

Multipoles et équations intégrales de Després

Francis Collino et Florence Millot

29 Juin, 2000

CERFACS REPORT TR/EMC/00/94

1 Contexte et présentation de l'étude

Les équations intégrales par la précision qu'elles permettent et par la facilité qu'elles offrent d'éviter le maillage en volume, restent l'outil privilégié pour la résolution des problèmes de diffraction d'ondes. Les problèmes où l'obstacle a une dimension caractéristique allant jusqu'à une dizaine de longueur d'onde sont à présent bien dominés essentiellement par le calcul à haute performance sur architecture parallèle. Cependant, l'accroissement par un facteur 10 de la taille en longueurs d'onde de l'obstacle conduit à une multiplication par 10^8 des capacités de stockage et par un facteur 10^{12} du temps de traitement. Ceci est hors de portée des calculateurs actuels et même prévisibles à court terme. Pour les problèmes de quelques centaines de longueurs d'onde, la résolution du système linéaire final n'est envisageable que par des méthodes itératives. Une formulation originale (méthode des équations intégrales de Després ou EID) a été développée. Il a été démontré théoriquement que sa résolution par une méthode de Jacobi est convergente. Cette formulation a conduit au développement d'un code de calcul au CEA/CESTA (code MAXIM) qui a fournit des résultats encourageants. Pour rendre cet algorithme très efficace, il faut pouvoir calculer de façon rapide un produit matrice-vecteur. Les méthodes multipolaires sont un des outils privilégiés pour réaliser cette tâche. L'utilisation conjointe des EID et de la méthode multipôle devrait conduire à une méthode en même temps rapide et robuste. L'équipe Electromagnétisme du CERFACS a une expertise dans le domaine des équations intégrales et s'est intéressée à la méthode de Després pour les problèmes bidimensionnels.

Elle a par ailleurs étudié et implémenté ces techniques multipolaires pour les équations intégrales classiques type EFIE. C'est dans ce contexte que le CEA/CESTA a demandé au CERFACS une collaboration sur ces techniques multipolaires qui revêtait deux aspects: tout d'abord de donner les éléments qui permettent d'adapter les multipôles aux EID et parallèlement de fournir des briques logicielles pouvant se révéler utiles pour l'implémentation dans le code MAXIM.

Pour ce qui concerne le second aspect, le CERFACS a envoyé par courrier électronique des programmes FORTRAN-77 portant sur les aspects suivants:

- **module de construction de la structure de boîtes (oct-tree)**
- **module concernant l' algorithme multipolaire proprement dit (regroupement, translation et ventilation)**
- **module permettant l'interpolation et le filtrage de champs proches ou lointains échantillonnés sur des maillages distincts.**
- **module de construction de la matrice des interactions proches.**

Ces modules sont des briques de base qui, au prix d'une adaptation importante, devraient pouvoir être intégrés au code MAXIM.

La suite de ce rapport concerne l'étude de l'utilisation des méthodes multipolaires pour les EID.

2 Position du problème

2.1 Présentation des EID (rappels)

Dans cette partie, on rappelle très rapidement les équations intégrales de Després (EID). Le but ici est de donner les concepts et les notations qui nous seront utiles. Pour une présentation plus complète, on se reportera utilement au rapport de K.Mer sur la question [7], ainsi qu'aux articles [5] [2], [1]. Pour simplifier on se restreint au cas modèle d'un problème de diffraction avec une condition absorbante sur l'obstacle.

Le système des EID permet d'obtenir la solution sortante du problème

de Maxwell

$$\begin{cases} \nabla \wedge E + ikH = 0 & \text{dans } \Omega^{ext} \\ \nabla \wedge H - ikE = 0 & \text{dans } \Omega^{ext} \\ \nu \wedge (E \wedge \nu) + (H \wedge \nu) = g & \text{sur } \Gamma \end{cases} \quad (1)$$

où Ω^{ext} est le domaine extérieur d'un obstacle de frontière Γ , ν sa normale extérieure, k le nombre d'onde, g la donnée au bord. Sa formulation s'appuie sur la minimisation d'une fonctionnelle quadratique sous contraintes linéaires. Elle conduit à la résolution de deux systèmes découplés de la forme

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}Id + \frac{1}{4k^2}\delta_\ell^*\delta_\ell & kK_\ell \\ -kK_\ell^* & \delta_\ell^*\delta_\ell \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_\ell \\ \lambda_\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_\ell \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \ell = 1, 2. \quad (2)$$

Dans cette équation les inconnues (x_ℓ, λ_ℓ) et la donnée g_ℓ sont des champs tangents à la surface de l'objet. Elles sont reliées aux inconnues physiques par

$$\begin{cases} x^\ell = (E + \varepsilon_\ell H)|_\Gamma \wedge \nu, & \lambda^\ell = \frac{i}{2k}(\varepsilon_\ell E + H)|_\Gamma \wedge \nu \\ g_\ell = \frac{1}{2}(g - \varepsilon_\ell g \wedge \nu), & \varepsilon_\ell = -(-1)^\ell, \quad \ell = 1, 2. \end{cases} \quad (3)$$

Les deux opérateurs δ_ℓ associent à tout champ tangent à Γ un champ tangent à la sphère unité, notée S^2 . Ils sont donnés par

$$\delta_\ell \phi(\hat{s}) = \frac{ik^2}{2\pi} \int_\Gamma \phi(x) \cdot \hat{e}_\ell(\hat{s}) e^{ikx \cdot \hat{s}} d\Gamma(x), \quad (4)$$

avec

$$\hat{e}_\ell(\hat{s}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\theta} + \varepsilon_\ell i\hat{\varphi}), \quad (5)$$

et $\hat{s} = (\theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques, $(\hat{s}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$ le repère orthonormé en sphérique habituel. Enfin, les deux opérateurs K_ℓ ont pour expression

$$K_\ell \phi = -\varepsilon_\ell T\phi - K\phi - \frac{1}{2}\nu \wedge \phi \quad (6)$$

où T et K sont des opérateurs intégraux classiques de l'électromagnétisme:

$$\begin{cases} T\phi(x) = k \int_\Gamma G_r(x, y) \phi(y) d\Gamma(y) + \frac{1}{k} \int_\Gamma \vec{\nabla}_x G_r(x, y) \text{div}_\Gamma \phi(y) d\Gamma(y) \\ K\phi(x) = \int_\Gamma \vec{\nabla}_x G_r(x, y) \wedge \phi(y) d\Gamma(y) \end{cases} \quad (7)$$

avec la fonction de Green (ce qui est une des particularités des EID)

$$G_r(x, y) = \frac{\cos(k|x - y|)}{4\pi|x - y|}. \quad (8)$$

La discrétisation utilise deux maillages, l'un pour l'obstacle l'autre pour la sphère. Si \mathcal{T}_h est un maillage de composé de triangles de l'obstacle Γ , on approche les inconnues du problème à l'aide d'éléments finis de Raviart-Thomas d'ordre le plus bas, conformes pour l'opérateur divergence surfacique. On utilise par ailleurs un maillage de points de S^2 qui permet d'effectuer le calcul des intégrales sur la sphère par quadrature. À partir de la formulation variationnelle des deux systèmes (2), on construit un problème approché à l'aide d'une méthode de Galerkin. On obtient deux systèmes linéaires du type

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}Id_h + \frac{1}{4k^2}\delta_{\ell,h}^*\delta_{\ell,h}, & kK_{\ell,h} \\ -kK_{\ell,h}^*, & \delta_{\ell,h}^*\delta_{\ell,h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{\ell,h} \\ \lambda_{\ell,h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{\ell,h} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \ell = 1, 2, \quad (9)$$

l'indice h signant le caractère discret des équations.

Chaque système (9) est un système plein de taille $2N$ où N est le nombre d'arêtes du maillage (cas d'objets sans bord).

