différentes valeurs du paramètre α. Sur la figure 5.23.b, on représente $\| div\mathbf{E_h} - \rho \|_{L^1(\Omega)}$ en fonction du temps pour, $h = \dfrac{1}{40}$ avec la valeur optimale α_{opt} du paramètre α, et pour $h = \dfrac{1}{80}$ avec $\alpha = \infty$.
Comme en l'absence de charges, on note que lorsque la valeur du paramètre α di-

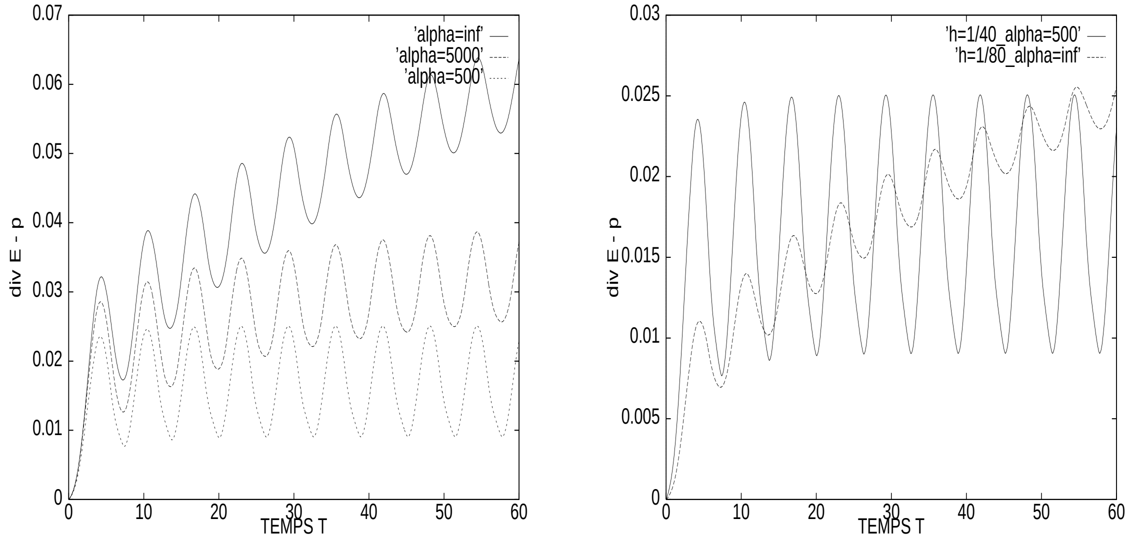


FIG. 5.23.a : $div\mathbf{E} - \rho$ *en fonction de* α FIG. 5.23.b : $div\mathbf{E} - \rho$ *en fonction de* α *eth*

FIG. 5.23 – *Influence de* α *et* h *sur* $div\mathbf{E} - \rho$

minue, ce qui correspond à une influence plus importante des termes de viscosité, la relation de divergence $div\mathbf{E} - \rho = 0$ est mieux vérifiée. On remarque sur la figure 5.23.b que l'erreur sur $div\mathbf{E_h} - \rho$ est du même ordre pour un maillage donné en utilisant la formulation (MV) du système de Maxwell que pour un maillage deux fois plus fin en résolvant le système de Maxwell $(\alpha = \infty)$.
On compare maintenant sur la figure 5.24 $\| div\mathbf{E_h} - \rho \|_{L^1(\Omega)}$ pour les schémas à l'ordre un et trois, à $h = \Delta x = \Delta y$ fixé et pour une valeur fixée du paramètre α.
On remarque que la précision du schéma a une très forte influence sur la relation de divergence $div\mathbf{E} - \rho$. Il est donc très intéressant d'utiliser un schéma précis à l'ordre trois.

Temps de calcul

Il est intéressant d'évaluer le coût, en terme de temps calcul et de stockage, qu'entraîne l'introduction d'un terme de viscosité dans les équations de Maxwell.
La résolution numérique de la formulation (MV) des équations de Maxwell nécessite environ 7% de temps calcul supplémentaire par rapport à la résolution du système de Maxwell classique. Le surcoût en terme d'occupation mémoire est d'environ 4%. On peut donc, au vu de ces chiffres, conclure que la méthode de viscosité proposée permet

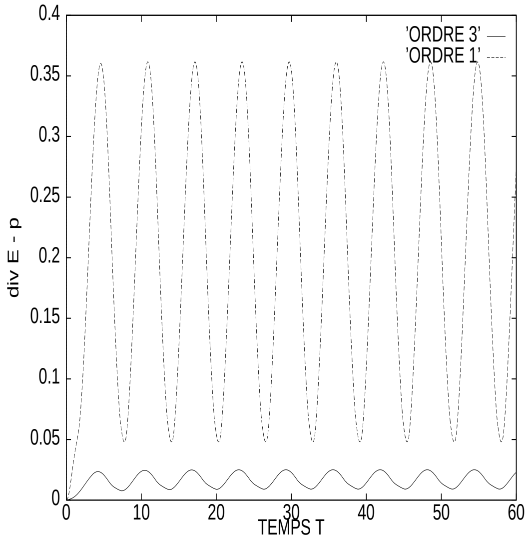


FIG. 5.24 – *Comparaison ordre un - ordre trois*

de prendre en compte les contraintes de divergence pour le champ électromagnétique à un coût raisonnable.

Chapitre 6

Résultats numériques

Le but de ce chapitre est de valider la méthode proposée pour résoudre les équations de Vlasov-Maxwell.
Dans un premier temps, nous considèrerons le système de Maxwell en l'absence de charges et nous présenterons des calculs de résonance et de SER. Puis nous nous intéresserons à l'équation de Vlasov et nous testerons plus particulièrement l'algorithme de recherche de particules. Enfin, nous présenterons un vrai cas test Vlasov-Maxwell.

6.1 Equations de Maxwell

Nous présentons des calculs de fréquences propres dans des cavités carrée et cubique et des calculs de diffraction autour d'objets métalliques de formes diverses : cylindre et profils d'aile de type NACA0012 et BINACA. Ces derniers cas ont par ailleurs été proposés lors d'un récent atelier de travail consacré au sujet [31]. Nous terminons par un calcul instationnaire de diffraction par un cylindre de section carrée.

6.1.1 Calcul de résonance

Nous étudions ici une cavité résonante carrée en deux et trois dimensions d'espace.

Cas bidimensionnel

On initialise dans une cavité carrée les composantes du champ électromagnétique par une combinaison linéaire d'ondes sinusoidales de diverses fréquences. Une transformation de Fourier est réalisée sur environ 2000 pas de temps pour obtenir le spectre de B_z en un point de la cavité. Un certain nombre d'itérations (une centaine) est cependant nécessaire avant d'atteindre le régime périodique. Le mode fondamental est discétisé avec environ 30 points par longueur d'onde. Nous représentons sur la figure 6.1 le champ B_z en fonction de la fréquence en GHz. Nous observons que les quatre premières fréquences sont bien capturées.

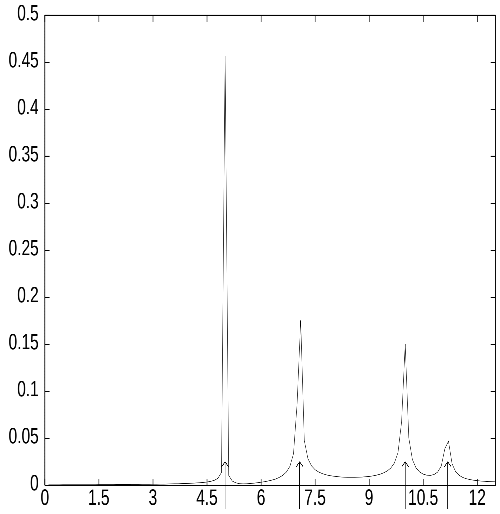


FIG. 6.1 – *Spectre de* B_z

Cas tridimensionnel

Nous initialisons le champ électromagnétique par une gaussienne centrée en un point de la cavité. Le paramètre de décentrage β a été choisi égal à 0.02, le schéma devient ainsi de type centré avec un petit taux de diffusion pour assurer la stabilité. Nous avons pris un nombre de Courant (CFL) égal à 0.75. Nous avons utilisé deux maillages, un relativement grossier à 6859 noeuds et un plus fin à 24839 noeuds. Le nombre d'itérations nécessaire est d'environ 2000 pour le maillage grossier et de 4000 pour le maillage fin. Nous avons reporté sur la figure 6.2.a le spectre de B_z en fonction de la fréquence pour le maillage fin, les flèches représentant les fréquences propres exactes de la cavité. Les trois premiers modes sont particulièrement bien représentés. Les autres modes sont également obtenus en dépit d'un léger déphasage. Nous avons reporté sur la figure 6.2.b le spectre de B_z obtenu pour les deux maillages précédents afin de montrer le gain de précision obtenu en utilisant le maillage fin.

