

Chapter 3

Approximation numérique

On considère le système de Vlasov-Poisson d'inconnues $f : [0, T] \times [0, 1]_{per} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$, $E : [0, T] \times [0, 1]_{per} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \partial_t f + v \partial_x f - E(t, x) \partial_v f = 0 \text{ dans } (0, T) \times [0, 1]_{per} \times \mathbb{R}, \\ \partial_x E = 1 - \int_{\mathbb{R}} f dv \text{ dans } (0, T) \times [0, 1]_{per} \\ \int_{[0, 1]_{per}} E dx = 0 \text{ dans } (0, T), \\ f(t = 0, x, v) = f_0(x, v). \end{cases} \quad (3.1)$$

On s'intéresse à sa discrétisation en espace, en vitesse et en temps.

On peut évidemment utiliser des méthodes classiques de résolution d'EDP, comme des méthodes de type différences finies (1d en espace + 1d en vitesse), associées à une discrétisation en temps de type Euler ou Runge-Kutta, en considérant des approximations $f_{ij}^n \approx f(t^n, x_i, v_j)$ et $E_i^n \approx E(t^n, x_i)$ et en discrétisant les dérivées partielles. D'autres méthodes, plus efficaces sur ce problème, ont été développées, comme par exemple les méthodes particulières (Particle-In-Cell ou PIC) ou les méthodes semi-Lagrangiennes.

Les méthodes semi-Lagrangiennes utilisent la notion de courbe caractéristique et les techniques d'interpolation. Elles sont bien adaptées à la résolution numérique de l'équation de Vlasov 1dx+1dv ou 2dx+2dv. Comme les autres méthodes sur grille, elles deviennent cependant très coûteuses en 3dx+3dv. Dans ce cas, on préfère souvent utiliser des méthodes PIC, qui approchent f par un ensemble de $N \in \mathbb{N}$ particules numériques dont les positions x_k et les vitesses v_k évoluent en temps grâce aux équations du mouvement $\frac{dx_k}{dt} = v_k$ et $\frac{dv_k}{dt} = -E(x_k)$.

3.1 Principe des méthodes semi-Lagrangiennes

On considère tout d'abord une équation de transport à vitesse constante $v \neq 0$

$$\begin{aligned} \partial_t f + v \partial_x f &= 0, & x \in \mathbb{R}, t > 0, \\ f(0, x) &= f_0(x), & x \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Nous cherchons à exprimer $f(t, x) \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0$.

On utilise la méthode des caractéristiques et le théorème suivant.

Theorem 3.1.1. *Si $f_0 \in C^1(\mathbb{R})$, alors le problème (3.2) admet une unique solution $f(t, x) \in C^1(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R})$ donnée par $f(t, x) = f_0(x - vt) \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0$.*

Si $f(t, x)$ est définie sur un sous-domaine $x \in I \subset \mathbb{R}$, il faut ajouter des conditions aux bords.

Nous allons introduire la méthode semi-Lagrangienne sur l'exemple simple du transport à vitesse constante (3.2). On considère un maillage en espace $x_i = i\Delta x, i \in \mathbb{Z}$ et des instants $t^n = n\Delta t, n \in \mathbb{N}$. On approche $f(t^n, x_i)$ par f_i^n .

Initialisation. On pose $f_i^0 = f_0(x_i)$. On pourrait aussi poser $f_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f_0(x) dx$.

Avancée en temps. À n fixé, on suppose connus $f_i^n, \forall i$. L'avancée en temps se fait en deux étapes.

1. On exprime f_i^{n+1} en remontant les caractéristiques sur un pas de temps Δt :

$$f_i^{n+1} = f(t^n, x_i - v\Delta t).$$

2. La quantité $f(t^n, x_i - v\Delta t)$ n'est pas connue mais on l'approche par une interpolation utilisant les valeurs connues f_i^n . Dans le cas d'une interpolation linéaire, on obtient

$$f_i^{n+1} \approx (1 - \alpha)f_{i-p}^n + \alpha f_{i-p-1}^n$$

où $p \in \mathbb{Z}$ est tel que

$$x_{i-p-1} \leq x_i - v\Delta t \leq x_{i-p} \Leftrightarrow (i-p-1)\Delta x \leq i\Delta x - v\Delta t \leq (i-p)\Delta x \Leftrightarrow p = \left\lceil \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right\rceil$$

et $\alpha \in [0, 1]$ est donné par

$$\alpha = \frac{x_{i-p} - (x_i - v\Delta t)}{\Delta x} = \frac{(i-p)\Delta x - i\Delta x + v\Delta t}{\Delta x} = \frac{v\Delta t}{\Delta x} - \left\lceil \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right\rceil.$$