2.2 Résolution des EID, algorithmes et complexités

Le problème (2) est un problème de point selle et correspond à la minimisation d'une fonctionnelle quadratique. Pour résoudre sa version discrétisée (9), on peut utiliser un algorithme classique pour les problèmes de Stokes de la mécanique des fluides et qui utilise deux gradients conjugués imbriqués. Pour des problèmes de conditionnement, on utilise également une pénalisation avec un petit paramètre ϵ . On augmente le bloc diagonal gauche de ϵId_h . Le terme additionnel au second membre est relaxé à l'intérieur d'une méthode de Jacobi qui ajoute une troisième boucle d'itération. C'est cet algorithme qui est intégré dans le code MAXIM du CEA. Sa description précise est donnée dans [7]. Son coût est évalué à

$$C = \mathcal{N}(2(n_2 + 1)(n_1 + 2)c_1 + 4(n_2 + 1)c_2) \quad (10)$$

où dans cette expression

- n_1 est le nombre moyen d'itérations de gradient conjugué requis pour résoudre un problème de type

$$A_{\ell,h}x_h = f_h \text{ avec } A_{\ell,h} = \left(\frac{1}{2}Id_h + \frac{1}{4k^2}\delta_{\ell,h}^*\delta_{\ell,h} \right). \quad (11)$$

- n_2 est ce même nombre mais pour le système

$$\left(k^2 K_{\ell,h} A_{\ell,h}^{-1} K_{\ell,h}^* + \delta_{\ell,h}^* \delta_{\ell,h} + \epsilon Id_h \right) x_h = f_h. \quad (12)$$

- \mathcal{N} est le nombre d'itérations requis pour faire converger la méthode de Jacobi.
- c_1 (resp. c_2) est le coût d'un produit matrice vecteur $A_{\ell,h}x_h$ (resp $K_{\ell,h}x_h$).

La première version du code MAXIM utilise un calcul direct pour $K_{\ell,h}x_h$ et un algorithme par étapes pour $A_{\ell,h}x_h$ (on calcule d'abord $\gamma = \delta_{\ell,h}x_h$ puis on effectue $A_{\ell,h}x_h = \delta_{\ell,h}^*\gamma$). On a donc

$$c_1 \sim NN_{\hat{s}} \quad c_2 \sim N^2 \quad (13)$$

où N est le nombre d'arêtes du maillage pour Γ et $N_{\hat{s}}$ le nombre de points de quadrature sur S^2 . Pour les objets à frontière régulière par morceaux, N est proportionnel au carré de la fréquence, de même que $N_{\hat{s}}$, d'où un coût proportionnel à la puissance quatrième de la fréquence pour c_1 et c_2 .

Ce sont ces coûts que la méthode multipôles va permettre de diminuer.

3 Multipoles

3.1 Les boîtes.

3.1.1 Notion de boîtes. Empilement de boîtes.

La surface de l'objet diffractant est supposée maillée en triangles: Γ est réunion de triangles et on note \mathcal{T}_h la collection de tous les triangles:

$$\Gamma = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T. \quad (14)$$

La surface étant supposé bornée, on se donne une boîte cubique contenant Γ que l'on note B_0^0

$$\Gamma \subset B_0^0, \quad B_0^0 = c_{B_0^0} + \left[-\frac{D}{2}, +\frac{D}{2} \right]^3. \quad (15)$$

La taille de la boîte est alors D et son centre $c_{B_0^0}$.

À partir de cette première boîte, on construit toute une collection de boîtes de taille de plus en plus petite en effectuant des découpages successifs de chaque boîte en 8 boîtes de taille moitié et en rejetant systématiquement toute boîte ne contenant aucun triangle. Ceci suppose de définir la notion d'appartenance d'un triangle à une boîte. Pour cela, on choisit de privilégier le centre de gravité du triangle:

$$\text{si } T \in \mathcal{T}_h, \quad T \tilde{\in} B : G_T \in B, \quad (G_T \text{ centre de gravité de } T). \quad (16)$$

Cette succession de découpages induit une hiérarchie par niveaux de la totalité des boîtes. On pourra donc associer à chaque boîte un niveau qui permet de repérer à quel instant la boîte été créée. On notera $lv(B)$ le niveau d'une boîte donnée et c_B son centre.

Plus précisément on obtiendra par tris successifs des centres de gravité des triangles l'empilement suivant:

- Au niveau $lv = 0$, on a une seule boîte :

$$\mathcal{B}^{lv=0} = \{B_0^0\} \quad (17)$$

- Au niveau $lv = 1$, on a au plus 8 boîtes :

$$\mathcal{B}^{lv=1} = \{B_1^1, B_2^1, \dots, B_{NB^1}^1\} \quad \text{où } NB^1 \leq 8. \quad (18)$$

On les obtient en divisant B_0^0 en 8

$$B_0^0 = \bigcup_{\varepsilon=(\pm 1, \pm 1, \pm 1)} \left(c_{B_0^0} - \varepsilon \frac{D}{4} + \left[-\frac{D}{4}, +\frac{D}{4} \right]^3 \right), \quad (19)$$

et en rejetant les boîtes sans triangles

- Au niveau $lv = 2, \dots, Lv$, on fait la même chose mais sur chaque boîte du niveau précédent.

Le nombre total de niveau est donc Lv et \mathcal{B}^{lv} est l'ensemble des boîtes d'un niveau donné. La collection complète est alors

$$\mathcal{B} = \bigoplus_{lv=0, \dots, Lv} \mathcal{B}^{lv}. \quad (20)$$

3.1.2 Notion de descendants, d'ascendants, de voisins et de voisins éloignés d'une boîte .

L'algorithme précédemment décrit permet de définir facilement la notion de descendant et d'ascendant d'une boîte. Dit rapidement, l'ascendant d'une boîte est la boîte de niveau supérieur dont elle est issue. Les descendants sont celles de niveau immédiatement inférieur qu'elle a engendrée :

$$\mathcal{D}(B) = \{b \in \mathcal{B}, b \subset B, lv(b) = lv(B) + 1\} \quad (21)$$

$$B = \text{Ascend}(b) \Leftrightarrow b \in \mathcal{D}(B) \quad (22)$$

On définit également la notion de boîte voisine. Si B est une boîte, B' une autre boîte. On dira que B' est voisine de B si elles sont de même niveau et si elles ont au moins un sommet commun.

Il est facile de voir qu'il y a au plus 27 boîtes voisines d'une boîte donnée: la boîte elle même et celles qui partagent avec elle une arête ou un sommet. On a donc

$$\mathcal{V}(B) = \{B' \in \mathcal{B}, lv(B') = lv(B), \overline{B} \cap \overline{B'} \neq \emptyset\}. \quad (23)$$

On termine par la notion plus compliquée de voisins éloignés d'une boîte :

$$\mathcal{C}(B) = \{B' \in \mathcal{B}, \text{Ascend}(B') \in \mathcal{V}(\text{Ascend}(B)) \text{ et } B' \notin \mathcal{V}(B)\} \quad (24)$$

En gros, les voisins éloignés d'une boîte sont les boîtes de même niveau non voisines de B mais dont les deux ascendants sont voisins.

Pour chaque boîte, il y a au plus 189 boîtes voisines éloignées (27 fois 8 – 27 car les 27 voisins ont au plus 8 descendants et on doit enlever les 27 vrais voisins).

À partir de ces notions. il est facile de définir les ensembles des couples de boîtes voisines ou voisines éloignées à un niveau donné. On définit

$$\mathcal{V}^{lv} = \{(B, B') \in \mathcal{B}^{lv} \times \mathcal{B}^{lv}, B \in \mathcal{V}(B')\}, \quad (25)$$

$$\mathcal{C}^{lv} = \{(B, B') \in \mathcal{B}^{lv} \times \mathcal{B}^{lv}, B \in \mathcal{C}(B')\}, \quad (26)$$

(remarquez que la disymétrie entre B et B' n'est qu'apparente puisque si B' est voisine (resp. voisine éloignée) de B , B est voisine (resp. voisine éloignée) de B' .)

la propriété fondamentale que nous utiliserons par la suite est que

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Si } (B, B') \in \mathcal{V}^{\ell v}, \text{ alors } (b, b') \in \mathcal{D}(B) \times \mathcal{D}(B') \text{ entraine} \\ (b, b') \in \mathcal{V}^{\ell v+1} \text{ ou bien } (b, b') \in \mathcal{C}^{\ell v+1}. \end{array} \right. \quad (27)$$

Autrement dit, deux boîtes voisines ont tous leurs descendants respectifs voisins ou voisins éloignés.