6.1.2 Cylindre revêtu

Nous présentons un calcul de SER pour un cylindre métallique revêtu avec une couche de diélectrique d'épaisseur $(a_1 - a_0)$, a_0 étant le rayon du cylindre. Cette expérience est intéressante parce qu'elle permet de tester la méthode dans le cas hétérogène. De plus, la possibilité de comparer avec une solution exacte permet d'évaluer quantitativement la précision de la méthode. Le cylindre est éclairé par une onde harmonique **TE** telle que $ka_0 = 10$ et $ka_1 = 11$ où k est le nombre d'onde. Les valeurs de la permittivité du milieu et de la perméabilité magnétique sont respectivement $\varepsilon = 2.56$ et $\mu = 1$ dans la partie revêtue. Le maillage utilisé (figure 6.3) correspond à 12 points par longueur d'onde dans le diélectrique. La frontière artificielle est placée à environ deux longueurs d'onde de l'objet. Sur la figure 6.4, on représente la SER en dB en fonction de l'angle de vision. On peut remarquer la précision de la méthode en

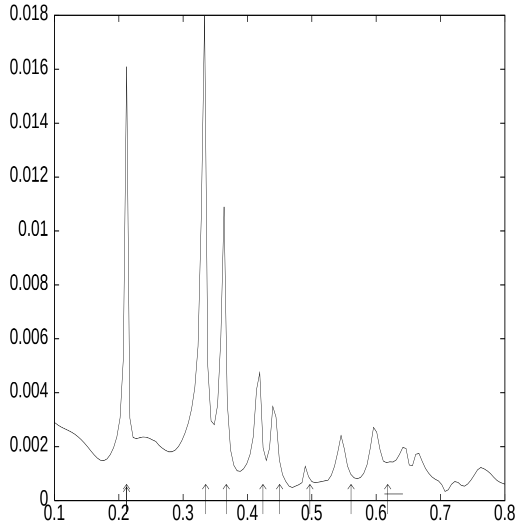


FIG 6.2.a: Spectre de B_z

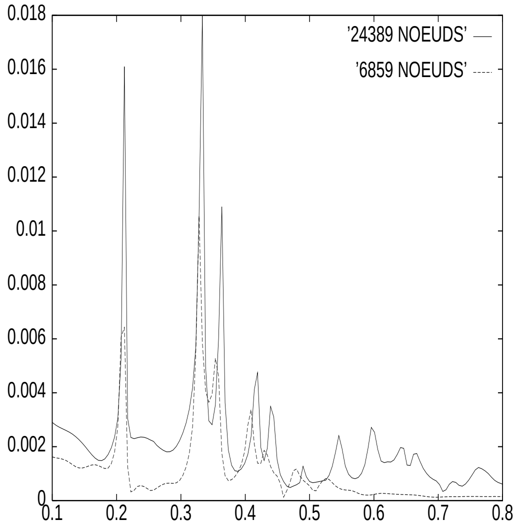


FIG 6.2.b:B_z en fonction du maillage

FIG. 6.2 – *Calcul de résonance en 3D*

comparant la solution numérique obtenue à la solution exacte.

6.1.3 Profils d'aile

Un profil d'aile métallique de type NACA0012 est éclairé par une onde harmonique TE de fréquence 1.2 GHz avec un angle d'incidence de 45^o. La longueur de l'objet est de 4 longueurs d'onde. Le nombre de points par longueur d'onde est de l'ordre de 15 au voisinage du corps. Nous présentons sur les figures 6.5.a et 6.5.b respectivement les isovaleurs du champ électrique total et diffracté. Nous avons reporté sur les figures 6.5.c et 6.5.d les SER dans les cas d'une onde TE et TM respectivement. Pour des comparaisons avec des solutions obtenues à l'aide d'une méthode intégrale nous renvoyons le lecteur intéressé à [8].
Nous avons effectué le même type d'expérience avec un BINACA pour une onde incidente TM. Les résultats obtenus sont reportés sur les figures 6.6.

6.1.4 Cylindre de section carrée

Nous simulons la diffraction d'un pulse (onde à support compact) sur un cylindre métallique de section carrée. Plus précisément l'onde incidente continue est représentée par la donnée d'un champ électrique E égal à une onde harmonique TM sur une demi longueur d'onde et nul ailleurs. L'onde incidente vient du côté droit du cylindre. La figure 6.7 représente l'évolution temporelle du champ électrique total E_z. On remarque le bon comportement de la solution en champ total. On distingue également très bien l'onde diffractée sur la partie droite du cylindre, de plus aucune détérioration de la solution n'apparait dans les coins de la section carrée du cylindre.