On remarque que $p \geq 0$ si $v > 0$ et $p < 0$ si $v < 0$.

Remark 2. En pratique, on restreint l'espace \mathbb{R} en utilisant la périodicité et on considère $x \in [0, 1]$. C'est-à-dire au niveau discret $i = 0, \dots, N_x$ avec $\Delta x = \frac{1}{N_x}$. On utilise les conditions aux bords quand c'est nécessaire.

Theorem 3.1.2. *Soit $T > 0$ un temps final donné. Soit f à support compact (en temps et espace) et de classe $W^{2,\infty}$. Alors l'erreur numérique associée au schéma précédent, commise à l'étape n telle que $n\Delta t \leq T$, est majorée par*

$$\|f^n - f(t^n, \cdot)\|_\infty \leq C \min\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}, |v|\right) \Delta x$$

avec une constante C qui dépend de T et de la condition initiale.

Proof. On note, $\forall n$ tel que $n\Delta t \leq T$, $\|f^n - f(t^n, \cdot)\|_\infty = \max_i |f_i^n - f(t^n, x_i)|$.

On définit l'erreur numérique à l'instant t^n au point x_i par

$$e_i^n = f(t^n, x_i) - f_i^n.$$

On a ainsi

$$\begin{aligned} e_i^{n+1} &= f(t^{n+1}, x_i) - f_i^{n+1} \\ &= f(t^n, x_i - v\Delta t) - (1 - \alpha)f_{i-p}^n - \alpha f_{i-p-1}^n \\ &= f(t^n, x_i - v\Delta t) - (1 - \alpha)(f(t^n, x_{i-p}) - e_{i-p}^n) - \alpha(f(t^n, x_{i-p-1}) - e_{i-p-1}^n) \\ &= \mu_i^n + (1 - \alpha)e_{i-p}^n + \alpha e_{i-p-1}^n \end{aligned}$$

où on a posé $\mu_i^n = f(t^n, x_i - v\Delta t) - (1 - \alpha)f(t^n, x_{i-p}) - \alpha f(t^n, x_{i-p-1})$ l'erreur d'interpolation de $f(t^n, x_i - v\Delta t)$.

Nous allons d'abord majorer μ_i^n . À i et n fixés, on peut réécrire μ_i^n comme fonction de α :

$$\mu_i^n = h(\alpha) = f(t^n, x_{i-p} - \alpha\Delta x) - (1 - \alpha)f(t^n, x_{i-p}) - \alpha f(t^n, x_{i-p-1}).$$

On a alors $h(0) = h(1) = 0$ et $h''(\alpha) = \Delta x^2 f''(t^n, x_{i-p} - \alpha\Delta x)$.

D'où

$$\|h''\|_{L^\infty[0,1]} \leq \Delta x^2 \|f''_0\|_{L^\infty(\mathbb{R})}.$$

Des développements de Taylor donnent l'existence de ξ_1 compris entre 0 et α et de ξ_2 compris entre α et 1 tels que

$$h(\alpha - \alpha) = h(\alpha) - \alpha h'(\alpha) + \frac{\alpha^2}{2} h''(\xi_1)$$

et

$$h(\alpha + 1 - \alpha) = h(\alpha) + (1 - \alpha)h'(\alpha) + \frac{(1 - \alpha)^2}{2} h''(\xi_2).$$

En multipliant le premier par $(1 - \alpha)$, le second par α et en sommant, on a

$$0 = h(\alpha) + \frac{(1 - \alpha)\alpha^2}{2} h''(\xi_1) + \frac{\alpha(1 - \alpha)^2}{2} h''(\xi_2).$$

On en déduit

$$|h(\alpha)| \leq \frac{1}{2}(1 - \alpha)\alpha \|h''\|_{L^\infty[0,1]} \leq \frac{1}{2}(1 - \alpha)\alpha \Delta x^2 \|f''_0\|_{L^\infty(\mathbb{R})}.$$

De plus, on peut vérifier que $\alpha(1 - \alpha) \leq \min\left(\frac{|v|\Delta t}{\Delta x}, 1\right)$, ou encore $\alpha(1 - \alpha)\Delta x \leq \min(|v|\Delta t, \Delta x)$.