3.2 Découpages induits par la structure de boîte.

3.2.1 Découpage arborescent sur $\mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h$.

On a maintenant tous les éléments pour définir le découpage de $\mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h$ adapté aux multipôles.

Si T est un triangle, à chaque niveau, son centre de gravité est localisé à l'intérieur d'une unique boîte. On peut écrire

$$T \in B_T^{L v} \subset B_T^{L v-1} \subset \dots \subset B_T^0 = B_0^0. \quad (28)$$

Maintenant, si (T, T') est une paire de triangles, on dira que (T, T') sont proches si chaque triangle appartient à deux boîtes voisines de niveau $L v$ (c.à.d. celui correspondant aux plus petites boîtes). On note \mathcal{N}_T l'ensemble des paires de triangles proches :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{N}_T = \left\{ (T, T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h, \left| \begin{array}{l} \exists (B, B') \in \mathcal{B}^{L v} \times \mathcal{B}^{L v}, \\ T \in B, T' \in B' \text{ et } B' \in \mathcal{V}(B) \end{array} \right. \right\} \\ \text{ou } \mathcal{N}_T = \left\{ (T, T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h, (B_T^{L v}, B_{T'}^{L v}) \in \mathcal{V}^{L v} \right\} \end{array} \right. \quad (29)$$

On définira alors \mathcal{F}_T , ensemble des paires de triangles loins, comme le complémentaire de \mathcal{N}_T (deux triangles non proches sont considérés comme loins l'un de l'autre!)

$$\mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h = \mathcal{N}_T \oplus \mathcal{F}_T. \quad (30)$$

le signe \oplus désignant le caractère disjoint de la décomposition.

L'ensemble \mathcal{F}_T des paires de triangles éloignés peut lui-même être partitionné suivant le degrés de proximité des triangles. On écrira

$$\mathcal{F}_T = \mathcal{F}_T^{L v} \oplus \mathcal{F}_T^{L v-1} \oplus \dots \mathcal{F}_T^2 \quad (31)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F}_T^{\ell v} = \left\{ (T, T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h, \left| \begin{array}{l} \exists (B, B') \in \mathcal{B}^{\ell v} \times \mathcal{B}^{\ell v}, \\ T \in B, T' \in B' \text{ et } B' \in \mathcal{C}(B) \end{array} \right. \right\} \\ \text{ou } \mathcal{F}_T^{\ell v} = \left\{ (T, T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h, (B_{T'}^{L v}, B_T^{L v}) \in \mathcal{C}^{L v} \right\} \end{array} \right\} \quad (32)$$

Cette décomposition provient du fait que deux triangles éloignés sont nécessairement voisins pour un niveau assez grand (plus grand que 1 car toutes les boîtes de niveau 1 sont voisines). Or deux paires de boîtes voisines au niveau ℓv ne peuvent contenir que des paires de boîtes voisines ou bien voisines éloignées au niveau $\ell v + 1$. Quand les deux triangles ne sont pas voisins le processus doit s'arrêter à un certain niveau.

3.2.2 Découpage des matrices

Le découpage des paires de triangles va nous permettre de décomposer les matrices provenant des formulations éléments finis qui s'appuient sur une triangulation de Γ . La démarche est très générale, c'est pourquoi on a choisi de la présenter dans un cadre assez abstrait que l'on particularisera dans la suite.

On commence par rappeler les fonctions de base de Raviart-Thomas linéaires par triangle que l'on utilise. Celles-ci consistent en la collection des

$$(\phi_i)_{1 \leq i \leq N}, \quad (33)$$

où i parcourt l'ensemble des arêtes de la triangulation (on suppose l'objet sans bord pour simplifier). À chaque arête A_i est ainsi associée une fonction de base. Celle-ci a son support qui coïncide avec les deux triangles qui s'appuient sur l'arête, soient $T_{A_i}^+$ et $T_{A_i}^-$. On a

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - S_i^+}{2|T_{A_i}^+|} & \text{si } x \in T_{A_i}^+ \\ -\frac{x - S_i^-}{2|T_{A_i}^-|} & \text{si } x \in T_{A_i}^- \end{cases} \quad (34)$$

où S_i^\pm est le sommet de $T_{A_i}^\pm$ opposé l'arête A_i et $|T|$ est l'aire du triangle T

Soit maintenant $b(x, y; \phi, \phi')$ une fonction de 4 variables qui est bilinéaire en (ϕ, ϕ') . À partir de b , on construit la matrice

$$Z_{i,j} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y). \quad (35)$$

En utilisant la triangulation de Γ , on ramène l'assemblage de cette matrice à ce que l'on appelle couramment des matrices élémentaires

$$\begin{cases} Z_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h} \int_T \int_{T'} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y) \\ = \sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h} Z_{i,j}^{T,T'}. \end{cases} \quad (36)$$

Les matrices élémentaires $Z_{i,j}^{T,T'}$ sont très creuses car pour (T, T') fixé, seuls 9 termes sont non nuls (disgression sans objet ici).

La partition de $\mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h$ en $\mathcal{N}_T \oplus \mathcal{F}_T$ nous permet de construire naturellement la décomposition

$$Z = Z^{near} + Z^{far}, \quad (37)$$

avec

$$Z_{i,j}^{near} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{N}_T} \int_T \int_{T'} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y), \quad (38)$$

$$Z_{i,j}^{far} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{F}_T} \int_T \int_{T'} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y). \quad (39)$$

La partition de \mathcal{F}_T induit elle-même un découpage de la matrice Z^{far} suivant

$$Z^{far} = \sum_{\ell v=2}^{Lv} Z^{\ell v}, \quad Z_{i,j}^{\ell v} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{F}_T^{\ell v}} \int_T \int_{T'} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y) \quad (40)$$

ou encore

$$Z_{i,j}^{\ell v} = \sum_{(B,B') \in \mathcal{F}_B^{\ell v}} Z_{i,j}^{B,B'}, \quad (41)$$

avec

$$Z_{i,j}^{B,B'} = \sum_{(T,T') \in B \times B'} \int_T \int_{T'} b(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y). \quad (42)$$

3.3 Multiplication matrice vecteur via la FMM.

3.3.1 Formule multipôle abstraite

Soient T et T' deux triangles appartenant à deux boîtes voisines éloignées B , B' de niveau ℓv donné. Si (x, y) sont deux points de $T \times T'$, on suppose que

l'expression de $b(x, y, \phi_i, \phi_j)$ est donnée par une formule du type

$$\left\{ \begin{array}{l} b(x, y, \phi_i, \phi_j) = \\ \int_{S^2} T_{B,B'}(\hat{s}) \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i)} \Pi(\hat{s}, \phi_j) e^{-ik(x-c_B)\cdot\hat{s}} e^{ik(y-c'_B)\cdot\hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \end{array} \right. \quad (43)$$

où

- S^2 est la sphère unité, \hat{s} est un point courant de S^2 , $d\sigma(\hat{s})$ l'élément d'aire de S^2 ,
- $T_{B,B'}(\hat{s})$ est une fonction à valeurs complexes régulière qui ne dépend de B et B' que par le truchement du vecteur $c_B - c_{B'}$,
- $\Pi(\hat{s}, \phi)$ est une forme linéaire à valeurs complexes en ϕ et C^∞ en \hat{s} .

On suppose cette formule valable pour tout (x, y) dans $T \times T'$.