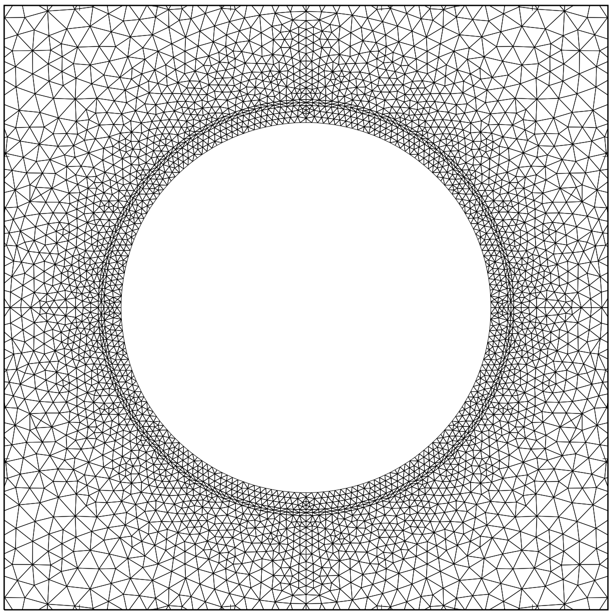


FIG. 6.3 – *Vue partielle du maillage*

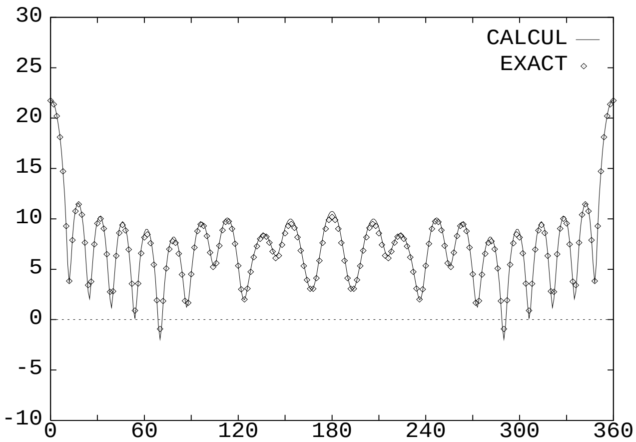


FIG. 6.4 – *TE cas revêtu*

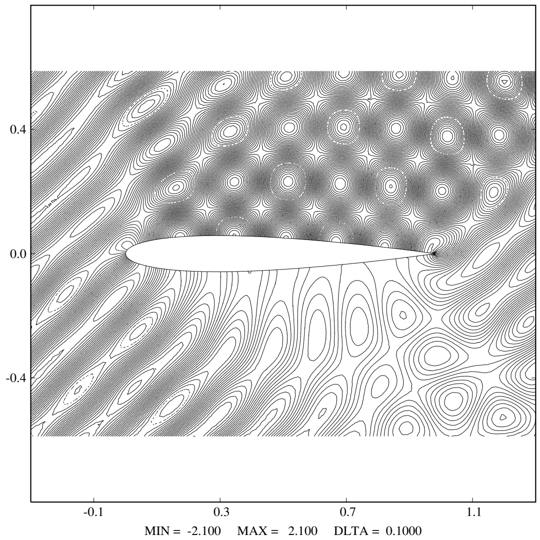


FIG 6.5.a: Champ électrique total

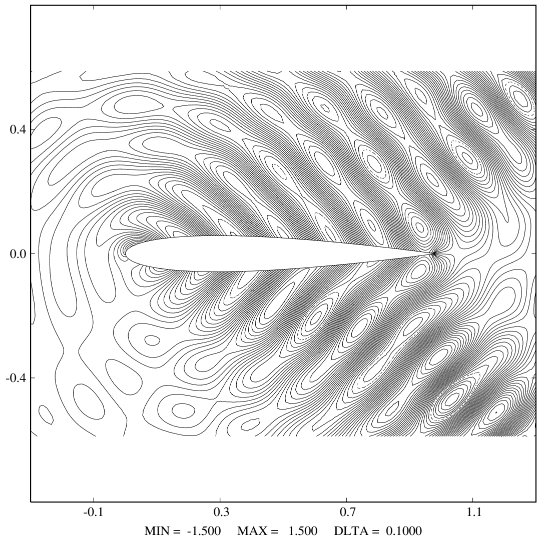


FIG 6.5.b: Champ électrique diffracté

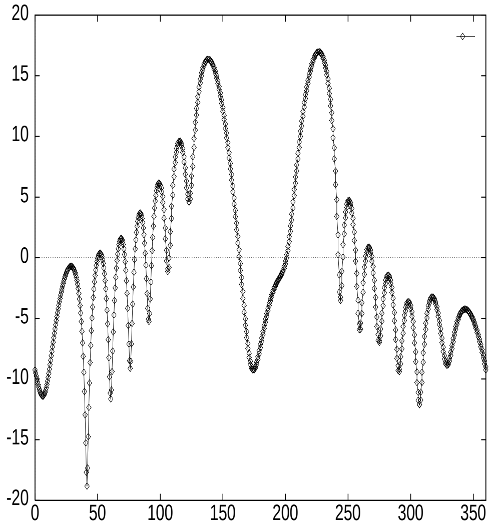


FIG 6.5.c: SER cas TE

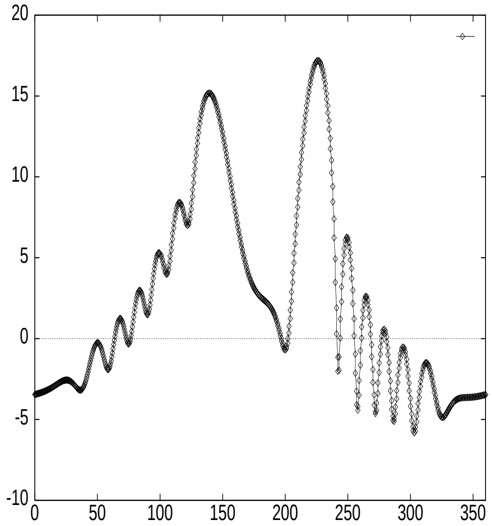


FIG 6.5.d: SER cas TM

FIG. 6.5 – *Profil d'aile de type NACA0012*

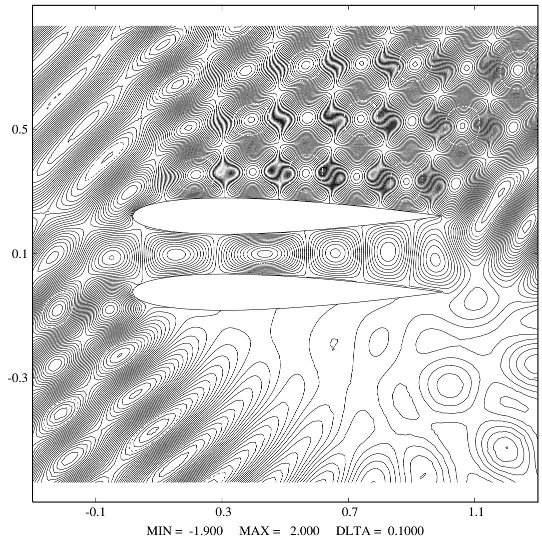


FIG 6.6.a: Champ électrique total

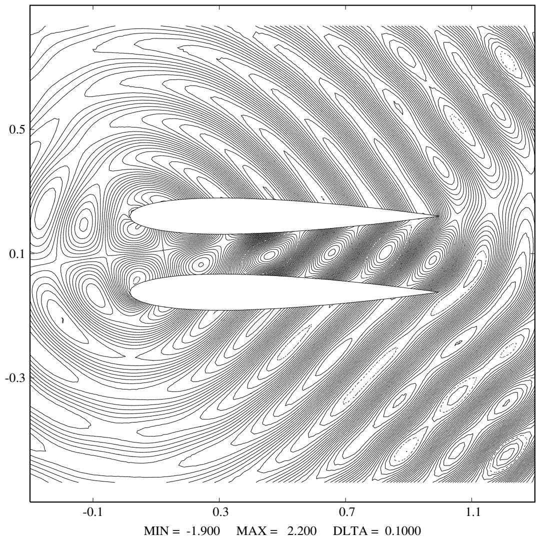


FIG 6.6.b: Champ électrique diffracté

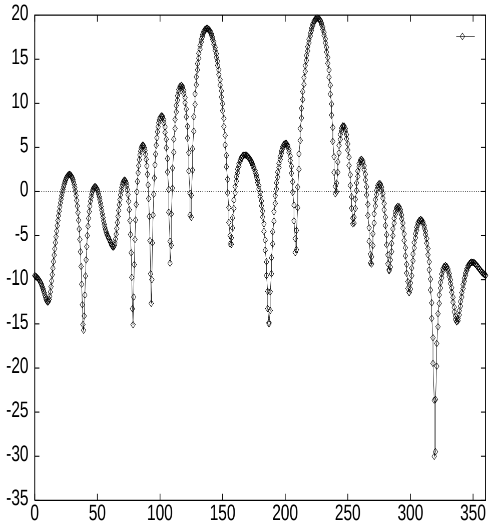


FIG 6.6.c: SER cas TE

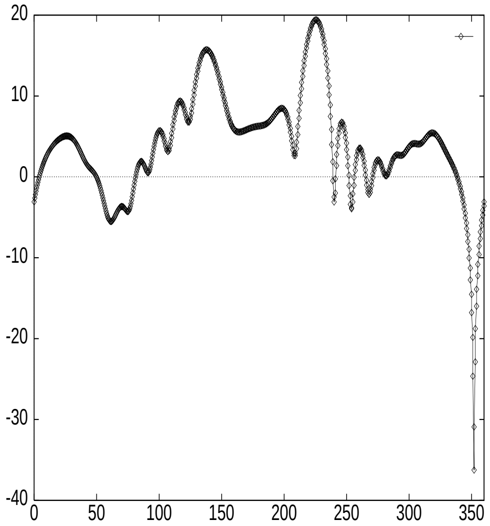


FIG 6.6.d: SER cas TM

FIG. 6.6 – *Profil d'aile de type BINACA*

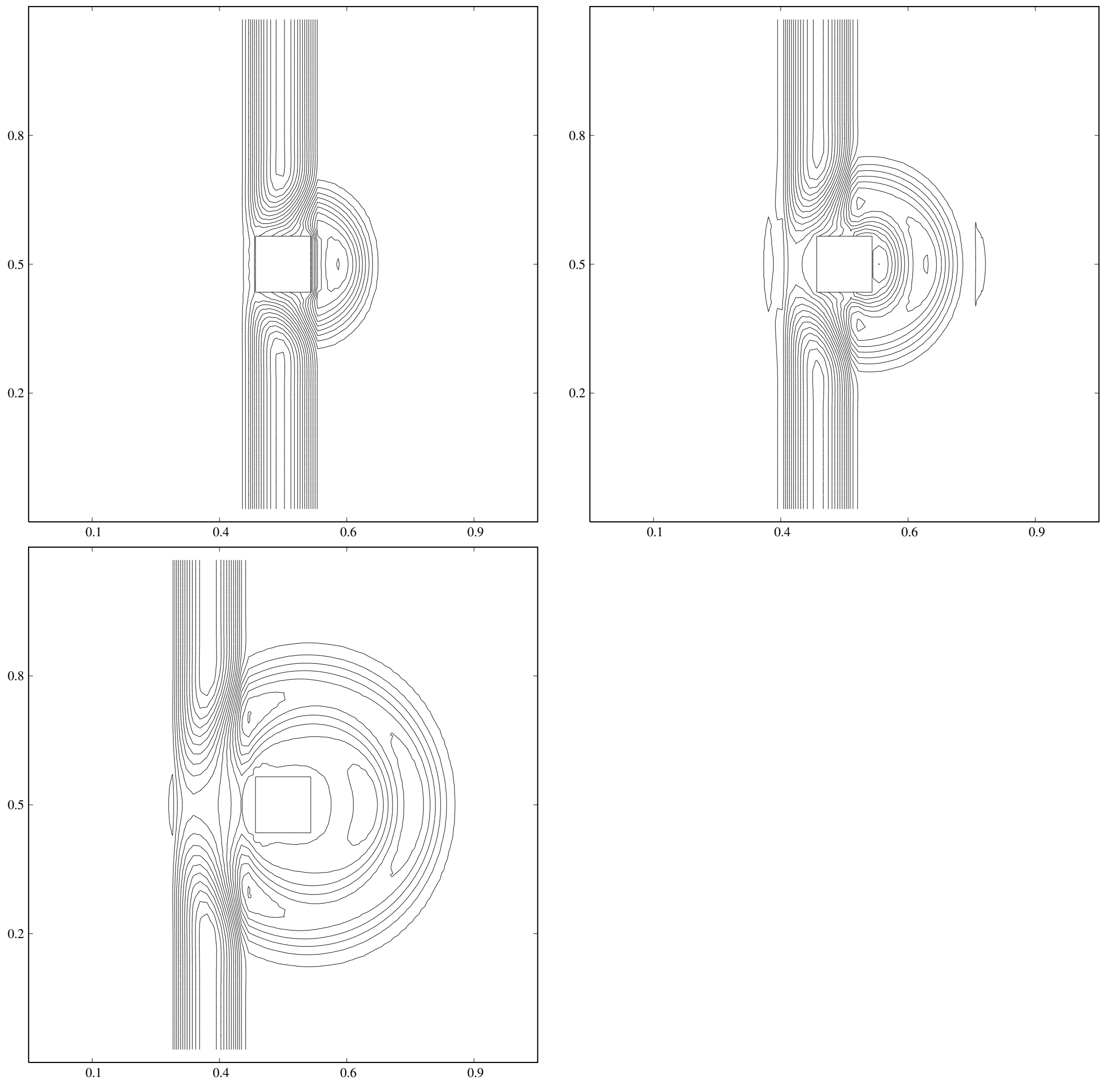


FIG. 6.7 – *Evolution temporelle du champ total E_z*

6.2 Equation de Vlasov

Le but de cette partie est de valider le solveur de l'équation de Vlasov proposé et plus particulièrement l'algorithme de recherche des particules.
Nous allons pour ce faire considérer un cyclotron. Des particules (des électrons) sont injectés avec la vitesse $\mathbf{V}_0 = (0,V_0,0)$, voir figure 6.8. Dans la région 1, les particules sont soumises à un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = (0,0,B)$, leurs trajectoires est un cercle de rayon $R = \dfrac{mV_0}{qB}$. Lorsqu'elles atteignent la