- En effet, $0 \leq \alpha < 1$ implique $\alpha(1 - \alpha) \leq 1$.
- Par ailleurs, si $v > 0$, alors $\alpha = \frac{v\Delta t}{\Delta x} - \left[\frac{v\Delta t}{\Delta x}\right] \leq \frac{v\Delta t}{\Delta x}$ et $(1 - \alpha) \leq 1$ implique $\alpha(1 - \alpha) \leq \frac{v\Delta t}{\Delta x}$.

- Et si $v < 0$, alors $1 - \alpha = 1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} + \left\lceil \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right\rceil = 1 + \frac{-v\Delta t}{\Delta x} - \left\lceil \frac{-v\Delta t}{\Delta x} \right\rceil - 1 = \frac{|v|\Delta t}{\Delta x} - \left\lceil \frac{|v|\Delta t}{\Delta x} \right\rceil \leq \frac{|v|\Delta t}{\Delta x}$ et $\alpha < 1$, ce qui implique $\alpha(1 - \alpha) \leq \frac{|v|\Delta t}{\Delta x}$.

D'où

$$|h(\alpha)| \leq \frac{1}{2} \min(|v|\Delta t, \Delta x) \Delta x \|f_0''\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \quad \text{ou encore} \quad \|\mu^n\|_\infty \leq \frac{1}{2} \min(|v|\Delta t, \Delta x) \Delta x \|f_0''\|_{L^\infty(\mathbb{R})}.$$

On peut revenir à l'erreur $e_i^{n+1} = \mu_i^n + (1 - \alpha)e_{i-p}^n + \alpha e_{i-p-1}^n$. Comme $0 \leq \alpha$ et $0 \leq 1 - \alpha$, on a la majoration

$$\|e^{n+1}\|_\infty \leq \|\mu^n\|_\infty + (1 - \alpha)\|e^n\|_\infty + \alpha\|e^n\|_\infty = \|\mu^n\|_\infty + \|e^n\|_\infty.$$

Comme $e^0 = 0$, on obtient

$$\|e^n\|_\infty \leq \sum_{k=0}^{n-1} \|\mu^k\|_\infty \leq n \frac{1}{2} \min(|v|\Delta t, \Delta x) \Delta x \|f_0''\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$$

que l'on peut réécrire

$$\|e^n\|_\infty \leq n\Delta t \frac{1}{2} \min\left(|v|, \frac{\Delta x}{\Delta t}\right) \Delta x \|f_0''\|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq C(T, f_0'') \min\left(|v|, \frac{\Delta x}{\Delta t}\right) \Delta x,$$

car $n\Delta t \leq T$. □

Remark 3. Ce schéma semi-Lagrangien a des propriétés intéressantes :

- il est stable indépendamment de tout critère CFL sur le pas de temps,
- avec une interpolation linéaire, l'ordre de convergence en espace est toujours au moins 1.

Par contre, la méthode est très diffusive si on utilise une interpolation linéaire. Mais on peut facilement modifier la méthode pour utiliser une interpolation d'ordre plus élevé.

3.2 Méthodes semi-Lagrangiennes pour le système de Vlasov-Poisson

Nous allons maintenant présenter la méthode semi-Lagrangienne pour l'équation de Vlasov en 1dx-1dv

$$\partial_t f + v\partial_x f - E(t, x)\partial_v f = 0.$$

Hypothèse. On peut négliger les particules qui ont une vitesse très grande en valeur absolue. Ainsi, on coupe l'intervalle en vitesse : $v \in [-V, V]$ avec $V \in \mathbb{R}^{+\star}$. On pourra par exemple prendre $V = 10$. Cette hypothèse revient à supposer que $f(t, x, V) = f(t, x, -V) = 0$. On pourra par exemple considérer des conditions aux bords de type Dirichlet homogène.