Cette décomposition a plusieurs propriétés remarquables qui vont jouer un rôle important dans la suite

1. Les variables x et y sont maintenant séparées: on a, modulo une intégration sur la sphère, décomposé le noyau. On peut interpréter cette décomposition comme une décomposition spectrale de l'opérateur intégral associé.
2. La dépendance de cette décomposition par rapport aux boîtes est multiplicative par rapport au centre des boîtes.
3. La fonction ne dépendant que de $c_B - c_{B'}$, il n'existe qu'un nombre fini (≤ 316) de telles fonctions pour un niveau donné. En effet, il est facile (enfin, pas trop difficile) de voir que la distance de centre à centre de deux boîtes voisines éloignées est de la forme

$$c_B - c_{B'} = (n_1\hat{x} + n_2\hat{y} + n_3\hat{z}) \frac{D}{2\ell v} \quad (44)$$

avec

$$(n_1, n_2, n_3) \in \{-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3\}^3 - \{-1, 0, 1\}^3 \quad (45)$$

et $7^3 - 3^3$ est égal à 316.

3.3.2 Multiplication matrice vecteur (cas singulier)

Soit $I = (I_i)_{1 \leq i \leq N}$ un vecteur courant. On s'intéresse au calcul de

$$U^{far} = Z^{far} I \Leftrightarrow U_i^{far} = \sum_{j=1}^N Z_{i,j}^{far} I_j, \quad (46)$$

soit

$$U_i^{far} = \sum_{\ell v=2}^{Lv} \left(\sum_{j=1}^N Z_{i,j}^{\ell v} I_j \right) = \sum_{\ell v=2}^{Lv} U_i^{\ell v}. \quad (47)$$

On a plus précisément

$$\left\{ \begin{array}{l} U_i^{\ell v} = \\ \sum_{(B,B') \in \mathcal{C}_B^{\ell v}} \sum_{(T,T') \in B \times B'} \sum_j \left\{ \int_T \int_{T'} b(x,y, \phi_i(x), \phi_j(y)) dT(x) dT'(y) \right\} I_j. \end{array} \right. \quad (48)$$

On va inverser les sommations. On procède de la manière suivante. Si A_i est une arête associée au degrés de liberté i , toutes les intégrales sont nulles à l'exception de celles relatives à $T = T_{A_i}^+$ et $T = T_{A_i}^-$. Maintenant T étant fixé, son centre de gravité appartient à une unique boîte de niveau ℓv soit $B_T^{\ell v}$ et on a

$$\sum_{(B,B') \in \mathcal{C}_B^{\ell v}} \sum_{(T,T') \in B \times B'} (\dots) = \sum_{T=T_{A_i}^\pm} \sum_{B' \in \mathcal{C}(B_T^{\ell v})} \sum_{T' \in B'} (\dots). \quad (49)$$

En substituant l'ingrédient multipolaire, on arrive à l'expression

$$\left\{ \begin{array}{l} U_i^{\ell v} = \sum_{T=T_{A_i}^\pm} \int_T \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x-c_B)} \left(\sum_{B' \in \mathcal{C}(B_T^{\ell v})} T_{B,B'}(\hat{s}) \dots \right. \\ \left. \dots \left(\sum_{T' \in B'} \left(\int_{T'} e^{ik(y-c'_B) \cdot \hat{s}} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) dT'(y) \right) \right) \right) d\sigma(\hat{s}) dT(x). \end{array} \right. \quad (50)$$

D'où un premier calcul "multipolaire"

- On boucle sur les niveaux : pour tous les niveaux $\ell v \in \{Lv, Lv - 1, \dots, 2\}$

– on calcule les “far fields” : sur toute les boîtes de niveau ℓv , on forme

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{T \in B'} \left(\int_{T'} e^{ik(y-c_{B'}) \cdot \hat{s}} \left(\sum_{j, A_j \subset \partial T} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) I_j \right) dT'(y) \right), \quad (51)$$

– on translate les boîtes voisines éloignées: sur toutes les boîtes de niveau ℓv , on écrit

$$N^B(\hat{s}) = \sum_{B' \in \mathcal{C}(B_T^{\ell v})} T_{B, B'}(\hat{s}) F^{B'}(\hat{s}), \quad (52)$$

– on reconstitue le “champ” en chaque degré de liberté

$$U_i^{\ell v} = \sum_{T=T_{A_i}^{\pm}} \int_T \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x-c_B) \cdot \hat{s}} N^B(\hat{s}), \quad (53)$$

avec $B = B_T^{\ell v}$,

• on reconstitue enfin le champ lointain total

$$U_i^{far} = \sum_{\ell v=2}^{Lv} U_i^{\ell v}. \quad (54)$$

Maintenant, on peut utiliser l’emboîtement des boîtes : on remarque que

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{T \in B'} \left(\int_{T'} e^{ik(y-c_{B'}) \cdot \hat{s}} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) dT'(y) \right) = \\ \sum_{b' / Ascend(b')=B'} \sum_{T \in b'} \left(\int_{T'} e^{ik(y-c_{b'}) \cdot \hat{s}} e^{ik(c_{b'}-c_{B'}) \cdot \hat{s}} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) dT'(y) \right) \end{array} \right. \quad (55)$$

soit

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{b' / Ascend(b')=B'} e^{ik(c_{b'}-c_{B'}) \cdot \hat{s}} F^{b'}(\hat{s}). \quad (56)$$

Il y a donc une récurrence entre les champs $F^B(\hat{s})$.

De la même façon, on peut regrouper le calcul des quantités à intégrer : on définit

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{N}^B(\hat{s}) = N^B(\hat{s}), \text{ si } B \in \mathcal{B}^2 \text{ top niveau} \\ \tilde{N}^B(\hat{s}) = N^B(\hat{s}) + \tilde{N}^{Ascend(B)}(\hat{s}) e^{-ik(c_B-c_{Ascend(B)}) \cdot \hat{s}}, \text{ sinon.} \end{array} \right. \quad (57)$$

Le vecteur U_i^{far} peut alors se calculer en une seule fois selon

$$U_i^{far} = \sum_{T=T^\pm(A_i)} \int_T \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x-c_{B_T^{Lv}}) \cdot \hat{s}} \tilde{N}^{B_T^{Lv}}(\hat{s}), \quad (58)$$

(il suffit d'injecter (57) dans (53) et d'utiliser le décalage sur les exponentielles). Ces remarques permettent de réécrire le premier algorithme selon :

- On calcule les “far fields” sur les boîtes B de plus petite taille (boîte de niveau Lv)

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{T \in B'} \left(\int_{T'} e^{ik(y-c'_{B'}) \cdot \hat{s}} \left(\sum_{j, A_j \subset \partial T} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) I_j \right) dT'(y) \right), \quad (59)$$

- on boucle sur les niveaux en remontant des plus petites boîtes vers les plus grosses : pour tous les niveaux $lv \in \{Lv - 1, \dots, 2\}$ on calcule les “far fields” par regroupement de toutes les boîtes de niveau lv

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{b' / Ascend(b')=B'} e^{ik(c_{b'} - c_{B'}) \cdot \hat{s}} F^{b'}(\hat{s}). \quad (60)$$

- pour tous les niveaux $lv \in \{Lv - 1, \dots, 2\}$ on initialise les “near fields” de toutes les boîtes de niveau lv par translation des boîtes voisines éloignées:

$$\tilde{N}^B(\hat{s}) = \sum_{B' \in \mathcal{C}(B_T^{lv})} T_{B, B'}(\hat{s}) F^{B'}(\hat{s}), \quad (61)$$

- on effectue une nouvelle boucle sur les niveaux en remontant: pour tous les niveaux $lv \in \{3, \dots, Lv\}$ on ré-assemble les “near fields” de toutes les boîtes de niveau lv

$$\tilde{N}^B(\hat{s}) = \tilde{N}^B(\hat{s}) + \tilde{N}^{Ascend(B)}(\hat{s}) e^{-ik(c_B - c_{Ascend(B)}) \cdot \hat{s}} \quad (62)$$

- on reconstitue le “champ” à chaque degrés de liberté

$$U_i^{lv} = \sum_{T=T_{A_i}^\pm} \int_T \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x-c_{B_T^{Lv}}) \cdot \hat{s}} \tilde{N}^{B_T^{Lv}}(\hat{s}) \quad (63)$$

Dans cet algorithme, on a pas précisé le maillage utilisé pour l'intégration numérique sur S^2 . Ce maillage devra être adapté au niveau de la boîte considérée et des opérateurs d'interpolation et de filtrage doivent être utilisés pour passer d'un niveau à l'autre. Nous reviendrons sur ce point dans l'une des sections suivantes. Nonobstant cet ingrédient technique (et essentiel), cet algorithme est l'algorithme FMM ou fast multipoles method.