région 2, elles sont alors soumises à un champ électrique $\mathbf{E} = (0,E,0)$ et le champ magnétique devient nul, les particules sont accélérées et leur trajectoire est une droite. Quand elles atteignent la région 3, elles ne sont plus soumises qu'à un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = (0,0,B)$ dont

l'intensité est déterminée de telle façon que le rayon du cercle décrit par les particules soit le même que dans la région 1. Et ainsi de suite.
On représente sur la figure 6.9 la trajectoire d'une particule, l'équation de Vlasov est résolue à l'aide du schéma “saute-mouton” (4.17) présenté précédemment.
Les résultats obtenus prouvent la valadité du schéma “saute-mouton” et de l'algo-

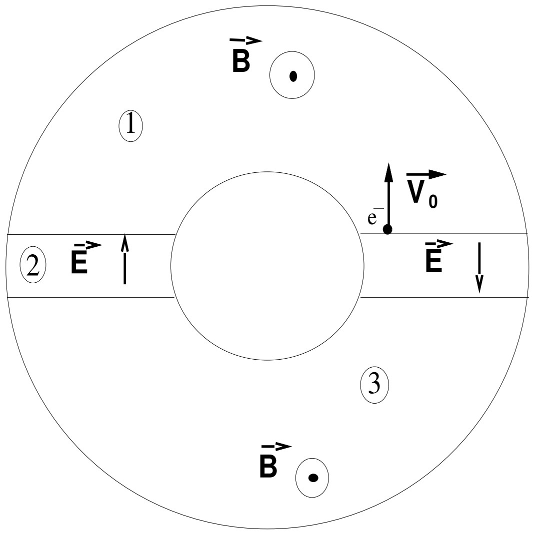


Fig. 6.8 – *Cyclotron*

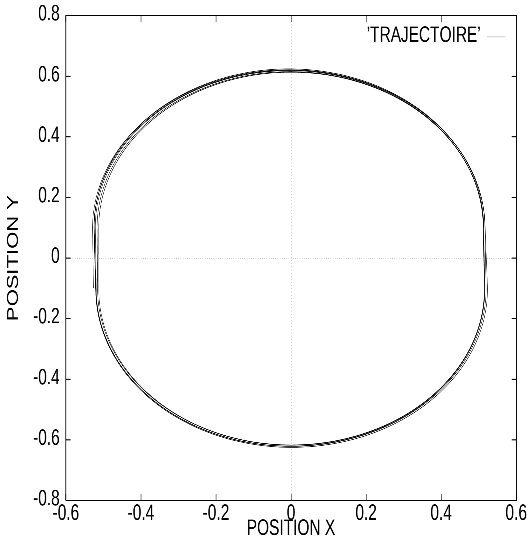


Fig. 6.9 – *Trajectoire des particules*

rithme de recherche des particules.

6.3 Simulation Vlasov-Maxwell

Une application, qui permet de tester les possibilités d'un code Vlasov-Maxwell, est le cas d'école d'un tube électronique comprenant une cavité. Cette application cor-

respond à une partie d'un dispositif plus complexe: le clystron. Le disposifit que nous considérons est représenté sur la figure 6.10.
Les électrons sont émis sur Γ_e avec une impulsion $\mathbf{p}_0$. A l'instant initial, le champélectromagnétique

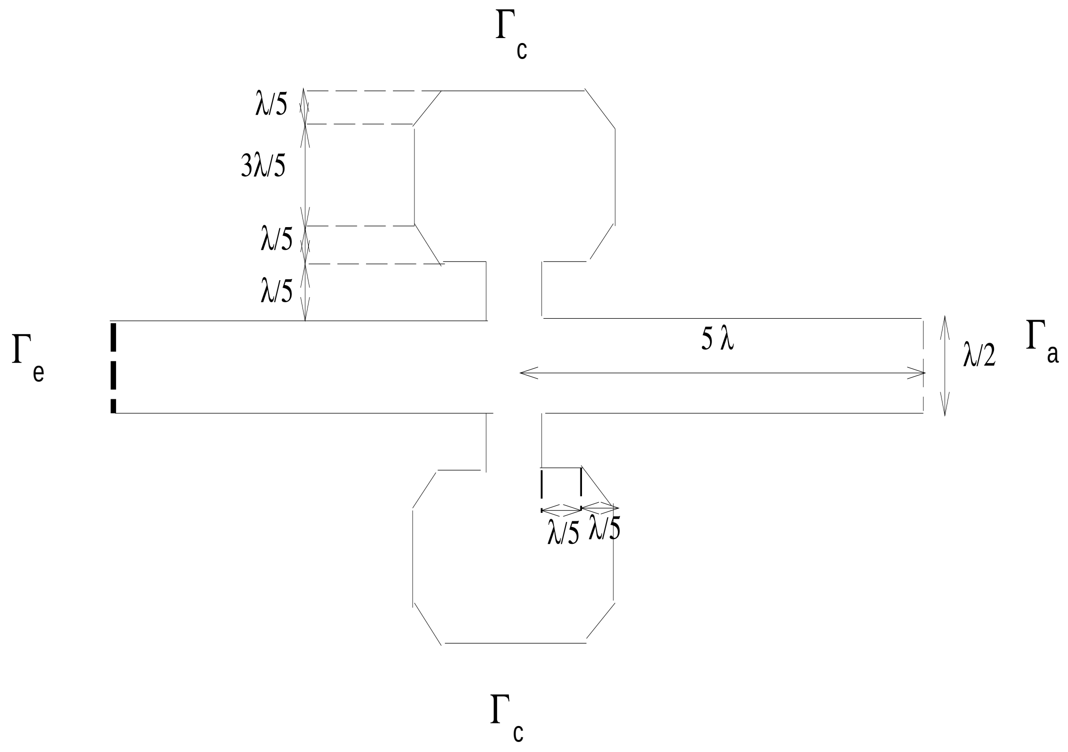


FIG. 6.10 – *Dispositif*

à l'intérieur du dispositif est nul.