3.2.1 Discrétisation de l'équation de Vlasov

Nous pouvons maintenant mailler l'espace des phases $(x, v) \in [0, 1] \times [-V, V]$: soient $\Delta x \in \mathbb{R}^{+\star}$, $x_i = i\Delta x$, $i = 0, \dots, N_x$ avec $\Delta x = \frac{1}{N_x}$, $\Delta v \in \mathbb{R}^{+\star}$, $v_j = -V + j\Delta v$, $j = 0, \dots, N_v$ avec $\Delta v = \frac{2V}{N_v}$.

Soit $\Delta t \in \mathbb{R}^{+\star}$ un pas de temps et $t^n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$. On note f_{ij}^n une approximation de $f(t^n, x_i, v_j)$ et E_i^n une approximation de $E(t^n, x_i)$.

La généralisation directe de la méthode semi-lagrangienne consiste à écrire $f_{ij}^{n+1} = f(t^n, X(t^n), V(t^n))$ où $X(t)$ et $V(t)$ définissent la courbe caractéristique solution du système

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt}(t) = V(t), \\ \frac{dV}{dt}(t) = -E(t, X(t)), \\ X(t^{n+1}) = x_i, \\ V(t^{n+1}) = v_j. \end{cases}$$

Difficultés.

- L'origine de la courbe caractéristique est donnée par la solution de ce système non linéaire. Il faut la calculer numériquement, en remontant le temps. Cela n'est pas facile et des erreurs numériques sont commises.
- Il faut ensuite utiliser une interpolation en 2D pour écrire f_{ij}^{n+1} en fonction des f_{ij}^n .

Méthode de splitting. Une alternative très courante consiste à utiliser un splitting d'opérateur. Il s'agit de décomposer l'équation de Vlasov en deux équations et à se ramener au système

$$\begin{cases} \partial_t f + v \partial_x f = 0, \\ \partial_t f - E(t, x) \partial_v f = 0. \end{cases}$$

L'idée est alors de résoudre la première équation de transport (en espace) sur un pas de temps, puis de résoudre la seconde équation de transport (en vitesse) sur un pas de temps. Sauf cas particuliers, un tel splitting introduit une erreur en temps. Des splittings d'ordre élevé peuvent être utilisés pour réduire cette erreur.

Algorithme. On peut alors écrire un schéma semi-Lagrangien pour l'équation de Vlasov 1dx-1dv.

- **Initialisation.** On pose $f_{ij}^0 = f_0(x_i, v_j)$, $\forall i = 0, \dots, N_x$, $\forall j = 0, \dots, N_v$. On pourrait aussi utiliser la valeur moyenne de f_0 sur la maille $[x_i, x_{i+1}] \times [v_j, v_{j+1}]$.
On initialise aussi $\rho(0, x) = \int_{\mathbb{R}} f_0(x, v) dv$. On résout alors l'équation de Poisson par une méthode de notre choix pour calculer $E(0, x)$ et on pose $E_i^0 = E(0, x_i)$.
- **Avancée de t^n à t^{n+1} .** On suppose connus f_{ij}^n et $E_i^n \forall i = 0, \dots, N_x$, $\forall j = 0, \dots, N_v$.

- On calcule f_{ij}^* à partir de f_{ij}^n en résolvant l'équation

$$\partial_t f + v \partial_x f = 0$$

sur un pas de temps Δt par une méthode semi-Lagrangienne. Ainsi, pour j fixé, on calcule

$$f_{ij}^* = f(t^n, x_i - v_j \Delta t, v_j)$$

en utilisant une méthode d'interpolation du type

$$f_{ij}^* = (1 - \alpha_j) f_{i-p_j, j}^n + \alpha_j f_{i-p_j-1, j}^n,$$

où $p_j = \left\lfloor \frac{v_j \Delta t}{\Delta x} \right\rfloor$ et $\alpha_j = \frac{v_j \Delta t}{\Delta x} - \left\lfloor \frac{v_j \Delta t}{\Delta x} \right\rfloor$.