3.3.3 Multiplication matrice vecteur (cas régulier)

Dans la section précédente, nous avons décrit un algorithme qui prenait en compte le fait que la décomposition du noyau à intégrer n'était valable que pour des boîtes suffisamment éloignées. Dans le cas où la décomposition est uniforme, on peut également construire un algorithme plus simple que l'on décrit ci-dessous.

On suppose maintenant que l'on a une formule du type

$$\left\{ \begin{array}{l} b^{reg}(x, y, \phi_i, \phi_j) = \\ \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i)} \Pi(\hat{s}, \phi_j) e^{-ikx \cdot \hat{s}} e^{iky \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \end{array} \right. \quad (64)$$

valable uniformément sur (x, y) dans B_0^0 . Dans ce cas, la partie séparation partie proche, partie lointaine peut être évitée. Si Z^{reg} est la matrice

$$Z_{i,j}^{reg} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} b^{reg}(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y). \quad (65)$$

la matrice est définie positive avec

$$Z_{i,j}^{reg} = (\delta^* \delta)_{i,j} = \int_{S^2} \overline{\delta_i(\hat{s})} \delta_j(\hat{s}) d\sigma(\hat{s}) \quad (66)$$

Le calcul $Z^{reg}I$ peut se faire alors très simplement suivant

1. Faire sur toutes les boîtes de niveau Lv

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{T \in B'} \left(\int_{T'} e^{ik(y - c'_B) \cdot \hat{s}} \left(\sum_{j, A_j \subset \partial T} \Pi(\hat{s}, \phi_j(y)) I_j \right) dT'(y) \right), \quad (67)$$

2. Faire sur tous les niveaux $\ell v = Lv - 1, \dots, 0$: faire sur toutes les boîtes de niveau ℓv

$$F^{B'}(\hat{s}) = \sum_{b' / Ascend(b') = B'} e^{ik(c_{b'} - c_{B'}) \cdot \hat{s}} F^{b'}(\hat{s}). \quad (68)$$

3. Initialiser le “near field” de la plus grosse boîte

$$\tilde{N}^{B_0^0}(\hat{s}) = \tilde{F}^{B_0^0}(\hat{s}) \quad (69)$$

4. Faire sur tous les niveaux $\ell v = 1, \dots, Lv$: faire sur toutes les boîtes de niveau ℓv

$$\tilde{N}^B(\hat{s}) = \tilde{N}^B(\hat{s}) + \tilde{N}^{Ascend(B)}(\hat{s}) e^{-ik(c_B - c_{Ascend(B)}) \cdot \hat{s}} \quad (70)$$

5. Faire sur tous les degrés de liberté

$$U_i^{\ell v} = \sum_{T=T^\pm(A_i)} \int_T \int_{S^2} \overline{\Pi(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x - c_{B_T L v}) \cdot \hat{s}} \tilde{N}_T^{B_T L v}(\hat{s}) \quad (71)$$

Cet algorithme est, mis à part le regroupement des calculs par boîtes, semblable à celui utilisé dans MAXIM pour effectuer le calcul de $A_{\ell, h} x_h = \delta_{\ell, h}^* \delta_{\ell, h} x_h$. Là encore, c'est l'adaptation du maillage à la taille de chaque boîte et l'utilisation d'opérateur de filtrage et d'interpolation qui va permettre d'obtenir un calcul plus rapide.

4 Formules FMM pour les EID.

Nous nous proposons dans cette section d'établir les formules multipolaires pour les opérateurs de type $A_{\ell, h}$ et $K_{\ell, h}$ qui sont utilisés dans les EID. Le cas de $A_{\ell, h}$ est très simple et correspond au cas régulier. Il est traité dans une première sous-section. Les opérateurs $K_{\ell, h}$ sont, comme le montre la formule (7), combinaisons de deux opérateurs à noyau (T et K) et d'un opérateur quasi diagonal ($n \wedge \cdot$). Après avoir rappelé les formules multipoles classiques (sous-section 2), on déduit facilement une première formule pour K (sous-section 3), puis on effectue un traitement un peu plus subtil pour T (sous-section 4). Enfin, on assemble les résultats pour obtenir le résultat recherché.

4.1 Le cas des matrices $A_{\ell, h}$

C'est le cas le plus simple: on utilise (11) pour écrire

$$A_{\ell, h} x_h = \frac{1}{2} Id_h x_h + \frac{1}{2} A'_{\ell, h} x_h \quad (72)$$

avec

$$A'_{\ell, h} x_h = \frac{1}{2k^2} \delta_{\ell, h}^* \delta_{\ell, h} x_h. \quad (73)$$

D'après (4)-(5), on a

$$(A'_{\ell,h})_{i,j} = \int_{S^2} \alpha \delta_{\ell,h}(\phi_i, \hat{s}) \overline{\alpha \delta_{\ell,h}(\phi_j, \hat{s})} d\sigma(\hat{s}) \quad (74)$$

avec $\alpha = \frac{1}{i\sqrt{2}k}$, On effectue le changement de variable $\hat{s} \rightarrow -\hat{s}$, comme

$$\begin{cases} \alpha \delta_{\ell,h}(\phi_i, -\hat{s}) &= \frac{k}{4\pi} \int_{\Gamma} \phi_i(x) \cdot (\hat{\theta} + i\varepsilon_{\ell} \hat{\varphi}) e^{-ikx \cdot \hat{s}} d\Gamma(x) \\ \overline{\alpha \delta_{\ell,h}(\phi_j, -\hat{s})} &= \frac{k}{4\pi} \int_{\Gamma} \phi_j(y) \cdot (\hat{\theta} - i\varepsilon_{\ell} \hat{\varphi}) e^{iky \cdot \hat{s}} d\Gamma(y) \end{cases} \quad (75)$$

on obtient finalement

$$(A'_{\ell,h})_{i,j} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} b^{reg}(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y). \quad (76)$$

avec

$$\begin{cases} b^{reg}(x, y, \phi_i, \phi_j) = \\ \int_{S^2} \overline{\Pi_{\ell}(\hat{s}, \phi_i)} \Pi_{\ell}(\hat{s}, \phi_j) e^{-ikx \cdot \hat{s}} e^{iky \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \end{cases} \quad (77)$$

et

$$\Pi_{\ell}(\hat{s}, \phi) = \frac{k}{4\pi} \phi \cdot \hat{v}_{\ell}(\hat{s}), \quad \hat{v}_{\ell}(\theta, \varphi) = \sqrt{2} \hat{e}_{\ell} = \hat{\theta} - i\varepsilon_{\ell} \hat{\varphi}. \quad (78)$$

Ainsi, il suffit d'appliquer l'algorithme FMM avec noyau régulier.

4.2 Rappel des formules multipolaires classiques

La base des formules multipolaires pour les opérateurs $K_{\ell,h}$ va être identique à celle utilisée classiquement en électromagnétisme. On rappelle ces formules dans ce paragraphe. Le point de départ est une formule d'addition dite de Gegenbauer pour le noyau $\frac{e^{ikr}}{r}$. On a si d et D sont deux vecteurs de l'espace avec $|D| > |d|$, $d = |d| \hat{d}$, $D = |D| \hat{D}$,

$$\frac{e^{ik|d+D|}}{ik|d+D|} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (2n+1) h_n^{(1)}(k|D|) j_n(k|d|) P_n(\hat{d} \cdot \hat{D}), \quad (79)$$

la série étant uniformément convergente sur tout compact de $\{(d, D), |D| > |d|\}$. En particulier on peut la dériver sur cet ensemble. Cette formule fait intervenir toute une flopée de fonctions spéciales à savoir

- P_n , le polynome de Legendre d'ordre n ,

- j_n , la fonction de Bessel sphérique d'ordre n ,
- $h_n^{(1)} = j_n + iy_n$, la fonction de Hankel sphérique d'ordre n et de première espèce, y_n étant la fonction de Neumann sphérique d'ordre n .