Conditions aux limites

La frontière Γ du domaine de calcul Ω est divisée en trois parties: $\Gamma = \Gamma_e \cup \Gamma_a \cup \Gamma_c$. Pour l'équation de Vlasov, on impose les conditions aux limites suivantes:

$$\begin{cases} f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = g(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = \rho(t,\mathbf{x})\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}_0), \quad \mathbf{p}.\mathbf{n} < 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_e \\ f(t,\mathbf{x},\mathbf{p}) = 0, \quad \mathbf{p}.\mathbf{n} < 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_a \cup \Gamma_c \end{cases}$$

correspondant à l'émission (sur Γ_e) et l'absorption (sur $\Gamma_a \cup \Gamma_c$) des particules.
$\mathbf{n}$ est la normale unitaire sortante à Γ. La densité de charges émise sur la frontière Γ_e est donnée par: $\rho(t,\mathbf{x}) = Max(sin(2\pi Ft),0)$, où F est la fréquence fondamentale de la cavité. La valeur de F nous est donnée par un calcul préalable.
Pour le système de Maxwell, on impose les conditions aux limites suivantes:

$$\begin{cases} \mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0, \quad on\ \Gamma_c \\ (\mathbf{E} - c\mathbf{B} \times \mathbf{n}) \times \mathbf{n} = 0, \quad on\ \Gamma_a \cup \Gamma_e \end{cases}$$

correspondant respectivement à un conducteur parfait (sur γ_c) et des conditions absorbantes de type Silver-Müller (sur $\Gamma_a \cup \Gamma_e$).
Lorsque les électrons passent devant la cavité ils cèdent une partie de leur énergie cinétique sous forme d'énergie électromagnétique. Les électrons se perdent ensuite dans le collecteur de charges.
Sur la figure 6.11 nous représentons une vue partielle du maillage utilisé.
Nous représentons sur les figures suivantes les isovaleurs du champ électromagnétique

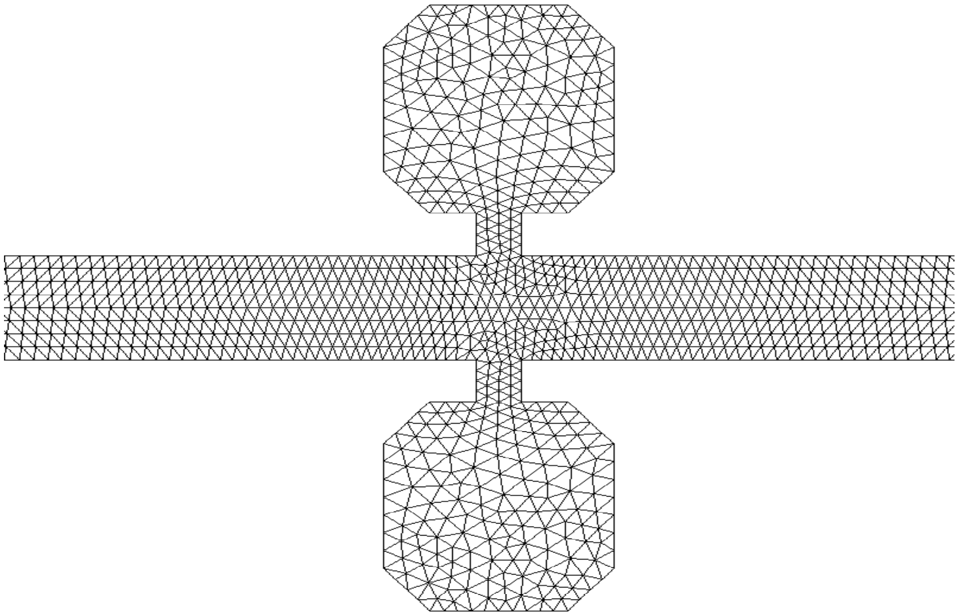


FIG. 6.11 – *Vue partielle du maillage*

(E_x,E_y,B_z), de la densité de charges ρ et de la densité de courant j_x à un instant t.

On représente sur la figure 6.17 l'évolution temporelle du champ électrique E_x en un point de la cavité.
Les résultats numériques que nous avons présentés sont en accord avec les résultats attendus au moins qualitativement puisque nous ne disposions pas de toutes les données nécessaires pour comparer précisément aux résultats obtenus dans [1]. Cette simulation permet néamoins de valider le solveur Vlasov-Maxwell présenté.