- On calcule f_{ij}^{n+1} à partir de f_{ij}^* en résolvant l'équation

$$\partial_t f - E(t, x) \partial_v f = 0$$

sur un pas de temps Δt par une méthode semi-Lagrangienne. Ainsi, pour i fixé, on calcule

$$f_{ij}^{n+1} = f(t^*, x_i, v_j + E_i^n \Delta t)$$

en utilisant une méthode d'interpolation du type

$$f_{ij}^{n+1} = (1 - \alpha_i) f_{i, j-p_i}^* + \alpha_i f_{i, j-p_i-1}^*$$

où $p_i = \left\lfloor -\frac{E_i^n \Delta t}{\Delta v} \right\rfloor$ et $\alpha_i = -\frac{E_i^n \Delta t}{\Delta v} - \left\lfloor -\frac{E_i^n \Delta t}{\Delta v} \right\rfloor$.

- On calcule E_i^{n+1} en résolvant l'équation de Poisson par la méthode de son choix.

3.2.2 Erreur due au splitting

Pour analyser l'erreur commise par le splitting, on va considérer l'équation

$$\frac{du}{dt} = (A + B)u \tag{3.3}$$

où A et B sont deux opérateurs différentiels en espace ou vitesse, qu'on suppose constants entre t et $t + \Delta t$. Sur un pas de temps Δt , la solution s'écrit formellement

$$u(t + \Delta t) = \exp(\Delta t(A + B))u(t).$$

Le splitting consiste à décomposer (3.3) en

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = Au, \\ \frac{du}{dt} = Bu. \end{cases}$$

Prises séparément, les solutions de ces équations sont respectivement $u(t + \Delta t) = \exp(\Delta t A)u(t)$ et $u(t + \Delta t) = \exp(\Delta t B)u(t)$. Donc en les résolvant l'une après l'autre sur un pas de temps, la solution donnée par le splitting est

$$\tilde{u}(t + \Delta t) = \exp(\Delta t B) \exp(\Delta t A)u(t).$$

Si les opérateurs A et B commutent, alors $\exp(\Delta t B) \exp(\Delta t A) = \exp(\Delta t (A + B))$ et le splitting est exact. Sinon, on commet une erreur.

Proposition 9. *Le splitting présenté ci-dessus est d'ordre 1 en temps.*

Proof. Développons l'exponentielle. On a d'une part

$$\exp(\Delta t (A + B)) = Id + \Delta t (A + B) + \frac{\Delta t^2}{2} (A + B)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3)$$

et d'autre part

$$\exp(\Delta t B) \exp(\Delta t A) = \left(Id + \Delta t B + \frac{\Delta t^2}{2} B^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \right) \left(Id + \Delta t A + \frac{\Delta t^2}{2} A^2 + \mathcal{O}(\Delta t^3) \right)$$

$$\exp(\Delta t B) \exp(\Delta t A) = Id + \Delta t (A + B) + \frac{\Delta t^2}{2} (A^2 + B^2 + 2BA) + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Si A et B ne commutent pas, on a $(A + B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2 \neq A^2 + B^2 + 2BA$. Donc

$$\exp(\Delta t (A + B)) - \exp(\Delta t B) \exp(\Delta t A) = \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

donc l'erreur locale (sur un pas de temps) est d'ordre 2 et l'erreur globale (au temps final) est d'ordre 1. \square

On peut considérer des splittings d'ordre plus élevé. Par exemple, le splitting de Strang consiste à résoudre successivement

- $\frac{du}{dt} = Au$ sur un demi pas de temps,
- $\frac{du}{dt} = Bu$ sur un pas de temps complet,
- $\frac{du}{dt} = Au$ sur un demi pas de temps.

La solution formelle de ce splitting s'écrit

$$\tilde{u}(t + \Delta t) = \exp\left(\frac{\Delta t}{2} A\right) \exp(\Delta t B) \exp\left(\frac{\Delta t}{2} A\right) u(t).$$

Proposition 10. *Le splitting de Strang est d'ordre 2 en temps.*

Proof. Laissée en exercice. \square

Exemples : opérateurs différentiels.