Pour une définition précise de ces fonctions, nous renvoyons le lecteur à [3] par exemple.

Le second ingrédient est une formule due à Funk-Hecke qui s'écrit

$$\frac{4\pi}{i^n} j_n(k|d|) P_n(\hat{D} \cdot \hat{d}) = \int_{S^2} P_n(\hat{D} \cdot \hat{s}) e^{-ikd \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \quad (80)$$

En rapprochant (80) de (79), on arrive à

$$\frac{e^{ik|d+D|}}{ik|d+D|} = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k|D|) \int_{S^2} P_n(\hat{D} \cdot \hat{s}) e^{-ikd \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}), \quad (81)$$

que l'on peut réécrire

$$\frac{e^{ik|d+D|}}{ik|d+D|} = \frac{1}{4\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{S^2} T^N(\hat{s}, D) e^{-ikd \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}), \quad (82)$$

avec

$$T^N(\hat{s}, D) = \sum_{n=0}^N i^n (2n+1) h_n^{(1)}(k|D|) P_n(\hat{D} \cdot \hat{s}) \quad (83)$$

Une des difficulté de l'algorithme FMM est que cette série s'avère violemment divergente lorsque N tend vers l'infini: c'est l'intégration contre une exponentielle qui la fait converger.

Pour ce qui concerne le noyau $\frac{\cos kr}{r}$ qui intervient dans les opérateurs intégraux de Després, on peut obtenir une formule identique en suivant exactement la même démarche. Il suffit de prendre la partie imaginaire de la formule de Gegenbauer et de réutiliser la formule de Funk-Hecke. On aboutit à

$$\frac{\cos k|d+D|}{k|d+D|} = \frac{1}{4\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, D) e^{-ikd \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}), \quad (84)$$

avec

$$T_r^N(\hat{s}, D) = - \sum_{n=0}^N i^n (2n+1) y_n(k|D|) P_n(\hat{D} \cdot \hat{s}) \quad (85)$$

Pour appliquer cette formule aux EID, on se donne deux points x, y , deux centres c_x et c_y , on écrit

$$x - y = [(x - c_x) - (y - c_y)] + [c_y - c_x] = d + D \quad (86)$$

et on suppose

$$|x - c_x| + |y - c_y| \leq \eta |c_y - c_x| < |c_y - c_x| \quad (87)$$

pour un certain η positif et plus petit que 1.

On obtient alors l'approximation

$$\frac{k \cos k|x - y|}{4\pi|x - y|} \approx \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, c_y - c_x) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} e^{+ik(y-c_y)\cdot\hat{s}} d\sigma(\hat{s}). \quad (88)$$

Comme nous l'avons dit, on montre qu'il est loisible de dériver ces formules. En particulier, si ϕ est un champ de vecteur, on a également la formule

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_x \frac{\cos k|x - y|}{4\pi|x - y|} \wedge \phi(y) \approx \\ \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, c_y - c_x) (-i\hat{s} \wedge \phi(y)) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} e^{+ik(y-c_y)\cdot\hat{s}} d\sigma(\hat{s}). \end{array} \right. \quad (89)$$

Une autre formule intéressante fait intervenir le tenseur dyadique de Maxwell (voir plus loin formules (98), (99)). Comme

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(Id_{3\times 3} + \frac{1}{k^2} \nabla_x \otimes \nabla_x \right) \phi(y) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} = \\ \left(Id_{3\times 3} - \hat{s} \otimes \hat{s} \right) \phi(y) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} = (\hat{s} \wedge (\phi(y) \wedge \hat{s})) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}}, \end{array} \right. \quad (90)$$

on obtient

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(Id_{3\times 3} + \frac{1}{k^2} \nabla_x \otimes \nabla_x \right) \frac{k \cos k|x - y|}{4\pi|x - y|} \cdot \phi(y) \approx \\ \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, c_y - c_x) (\hat{s} \wedge (\phi(y) \wedge \hat{s})) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} e^{+ik(y-c_y)\cdot\hat{s}} d\sigma(\hat{s}). \end{array} \right. \quad (91)$$

Ce sont ces deux formules qui seront à la base de la méthode FMM pour les opérateurs $K_{\ell,h}$.

Le dernier point à préciser est le choix du N nécessaire à une "bonne" approximation (nombre de multipôles). Dans la littérature on trouve que

$$N = N_1 = kd + C \log(kd + \pi) \quad (92)$$

donne une approximation en 10^{-C} pour la formule (88) pour $1 \leq kd \leq 200$ tandis que

$$N = N_1 + 2 \quad (93)$$

est nécessaire pour la même précision sur les approximations (89) et (91).

4.3 Formule multipolaire pour la matrice K_h

Cette formule s'obtient par application directe de ce qui précède. Par définition, on a

$$\begin{cases} (K_h)_{i,j} &= \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \phi_i(x) \cdot (\nabla_x G_r(x, y) \wedge \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \\ &= \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} b_T(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \end{cases} \quad (94)$$

On utilise alors simplement la formule (89) et on obtient

$$\begin{cases} b_T(x, y, \phi_i, \phi_j) \approx \\ \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, c_y - c_x) (-i\hat{s} \wedge \phi_j(y)) e^{-ik(x-c_x)\cdot\hat{s}} \cdot \phi_i e^{+ik(y-c_y)\cdot\hat{s}} d\sigma(\hat{s}). \end{cases} \quad (95)$$

4.4 Formule multipolaire pour la matrice T_h

La formule explicite de la matrice associée à l'opérateur T_h est donnée par

$$(T_h)_{i,j} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} k G_r(x, y) \left(\phi(x) \cdot \phi_j(y) - \frac{1}{k^2} \nabla_{\Gamma} \phi_j \cdot \nabla_{\Gamma} \phi_i \right) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \quad (96)$$

Cette formule fait apparaitre 3 termes de la forme

$$\int_{\Gamma} \int_{\Gamma} k G_r(x, y) \Pi(\phi_i(x)) \Pi(\phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y)$$

avec $\Pi\phi = \phi \cdot \hat{a}$, $\hat{a} = \hat{x}$, \hat{y} et \hat{z} , ainsi qu'un terme de la forme

$$\int_{\Gamma} \int_{\Gamma} k G_r(x, y) (\nabla_{\Gamma}(\phi_i(x))) (\nabla_{\Gamma}(\phi_j(y))) d\Gamma(x) d\Gamma(y).$$

L'utilisation de la formule (88) permettrait de calculer $T_h x_h$ à l'aide de 4 calculs multipolaires. On va montrer dans cette section que l'on peut se ramener à 2. En effet, si ϕ_i et ϕ_j ont leurs supports disjoints, on montre que

$$(T_h)_{i,j} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \left(Id_{3 \times 3} + \frac{1}{k^2} \nabla_x \otimes \nabla_x \right) k G_r(x, y) \cdot \phi_j(y) \cdot \phi_i(x) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \quad (97)$$

où $\mathcal{G}_r(x, y) = \left(Id_{3 \times 3} + \frac{1}{k^2} \nabla_x \otimes \nabla_x \right) G_r(x, y)$ est le tenseur dyadique de Maxwell (matrice 3×3)

$$\begin{cases} \mathcal{G}_r(x, y) = \left(Id_{3 \times 3} + \frac{1}{k^2} \nabla_x \otimes \nabla_x \right) G_r(x, y) = \\ F(|x - y|) Id_{3 \times 3} - (x - y) \otimes (x - y) H(|x - y|) \end{cases} \quad (98)$$

avec

$$\begin{cases} F(r) = \Re e \left(\frac{e^{ikr}}{r} \left(1 + \frac{i}{kr} - \frac{1}{k^2 r^2} \right) \right) \\ H(r) = \Re e \left(\frac{e^{ikr}}{r^3} \left(1 + \frac{3i}{kr} - \frac{3}{k^2 r^2} \right) \right) \end{cases} \quad (99)$$

et

$$((x - y) \otimes (x - y))_{i,j} = (x - y)_i (x - y)_j, \quad 1 \leq i, j \leq 3. \quad (100)$$

En utilisant la formule (91), on trouve la décomposition

$$\begin{cases} (T_h)_{i,j} = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} b_S(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \\ b_S(x, y, \phi_i, \phi_j) \approx \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(\hat{s}, c_y - c_x) \dots \\ \dots (\hat{s} \wedge (\hat{s} \wedge \phi_j)) e^{-ik(x-c_x) \cdot \hat{s}} \cdot \phi_i e^{+ik(y-c_y) \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}). \end{cases} \quad (101)$$

Et, on se ramène à 2 calculs multipolaires (un pour chaque projection des fonctions de base sur les vecteurs unitaires tangents de la sphère unité).