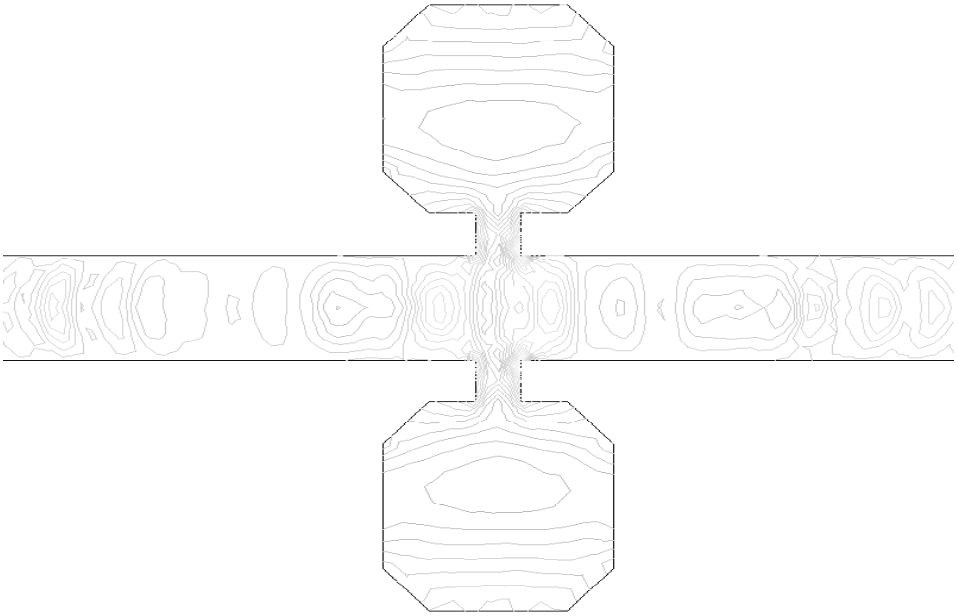


FIG. 6.12 – *Isovaleurs du champ électrique* E_x

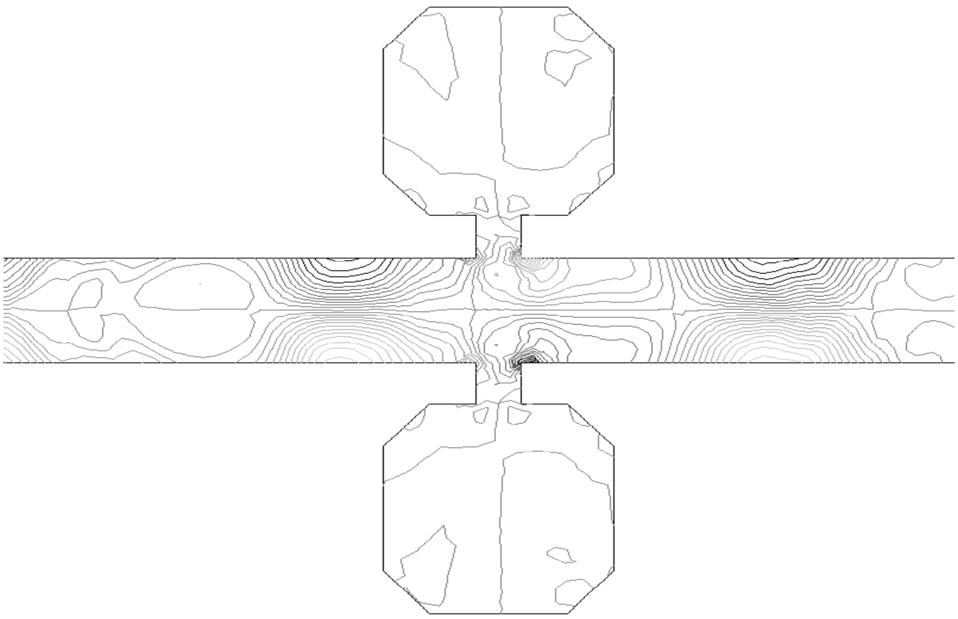


FIG. 6.13 – *Isovaleurs du champ électrique* E_y

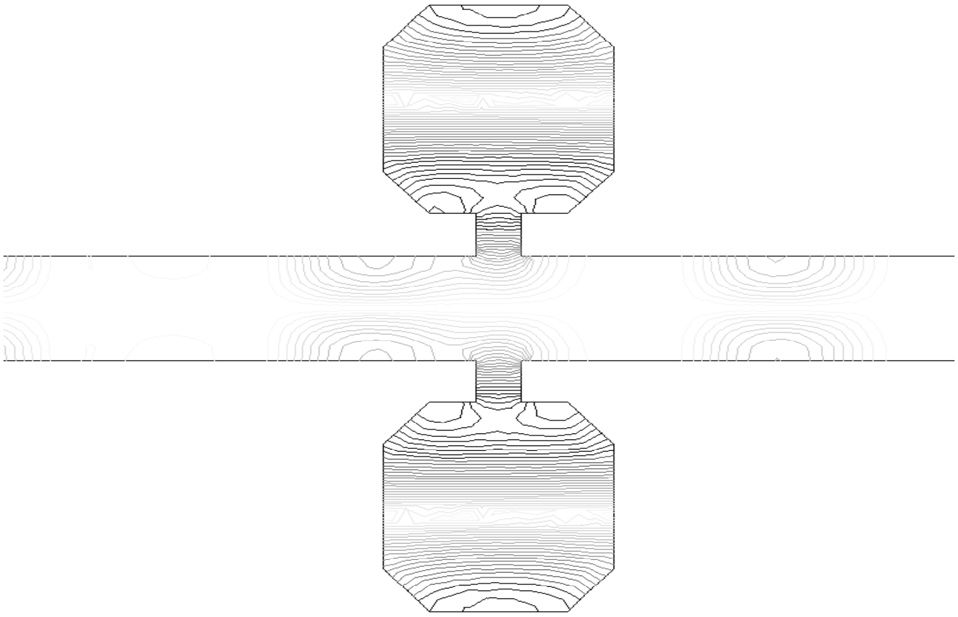


Fig. 6.14 – *Isovaleurs du champ magnétique* B_z

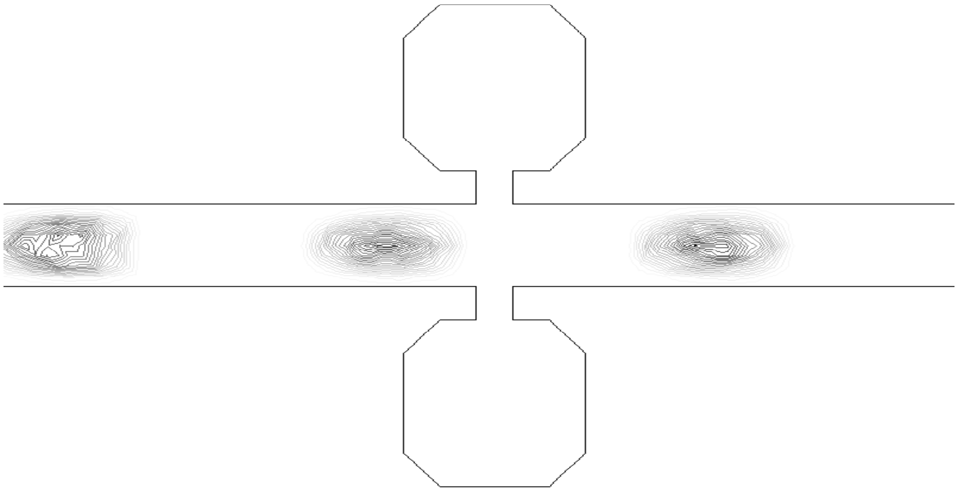


Fig. 6.15 – *Isovaleurs de la densité de charges* ρ

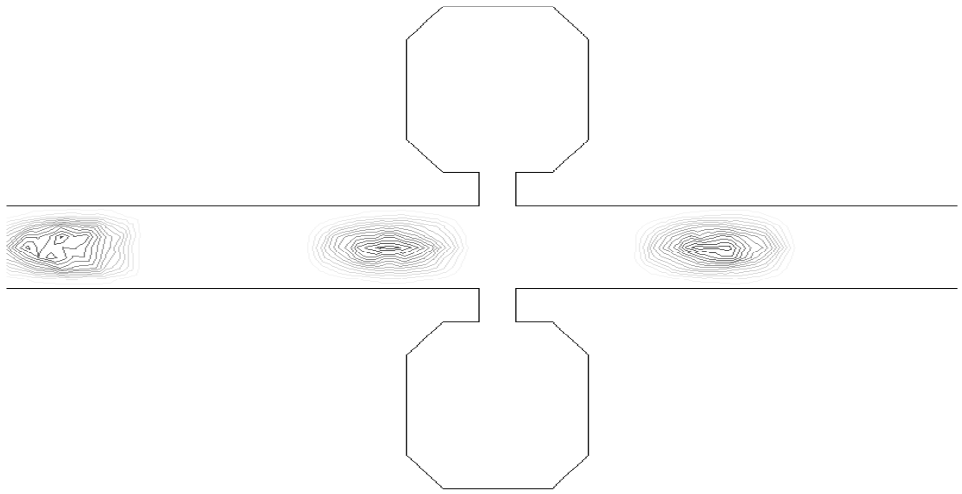


FIG. 6.16 – *Isovaleurs de la densité de courant j_x*

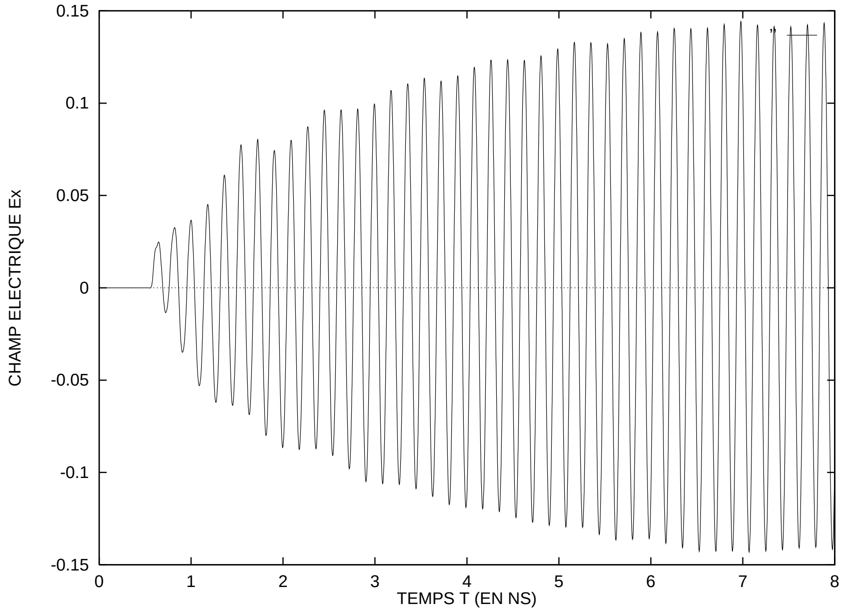


FIG. 6.17 – *Champ électrique E_x*

Chapitre 7

Conclusion

L'objectif de cette partie était la réalisation d'un code de calcul de type Vlasov-Maxwell pour simuler des phénomènes électrodynamiques. Nous avons dans un premier temps proposé une formulation mixte Eléments finis-Volumes finis pour la résolution des équations de Maxwell à partir d'algorithmes utilisés en mécanique des fluides. Nous avons validé cette méthode dans le cas bidimensionnel et tridimensionnel. De plus, ces algorithmes ont été implémentés avec succés sur des machines parallèles d'architecture diverses [8].
L'équation de Vlasov a été approchée à l'aide d'une méthode particulaire. Cependant une telle méthode ne fournit pas des densités de charge et de courant vérifiant l'équation de conservation de la charge, ce qui peut être un inconvénient majeur. Pour essayer de remédier à ce problème, nous avons proposé une nouvelle formulation des équations de Maxwell qui consiste à rajouter un terme de viscosité dans le système de Maxwell classique. De ce fait, la résolution numérique de ce nouveau système engendre un très faible surcoût, en terme de temps calcul, par rapport au système de Maxwell, contrairement aux autres méthodes qui nécessitent la résolution d'une équation de Laplace à chaque pas de temps. Nous avons montré par des résultats théoriques, équations équivalentes, et numériques pourquoi cette nouvelle formulation permettait de mieux vérifier numériquement les relations de divergence (lois de Gauss). Nous avons également montré l'influence du pas de maillage et de la précision du schéma sur les relations de divergence et que d'autre part ces relations étaient mieux vérifiées pour des maillages en rectangles par rapport à des maillages en triangles. Nous avons étudié la stabilité des schémas présentés afin de préciser le choix du coefficient de viscosité intervenant dans la nouvelle formulation du système de Maxwell. Enfin nous avons présenté un cas test Vlasov-Maxwell en deux dimensions d'espace, ce cas test correspond à une partie d'un dispositif plus complexe: le clystron. Nous avons pu ainsi valider la méthode proposée pour résoudre les équations couplées de Vlasov et de Maxwell.
De nombreux travaux restent cependant à effectuer. Tout d'abord la validation de la méthode proposée dans le cas tridimensionnel puis la parallélisation de cette méthode. En effet la résolution effective des équations de Vlasov-Maxwell est très coûteuse, en terme de temps calcul, l'utilisation de machines parallèles pourrait alors permettre de considérer des dispositifs plus complexes dont la simulation avec des ordinateurs classiques est à ce jour hors de portée. Dans cette partie, nous avons considéré l'équation de

Vlasov sans collisions. Il faudrait donc, en utilisant les techniques présentées précédemment en cinétique des gaz, étendre la méthode particulaire au cas de l'équation de Vlasov avec un terme de collision.

Bibliographie

[1] A. ADOLF, *Application des modèles Vlasov-Maxwell à la simulation des sources micro-ondes*, Ecoles CEA/EDF/INRIA, 1994.

[2] F. ASSOUS - P. DEGOND - E. HEINTZE - P.A. RAVIART - J. SEGRE, *On a finite element method for solving the three-dimensional Maxwell equations*, J. of Comp. Phys., Vol. **109**, No 2, 1993.

[3] F. ASSOUS - P. DEGOND - J. SEGRE, *A particle tracking-method for 3D electromagnetic PIC codes on unstructured meshes*, Comp. Phys. Comm., **72** pp.105-114, 1992.