- Soit l'équation $\partial_t f + a\partial_x f + b\partial_v f = 0$ avec a et b des coefficients constants. Les opérateurs différentiels $A = -a\partial_x$ et $B = -b\partial_v$ commutent car x et v sont des variables indépendantes. D'après la méthode des caractéristiques, la solution exacte est donnée par $u(t + \Delta t, x, v) = u(t, x - a\Delta t, v - b\Delta t)$. La solution donnée par le splitting est $u(t^*, x, v) = u(t, x - a\Delta t, v)$ et $u(t + \Delta t, x, v) = u(t^*, x, v - b\Delta t) = u(t, x - a\Delta t, v - b\Delta t)$. Donc le splitting est exact.
- Dans le cas de l'équation de Vlasov $\partial_t f + v\partial_x f - E(t, x)\partial_v f = 0$, les opérateurs $A = -v\partial_x$ et $B = E(t, x)\partial_v$ ne commutent pas donc le splitting va créer une erreur en temps.

3.2.3 Conservation de la masse

Au niveau continu, le système de Vlasov-Poisson (3.1) préserve la masse : $\frac{d}{dt} \int_{[0,1]} \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) dv dx = 0$. Il peut être intéressant d'utiliser une méthode numérique qui préserve, au niveau discret, la masse.

Proposition 11. *Les schémas avec splitting et interpolation linéaire présentés ci-dessus appliqués au système de Vlasov-Poisson avec conditions périodiques en espace et vitesse conservent la masse.*

Proof. Nous allons faire la preuve pour le splitting d'ordre 1. Il s'agit de montrer l'analogie discret de la conservation de la masse :

$$\Delta x \Delta v \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^{n+1} = \Delta x \Delta v \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^n.$$

Soit $j = 0, \dots, N_v$ fixé. On a

$$\sum_{i=0}^{N_x-1} f_{ij}^* = \sum_{i=0}^{N_x-1} ((1-\alpha)f_{i-p,j}^n + \alpha f_{i-p-1,j}^n) = (1-\alpha) \sum_{i=0}^{N_x-1} f_{i-p,j}^n + \alpha \sum_{i=0}^{N_x-1} f_{i-p-1,j}^n = \sum_{i=0}^{N_x-1} f_{ij}^n$$

par périodicité en x ($f_{i,j}^n = f_{i+N_x,j}^n$). Donc

$$\sum_{j=0}^{N_v-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} f_{ij}^* = \sum_{j=0}^{N_v-1} \sum_{i=0}^{N_x-1} f_{ij}^n.$$

Soit $i = 0, \dots, N_x$ fixé. On a

$$\sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^{n+1} = \sum_{j=0}^{N_v-1} ((1-\alpha)f_{i,j-p}^* + \alpha f_{i,j-p-1}^*) = (1-\alpha) \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{i,j-p}^* + \alpha \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{i,j-p-1}^* = \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^*$$

par périodicité en v ($f_{i,j}^* = f_{i,j+N_v}^*$). Donc

$$\sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^{n+1} = \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^* = \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^n.$$

□

Remark 4. La conservation de la masse reste vraie lorsque l'on considère des conditions de Dirichlet homogène en vitesse, si le domaine $[-V, V]$ est suffisamment grand et que le pas de temps Δt est suffisamment petit ($|p|$ petit) pour que les termes en trop ou à ajouter dans la somme soient nuls ($f_{i,j}^* = 0$ pour j proche de 0 et j proche de N_v).

3.2.4 Discrétisation de l'équation de Poisson

On peut discrétiser l'équation de Poisson $\partial_x E = 1 - \rho$ couplée à la condition de moyenne nulle $\int_{[0,1]_{per}} E dx = 0$ en utilisant des différences finies. Mais d'autres possibilités existent.