Le problème avec une telle formule est qu'elle n'est pas applicable pour des fonctions de base à supports non disjoints (singularité en $x = y$). L'idée va être de découper l'intégration sur les paires de triangles et de séparer le calcul en deux parties suivant la proximité des triangles. On commence par établir un premier lemme

Lemme 1: Soient T et T' deux triangles sans sommets communs, si

$$(T_h^{T,T'})_{i,j} = \int_T \int_{T'} k G_r(x, y) \left(\phi_i(x) \cdot \phi_j(y) - \frac{1}{k^2} \nabla_{T'} \phi_j \nabla_T \phi_i \right) dT(x) dT'(y), \quad (102)$$

$$(\tilde{T}_h^{T,T'})_{i,j} = \int_T \int_{T'} k \mathcal{G}_r(x, y) \cdot \phi_j(y) \cdot \phi_i(x) dT(x) dT'(y), \quad (103)$$

(\mathcal{G}_r défini dans (98)), et

$$\left\{ \begin{array}{l} k \left(R_h^{T,T'} \right)_{i,j} = \\ \int_{\partial T} \int_{T'} \tilde{G}_r(x, y) (\nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x)) \nabla_{T'} \phi_j(y) d\partial T(x) dT'(y) + \\ \int_T \int_{\partial T'} \tilde{G}_r(x, y) (\nu_{\partial T'}(y) \cdot \phi_j(y)) \nabla_T \phi_i(x) dT(x) d\partial T'(y) - \\ \int_{\partial T} \int_{\partial T'} \tilde{G}_r(x, y) (\nu_{\partial T'}(y) \cdot \phi_j(y)) (\nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x)) d\partial T(x) d\partial T'(y) \end{array} \right. \quad (104)$$

avec

$$\tilde{G}_r(x, y) = G_r(x, y), \quad \text{sur } (x, y) \in T \times T' \quad (105)$$

alors, on a

$$\left(T_h^{T,T'} \right)_{i,j} = \left(\tilde{T}_h^{T,T'} \right)_{i,j} + \left(R_h^{T,T'} \right)_{i,j}. \quad (106)$$

La preuve s'appuie sur des intégrations par parties. La distinction entre G_r et \tilde{G}_r qui sont identiques sur l'ensemble d'intégration est ici sans objet mais apparaîtra plus claire par la suite.

Si

$$I_{i,j} = \int_T \int_{T'} G_r(x, y) \nabla_T(\phi_i)(x) \nabla_{T'}(\phi_j)(y) dT(x) dT'(y),$$

on a

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{i,j} = - \int_T \int_{T'} \nabla_x G_r(x, y) \phi_i(x) \nabla_{T'}(\phi_j)(y) dT(x) dT'(y) \\ + \int_{\partial T} \int_{T'} G_r(x, y) \nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x) \nabla_{T'}(\phi_j)(y) d\partial T(x) dT'(y) \end{array} \right.$$

soit

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{i,j} = + \int_T \int_{T'} \nabla_y \otimes \nabla_x G_r(x, y) \phi_i(x) \phi_j(y) dT(x) dT'(y) \\ - \int_T \int_{\partial T'} \nabla_x G_r(x, y) \cdot \phi_i(x) \nu_{\partial T'}(y) \cdot \phi_j(y) dT(x) d\partial T'(y) \\ + \int_{\partial T} \int_{T'} G_r(x, y) \nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x) \nabla_{T'}(\phi_j)(y) d\partial T(x) dT'(y) \end{array} \right.$$

ou encore

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{i,j} = - \int_T \int_{T'} \nabla_x \otimes \nabla_x G_r(x, y) \phi_i(x) \phi_j(y) dT(x) dT'(y) \\ + \int_T \int_{\partial T'} G_r(x, y) \nabla_T(\phi_i)(x) \nu_{\partial T'}(y) \cdot \phi_j(y) dT(x) d\partial T'(y) \\ - \int_{\partial T} \int_{\partial T'} G_r(x, y) \nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x) \nu_{\partial T'}(y) \cdot \phi_j(y) d\partial T(x) d\partial T'(y) \\ + \int_{\partial T} \int_{T'} G_r(x, y) \nu_{\partial T}(x) \cdot \phi_i(x) \nabla_{T'}(\phi_j)(y) d\partial T(x) dT'(y) \end{array} \right.$$

et le lemme en découle immédiatement.

On peut expliciter un peu plus la forme de la matrice $R_h^{T,T'}$ pour les fonctions de base particulière avec lesquelles on a choisit de travailler. Un calcul simple montre que

$$\left\{ \begin{array}{l} k \left(R_h^{T,T'} \right)_{i,j} = \\ \epsilon_i^T \epsilon_j^{T'} \int_{A_i} \int_{T'} \tilde{G}_r(x, y) \frac{1}{|A_i|} \frac{1}{|T'|} dA_i(x) dT'(y) + \\ \epsilon_i^T \epsilon_j^{T'} \int_T \int_{A_j} \tilde{G}_r(x, y) \frac{1}{|A_j|} \frac{1}{|T|} dT(x) dA_j(y) - \\ \epsilon_i^T \epsilon_j^{T'} \int_{A_i} \int_{A_j} \tilde{G}_r(x, y) \frac{1}{|A_j|} \frac{1}{|A_j|} dA_i(x) dA_j(y) \end{array} \right. \quad (107)$$

où

$$\epsilon_i^T = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{si } T = T_{A_i}^+ \\ -1 & \text{si } T = T_{A_i}^- \\ 0 & \text{sinon} \end{array} \right. \quad (108)$$

A_i est l'arête associée au degré de liberté i , $|A_i|$ sa longueur et enfin $|T|$ la surface du triangle T . À partir de cette expression, il est facile d'établir le résultat suivant

Lemme 2 *Pour toute fonction $\tilde{G}_r(x, y)$ régulière, si $R_h^{T,T'}$ sont les matrices données par (107), on a*

$$\sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h} \left(R_h^{T,T'} \right)_{i,j} = 0 \quad (109)$$

C'est immédiat car la somme contient $4 \times 3 = 12$ termes non nuls deux à deux opposés (ce résultat est d'ailleurs vrai dès que les fonctions de base

vérifient les conditions d'appartenance à $H(div)$). Le fait d'avoir énoncé ce résultat pour une fonction \tilde{G}_r quelconque et non pour la fonction G_r égale au noyau de Green tient à ce que les termes diagonaux de la matrice n'ont alors pas de sens.

Nous avons maintenant tous les éléments pour construire l'assemblage adapté au calcul multipolaire à deux composantes pour S . On rappelle que l'on a découpé l'ensemble des couples de triangles en deux parties disjointes, à savoir

$$\mathcal{T}_h = \mathcal{N}_T \oplus \mathcal{F}_T \quad (110)$$

\mathcal{N}_T étant l'ensemble des couples de triangles proches tandis que \mathcal{F}_T est l'ensemble des triangles lointains.