[4] M. BEZARD, *Problèmes aux limites pour le système de Vlasov-Maxwell*, preprint.

[5] C.K. BIRDSALL - A.B. LANGDON, *Plasma physics via computer simulation*, Mc Graw Hill, New-York, 1985.

[6] J.P. BORIS, Proc. Fourth. Conf. Numerical Simulation of Plasmas, Naval Res. Lab., Washington D.C. p.3, 1970.

[7] R. CARPENTIER - A. de la BOURDONNAYE - B. LARROUTUROU, *On the derivation of the modified equation for the analysis of linear numerical methods*, Rapport de recherche CERMICS no.26 (1994).

[8] J.P. CIONI - L. FEZOUI - H. STEVE, *A parallel time-domain Maxwell solver using upwind schemes and triangular meshes*, IMPACT in computing in science and engeenering No 165, 1993.

[9] S. DEPEYRE, *Stability analysis for the finite volume schemes on rectangular and triangular meshes applied to the 2D Maxwell system*, to appear.

[10] S. DEPEYRE - D. ISSAUTIER, *Application aux schémas volumes finis d'une méthode de pénalisation des contraintes pour le système de Maxwell*, Rapport CERMICS, to appear.

[11] J.A. DESIDERI - A. GOUJO - V. SELMIN, *Third-order numerical schemes for hyperbolic problems*, Rapport de recherche INRIA, No.607, 1987.

[12] R.J. DIPERNA - P.L. LIONS, *Global weak solutions of Vlasov-Maxwell systems*, Com. Pure Appl. Math., **XLII** pp. 729-757, 1989.

[13] L. FEZOUI - B. STOUFFLET, *A class of implicit upwind schemes for Euler simulations with unstructured meshes*, J. of Comp. Phys., Vol. **84** pp. 174-206, 1989.

[14] GLINSKY N., *Simulation numérique d'écoulements hypersoniques réactifs hors-équilibre chimique*, Thèse de l'université de Nice-Sophia-Antipolis, 1990.

[15] Y. GUO, *Global weak solutions of the Vlasov-Maxwell system with boundary conditions*, preprint.

[16] F. HERMELINE, *Two coupled particle-finite volume methods using Delaunay-Voronoï meshes for the approximation of Vlasov-Poisson and Vlasov-Maxwell equations*, J. of Comp. Phys., Vol. **106** pp. 1-18, 1993.

[17] R.W. HOCKNEY - J.R. EASTWOOD, *Computer simulations using particles*, Mc Graw Hill, New-York, 1981.

[18] P.D. LAX - A. HARTEN - B. VAN LEER, *On upstream differencing and Godunov type schemes for hyperbolic conservation laws*, SIAM Revue, Vol 25, No 1, 1983.

[19] G. LE MEUR - F. TOUZE, in Proceedings, Mathematical and Numerical aspects of wave propagation phenomena, Strasbourg, 1991.

[20] R. LÖHNER - J. AMBROSIANO, *A finite element solver for the Maxwell equations*, paper presented at the GAMNI-SMAI Conference on Numerical Methods for the solution of Maxwell equations, Paris, 1989.

[21] D. R. LYNCH - K.D. PAULSEN, *Time-domain integration of the Maxwell equations on finite elements*, IEEE Trans. Ant. Prop., **38** pp. 1933-1942, 1990.

[22] J.C. NEDELEC, *Mixed finite elements in* $\mathbb{R}^3$, Num. Math., Vol. **35** pp. 315-341, 1980.

[23] B. PETITJEAN - R. LÖHNER, *Finite element solvers for Radar Cross-Section (RCS) calculations*, AIAA Paper 92-0455, 1992.

[24] P.A. RAVIART, *Modèles numériques en transport des particules chargées*, Ecoles CEA/EDF/INRIA, 1994.

[25] V. SHANKAR - W.F. HALL - A.H. MOHAMMADIAN, *A time differential solver for electromagnetic scattering problems*, Proceedings on the IEEE, Vol. **77**, No 5, 1989.

[26] J. STEGER - R.F. WARMING, *Flux vector splitting for the inviscid gas dynamic with applications to finite-difference methods*, J. of Comp. Phys., Vol. **40** pp. 263-293, 1981.

[27] B. VAN LEER, *Flux vector splitting for the Euler equations*, Lecture notes in physics, Vol. **170** pp. 405-512, 1982.

[28] R.F. WARMING - HYETT, *The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods*, J. Comp. Phys., Vol.**14** (2) pp.159, 1974.

[29] K. S. YEE, *Numerical solution of initial boundary value problems in isotropic media*, IEEE Trans. Ant. Prop., **14** pp. 302-307, 1966.