Différences finies. En utilisant le même maillage en espace et en temps que pour la discrétisation de l'équation de Vlasov, on note E_i^n une approximation de $E(t^n, x_i)$. À chaque pas de temps, connaissant f_{ij}^n , la première idée est de calculer par différences finies

$$\frac{E_{i+1}^n - E_i^n}{\Delta x} = 1 - \Delta v \sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^n,$$

où $\sum_{j=0}^{N_v-1} f_{ij}^n \approx \int_{\mathbb{R}} f(t^n, x_i, v) dv$. Une question se pose : comment calculer E_0^n ? L'équation de Poisson donne une solution définie à une constante près. Pour déterminer cette constante, c'est-à-dire pour que le problème soit bien posé, il faut ajouter la condition de moyenne nulle du champ $\int_{[0,1]} E(t, x) dx = 0$.

Nous avons au moins deux possibilités pour résoudre ce problème :

- écrire un système matriciel incluant la condition de moyenne nulle et le résoudre,
- fixer $E_0^n = 0$, calculer E_i^n pour $i = 1, \dots, N_x - 1$ puis corriger tous les E_i^n de $i = 0, \dots, N_x - 1$ en leur enlevant la moyenne.

Transformée de Fourier discrète. On se fixe un temps t et on regarde E comme fonction de x . Pour E continue (au moins par morceaux) et périodique en espace de période $L = 1$, on introduit sa série de Fourier

$$\mathcal{S}(E)(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \hat{E}_k \exp\left(\frac{2i\pi k}{L}x\right),$$

où les coefficients de Fourier sont définis par

$$\hat{E}_k = \frac{1}{L} \int_0^L E(x) \exp\left(-\frac{2i\pi k}{L}x\right) dx.$$

On ne fait pas ici la théorie sur la convergence de la série de Fourier, mais on rappelle que pour E de classe C^1 et L -périodique, on a $\mathcal{S}(E)(x) = E(x)$.

Nous pouvons approcher numériquement les coefficients de Fourier par une formule d'intégration par des trapèzes composée :

$$\hat{E}_k = \frac{1}{L} \sum_{l=0}^{N_x-1} \int_{x_l}^{x_{l+1}} E(x) \exp\left(-\frac{2i\pi k}{L}x\right) dx$$

que l'on approche par

$$\hat{E}_k \approx \frac{\Delta x}{L} \sum_{l=0}^{N_x-1} \frac{E_l \exp\left(-\frac{2i\pi k}{L}x_l\right) + E_{l+1} \exp\left(-\frac{2i\pi k}{L}x_{l+1}\right)}{2} = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} E_l \exp\left(-\frac{2i\pi k l}{N_x}\right). \quad (3.4)$$

Remark 5. En passant d'une fonction $E(x)$ continue à un ensemble de valeur discrètes E_l , nous avons perdu de l'information, si bien que nous n'avons que N_x coefficients distincts

$$\hat{E}_{k+N_x} = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} E_l \exp\left(-\frac{2i\pi(k+N_x)l}{N_x}\right) = \hat{E}_k.$$

Pour obtenir une approximation de $E(x)$, on utilise une série de Fourier tronquée (en supposant N_x pair) :

$$E(x) \approx \sum_{k=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{E}_k \exp\left(\frac{2i\pi k}{L}x\right). \quad (3.5)$$

Pour résoudre l'équation de Poisson par transformée de Fourier discrète, à un instant $t = t^n$ fixé, on écrit

$$\partial_x E(t^n, x) = 1 - \rho(t^n, x) = \tilde{\rho}(t^n, x)$$

qui donne

$$\frac{2i\pi k}{L} \sum_{k=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{E}_k^n \exp\left(\frac{2i\pi k}{L}x\right) = \sum_{k=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{\rho}_k^n \exp\left(\frac{2i\pi k}{L}x\right).$$

En chaque point $x_l = l \frac{L}{N_x}$, on a alors

$$\frac{2i\pi k}{L} \sum_{k=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{E}_k^n \exp\left(\frac{2i\pi k l}{N_x}\right) = \sum_{k=-N_x/2}^{N_x/2-1} \hat{\rho}_k^n \exp\left(\frac{2i\pi k l}{N_x}\right).$$

Comme $\left(\exp\left(\frac{2i\pi k l}{N_x}\right)\right)_{k=-N_x/2, \dots, N_x/2-1}$ forme une base de \mathbb{R}^{N_x} , on peut identifier les coefficients :

$$\hat{E}_k^n = -i \frac{L}{2\pi k} \hat{\rho}_k^n, \quad k \neq 0. \quad (3.6)$$