[30] J.L. YOUNG - F.P. BRUECKNER, *A time-domain, weighted residual formulation of Maxwell's equations*, AIAA Paper, 93-0462, 1993.

[31] 2^{nd} Int. Conf. and Workshop on *Approximations and Numerical Methods for the Solution of the Maxwell Equations*, Washington, Octobre 1993.

Annexe A

Cas de gaz polyatomiques

Nous présentons dans cette partie l'approximation numérique du modèle B.G.K. pour des gaz polyatomiques, qui s'écrit en variables adimensionnées:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f &=& \dfrac{1}{\tau}(M_p(f) - f) \\ f(0,\mathbf{x},\mathbf{v},I) &=& f^0(\mathbf{x},\mathbf{v},I) \end{array} \right. \tag{A.1}$$

avec:

$$M_p(f) = \frac{\rho}{\alpha(T)^{\frac{3}{2}+\frac{1}{\delta}}} \exp\left(-\frac{\mid \mathbf{v} - \mathbf{U} \mid^2}{2T} - \frac{I^\delta}{T}\right), \alpha = \int_{I\!R^3} \exp\left(-\frac{\mid \mathbf{v} \mid^2}{2}\right) d\mathbf{v} \int_{I\!R^+} \exp(-I^\delta)\, dI$$

Les quantités macroscopiques ρ,$(\rho\mathbf{U})$ et E sont données par:

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{U} \\ E \end{pmatrix} = \int_{I\!R^3 \times I\!R^+} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v} \\ \dfrac{\mid \mathbf{v} \mid^2}{2} + I^\delta \end{pmatrix} f\, d\mathbf{v} dI \tag{A.2}$$

Nous allons commencer par reformuler l'équation (A.1). En intégrant l'équation (A.1) par rapport à I et en notant: $g = \displaystyle\int_{I\!R^+} f\, dI$ et $M = \displaystyle\int_{I\!R^+} M_p\, dI$, on obtient:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} g = \dfrac{1}{\tau}(M - g) \\ g(0,\mathbf{x},\mathbf{v}) = g^0(\mathbf{x},\mathbf{v}) = \displaystyle\int_{I\!R^+} f^0(\mathbf{x},\mathbf{v},I)\, dI \end{array} \right. \tag{A.3}$$

avec:

$$M = \int_{I\!R^+} M_p\, dI = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\mid \mathbf{v} - \mathbf{U} \mid^2}{2T}\right) \tag{A.4}$$

De même en multipliant (A.1) par I^δ et en intégrant par rapport à I on obtient, en notant $h = \displaystyle\int_{I\!R^+} I^\delta f\, dI$ et $\bar{M} = \displaystyle\int_{I\!R^+} I^\delta M_p\, dI$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} h = \dfrac{1}{\tau}(\bar{M} - h) \\ h(0,\mathbf{x},\mathbf{v}) = h^0(\mathbf{x},\mathbf{v}) = \displaystyle\int_{I\!R^+} I^\delta f^0(\mathbf{x},\mathbf{v},I)\, dI \end{array} \right. \tag{A.5}$$

avec:

$$\bar{M} = \int_{I\!R+} I^{\delta} M_p \, dI = \frac{T}{\delta} \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{3}{2}}} \exp(-\frac{|\,\mathbf{v}-\mathbf{U}\,|^2}{2T}) \tag{A.6}$$

Les quantités macroscopiques ρ,$(\rho\mathbf{U})$ et E sont alors données par:

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{U} \\ E \end{pmatrix} = \int_{I\!R^3} \begin{pmatrix} g \\ \mathbf{v}g \\ \dfrac{|\,\mathbf{v}\,|^2}{2} g + h \end{pmatrix} d\mathbf{v} \tag{A.7}$$

Nous allons maintenant définir l'approximation numérique du problème (A.3,A.5). Etant donné les distributions initiales g^0 et h^0 sur un ensemble de points $(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0)_{i\in I\subset Z^6}$ de l'espace des phases, on cherche $g_i(t)$,$h_i(t)$,$\mathbf{x}_i(t)$ et $\mathbf{v}_i(t)$ de telle façon que les mesures:

$$\begin{cases} g_h = \displaystyle\sum_{i\in I} w_i g_i(t)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t)) \\ h_h = \displaystyle\sum_{i\in I} w_i h_i(t)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t))\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_i(t)) \end{cases} \tag{A.8}$$

soient des approximations de g et h au sens des mesures; w_i représente le poids positif de la particule d'indice i.

Pour chaque particule indicée i, $\mathbf{x}_i(t)$ et $\mathbf{v}_i(t)$ sont solutions du système différentiel suivant:

$$\begin{cases} \dfrac{d\,\mathbf{x}_i}{d\,t}(t) = \mathbf{v}_i \quad , \mathbf{x}_i(0) = \mathbf{x}_i^0 \quad , \\ \dfrac{d\,\mathbf{v}_i}{d\,t}(t) = 0 \quad\quad , \mathbf{v}_i(0) = \mathbf{v}_i^0 \quad . \end{cases} \tag{A.9}$$

Il nous faut maintenant définir une approximation des quantités macroscopiques qui définissent M et $\bar{M}$, voir (A.4) et (A.6). Pour ce faire on utilise le même genre d'approximations que dans le cas monoatomique et on obtient ainsi:

$$\begin{pmatrix} \rho_h^{\epsilon}(t,\mathbf{x}) \\ (\rho\mathbf{U})_h^{\epsilon}(t,\mathbf{x}) \\ E_h^{\epsilon}(t,\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \sum_{i\in I} w_i \begin{pmatrix} g_i(t) \\ \mathbf{v}_i\, g_i(t) \\ \dfrac{|\,\mathbf{v}_i\,|^2}{2} g_i(t) + h_i(t) \end{pmatrix} \zeta_{\epsilon}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i(t)) \tag{A.10}$$

On peut ainsi déterminer $M_i(t)$ et $\bar{M}_i(t)$ et par suite le système différentiel vérifié par les fonctions $g_i(t)$ et $h_i(t)$:

$$\begin{cases} \dfrac{d\,g_i}{dt}(t) = \dfrac{1}{\tau}(M_i(t) - g_i(t)) \quad g_i(0) = g^0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \\ \dfrac{d\,h_i}{dt}(t) = \dfrac{1}{\tau}(\bar{M}_i(t) - h_i(t)) \quad h_i(0) = h^0(\mathbf{x}_i^0,\mathbf{v}_i^0) \end{cases} \tag{A.11}$$

Pour l'intégration en temps du système (A.11) on utilise les mêmes schémas que dans le cas monoatomique.

Résumé

Le but de cette thèse a consisté à étudier numériquement et théoriquement des méthodes particulaires déterministes appliquées tout d'abord à la cinétique des gaz puis au transport de charges dans des champs électromagnétiques.
On s'est intéressé, dans un premier temps, au modèle B.G.K. pour l'équation de Boltzmann de la dynamique des gaz que nous avons résolue à l'aide d'une méthode particulaire. Ce travail a consisté tout d'abord en l'analyse mathématique du modèle B.G.K., ce qui nous a permis de développer une analyse théorique complète de la convergence de la méthode.
Dans un second temps, nous avons implémenté cette méthode sur des machines d'architecture diverses (vectorielle et parallèle). On présente également des solutions numériques d'écoulements raréfiés en deux dimensions d'espace.
La deuxième partie a consisté à utiliser les méthodes développées pour simuler l'évolution de particules relativistes soumises à des champs électromagnétiques. Le modèle physique utilisé est le système de Vlasov-Maxwell. Les équations de Maxwell sont résolues ici à l'aide d'une méthode de volumes finis et l'équation de Vlasov à l'aide d'une méthode particulaire.
On présente ensuite une nouvelle formulation des équations de Maxwell afin de mieux vérifier, au niveau discret, les relations de divergence pour le champ électromagnétique. On montrera, en établissant les équations équivalentes, pourquoi ces relations sont mieux vérifiées en considérant cette nouvelle formulation. On a également étudié la stabilité des schémas présentés. Enfin des simulations numériques, en deux et trois dimensions d'espace, sont présentées afin de valider la méthode.

Mots clés: Théorie cinétique des gaz - Méthodes particulaires - Modèle B.G.K. - Calcul parallèle - Equations de Vlasov-Maxwell - Volumes finis - Schémas décentrés