Le coefficient pour $k = 0$ est lui donné par la condition de moyenne nulle :

$$\hat{E}_0^n = \frac{1}{L} \int_0^L E(x) dx = 0. \quad (3.7)$$

L'algorithme est le suivant :

- connaissant f_{lj}^n , on calcule $\tilde{\rho}_l^n$, $l = 0, \dots, N_x$,
- on calcule les coefficients de Fourier associés $\hat{\rho}_k^n$, $k = -N_x/2, \dots, N_x/2 - 1$, comme dans (3.4),
- on en déduit \hat{E}_k^n , $k = -N_x/2, \dots, N_x/2 - 1$, par (3.6)-(3.7),
- on corrige le mode $k = -N_x/2$: $\tilde{\rho}$ étant réel, on a

$$\hat{\rho}_{-N_x/2}^n = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} \tilde{\rho}_l^n \exp\left(\frac{2i\pi N_x l}{2N_x}\right) = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} \tilde{\rho}_l^n \exp(i\pi)^l = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} \tilde{\rho}_l^n (-1)^l \in \mathbb{R},$$

alors $\hat{E}_{-N_x/2}^n$ sera imaginaire pur, mais comme E est réel, on a de même

$$\hat{E}_{-N_x/2}^n = \frac{1}{N_x} \sum_{l=0}^{N_x} E_l^n \exp\left(\frac{2i\pi N_x l}{2N_x}\right) \in \mathbb{R},$$

donc la seule possibilité est $\hat{E}_{-N_x/2}^n = 0$,

- on reconstruit une approximation de E_l^n , $l = 0, \dots, N_x$, en utilisant (3.5) aux points x_l .

Remark 6. L'algorithme FFT (Fast Fourier Transform) permet de calculer efficacement les coefficients de Fourier (3.4) et la FFT inverse permet de reconstruire efficacement (3.5) aux points x_l . Des bibliothèques contenant la FFT existent dans de nombreux langages de programmation.

Equation d'Ampère. On peut choisir de remplacer l'équation de Poisson par l'équation d'Ampère

$$\partial_t E = J, \quad J(t, x) := \int v f(t, x, v) dv.$$

Au niveau continu, si l'équation de Poisson est vérifiée au temps initial et si l'équation d'Ampère est vérifiée en tout temps, alors l'équation de Poisson est vérifiée en tout temps. En effet, en dérivant en espace, on a

$$\partial_x(\partial_t E) = \partial_x J.$$

Or on a

$$\begin{aligned} \partial_t \rho(t, x) &= \int \partial_t f(t, x, v) dv \\ &= \int -v \partial_x f(t, x, v) dv + E(t, x) \partial_v f(t, x, v) dv \\ &= -\partial_x \int v f(t, x, v) dv, \end{aligned}$$

c'est l'équation de conservation de la charge

$$\partial_t \rho = -\partial_x J.$$

Cela nous donne

$$\partial_x(\partial_t E) = -\partial_t \rho \quad \Leftrightarrow \quad \partial_t(\partial_x E + \rho) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \partial_x E + \rho = C.$$

Si à $t = 0$, on a $\partial_x E(0, x) + \rho(0, x) = 1$ alors $\forall t, \partial_x E(t, x) + \rho(t, x) = 1$.

De plus, au niveau continu, le courant total est nul : $\int_{[0,1]} J(t, x) dx = \int_{[0,1]} \int_{\mathbb{R}} v f(t, x, v) dv dx = 0$.
Alors Ampère donne

$$\int_{[0,1]} \partial_t E(t, x) dx = \int_{[0,1]} J(t, x) dx = 0,$$

ce qui implique que la condition de moyenne nulle du champ électrique $\int_{[0,1]} E(t, x) dx = 0$ est conservée au cours du temps, si elle est vraie à l'instant initial.

Ces calculs ne sont pas toujours vérifiés au niveau discret. Selon la méthode numérique utilisée et ce qu'elle préserve, remplacer Poisson par Ampère peut créer des erreurs importantes.