On suppose que les couples de triangles lointains sont uniformément séparés de la diagonale (ce qui est vrai pour le découpage à partir de boîtes). Il existe alors une distance munimale d_0 ,

$$d_0 = \inf (|x - y|, x \in T, y \in T', (T, T') \in \mathcal{F}_T) \quad (111)$$

et on pose

$$\tilde{G}_r(x, y) = \begin{cases} G_r(x, y) & \text{si } |x - y| > 0.9 d_0 \\ 0 & \text{si } |x - y| \leq 0.9 d_0 \end{cases} \quad (112)$$

le facteur 0.9 étant complètement arbitraire. On écrit

$$(T_h)_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h} (T_h^{T,T'})_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{T}_h \times \mathcal{T}_h} (T_h^{T,T'})_{i,j} + (R_h^{T,T'})_{i,j}$$

(le terme rajouté étant nul d'après le lemme 2). On utilise alors le découpage puis le lemme 1 pour écrire

$$(T_h)_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{N}_T} \left((T_h^{T,T'})_{i,j} + (R_h^{T,T'})_{i,j} \right) + \sum_{(T,T') \in \mathcal{F}_T} (\tilde{T}_h^{T,T'})_{i,j}.$$

On a donc finalement

$$(T_h)_{i,j} = (T_h^{near})_{i,j} + (T_h^{far})_{i,j} \quad (113)$$

avec

$$(T_h^{near})_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{N}_T} \left((T_h^{T,T'})_{i,j} + (R_h^{T,T'})_{i,j} \right) \quad (114)$$

et

$$(T_h^{far})_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{F}_T} (\tilde{T}_h^{T,T'})_{i,j}. \quad (115)$$

4.5 Formules multipolaires pour les matrices $K_{\ell,h}$

Il nous suffit maintenant d'assembler les différents résultats obtenus dans les paragraphes précédents. On rappelle que

$$K_{\ell,h} = -\varepsilon_\ell T_h - K_h - \frac{1}{2}V_h \quad (116)$$

avec

$$(V_h)_{i,j} = \int_{\Gamma} (\nu(x) \wedge \phi_i(x)) \cdot \phi_j(x) d\Gamma(x) \quad (117)$$

et $\varepsilon_\ell = -1$ pour $\ell = 1$ et 1 pour $\ell = 2$. On découpe alors la matrice $K_{\ell,h}$ en deux parties

$$(K_{\ell,h})_{i,j} = (K_{\ell,h}^{near})_{i,j} + (K_{\ell,h}^{far})_{i,j} \quad (118)$$

avec

$$(K_{\ell,h}^{near})_{i,j} = \varepsilon_\ell (T_h^{near})_{i,j} + (K_h^{near})_{i,j} + \frac{1}{2}(V_h)_{i,j} \quad (119)$$

où T_h^{near} est donnée dans (114) via (102)-(107)-(112) et K_h^{near} a une définition analogue

$$\begin{cases} (K_h^{near})_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{N}_T} (K_h^{T,T'})_{i,j} \\ (K_h^{T,T'})_{i,j} = \int_T \int_{T'} \phi_i(x) \cdot (\nabla_x G_r(x,y) \wedge \phi_j(y)) dT(x) dT'(y). \end{cases} \quad (120)$$

Pour la matrice lointaine, on a

$$(K_{\ell,h}^{far})_{i,j} = -\varepsilon_\ell (\tilde{T}_h^{far})_{i,j} - (K_h^{far})_{i,j} \quad (121)$$

où \tilde{T}_h^{far} est donnée par (115) via (103)-(98) tandis que K_h^{far} a pour expression

$$(K_h^{far})_{i,j} = \sum_{(T,T') \in \mathcal{F}_T} (K_h^{T,T'})_{i,j} \quad (122)$$

Ouf! Sur la partie lointaine, on peut utiliser les formules multipolaires que nous avons établies. Si

$$\Gamma_{\mathcal{F}}^2 = \bigcup_{(T,T') \in \mathcal{F}_T} T \times T' \quad (123)$$

on a

$$-\varepsilon_\ell (K_{\ell,h}^{far})_{i,j} = \iint_{\Gamma_{\mathcal{F}}^2} b_\ell(x,y, \phi_i(x), \phi_j(y)) d\Gamma(x) d\Gamma(y) \quad (124)$$

avec

$$\begin{cases} b_\ell(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) = \\ \mathcal{G}_r(x, y) \cdot \phi_i(x) \cdot \phi_j(y) + \varepsilon_\ell(\nabla_x G_r(x, y) \wedge \phi_i(x) \cdot \phi_j(y)) \end{cases} \quad (125)$$

Et on trouve d'après (89) et (91)

$$\begin{cases} b_\ell(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) = \frac{k^2}{(4\pi)^2} \int_{S^2} T_r^N(c_y - c_x, \hat{s}) \dots \\ \dots \vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi_i(x)) e^{-ik(x-c_x) \cdot \hat{s}} \cdot \phi_j(y) e^{ik(y-c_y) \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \end{cases} \quad (126)$$

avec

$$\vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi_i) = ((\hat{s} \wedge (\phi_i \wedge \hat{s})) + i\varepsilon_\ell(\phi_i \wedge \hat{s})) \quad (127)$$

Pour conclure, on utilise une remarque de K. Mer que l'on résume dans le lemme suivant

Lemme 3 *Si Φ et Φ' sont deux vecteurs réels, on a l'identité remarquable*

$$\frac{k^2}{(4\pi)^2} \vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi) \cdot \phi' = \overline{\vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi)} \Pi_\ell(\hat{s}, \phi') \quad (128)$$

où Π_ℓ est défini dans (78) c'est à dire

$$\Pi_\ell(\hat{s}, \phi) = \frac{k}{4\pi} \phi \cdot \hat{v}_\ell(\hat{s}), \quad \hat{v}_\ell(\theta, \varphi) = \hat{\theta} - i\varepsilon_\ell \hat{\varphi}. \quad (129)$$

On utilise ce lemme pour aboutir à la formule

$$\begin{cases} b_\ell(x, y, \phi_i(x), \phi_j(y)) = \int_{S^2} T_r^N(c_y - c_x, \hat{s}) \dots \\ \dots \overline{\vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi_i(x))} e^{-ik(x-c_x) \cdot \hat{s}} \Pi_\ell(\hat{s}, \phi_j(y)) e^{ik(y-c_y) \cdot \hat{s}} d\sigma(\hat{s}) \end{cases} \quad (130)$$

qui est de bien de la forme requise pour appliquer l'algorithme multipolaire.

La preuve du lemme 3 est comme suit. On écrit dans la base $(\hat{s}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$

$$\phi = \phi_s \hat{s} + \phi_\theta \hat{\theta} + \phi_\varphi \hat{\varphi}$$

et

$$\begin{cases} \hat{s} \wedge (\phi \wedge \hat{s}) = \phi_\theta \hat{\theta} + \phi_\varphi \hat{\varphi}, \\ \phi \wedge \hat{s} = \phi_\varphi \hat{\theta} - \phi_\theta \hat{\varphi}, \end{cases}$$

d'où,

$$\begin{cases} \vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi) &= (\phi_\theta + i\varepsilon_\ell\phi_\varphi)\hat{\theta} + (\phi_\varphi - i\varepsilon_\ell\phi_\theta)\hat{\varphi} \\ &= (\phi_\theta + i\varepsilon_\ell\phi_\varphi)(\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}). \end{cases}$$

Maintenant si

$$\phi' = \phi'_s\hat{s} + \phi'_\theta\hat{\theta} + \phi'_\varphi\hat{\varphi},$$

que l'on réécrit

$$\phi' = \phi'_s\hat{s} + \frac{1}{2}(\phi'_\theta - i\varepsilon_\ell\phi'_\varphi)(\hat{\theta} + i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) + \frac{1}{2}(\phi'_\theta + i\varepsilon_\ell\phi'_\varphi)(\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}),$$

comme

$$\begin{cases} (\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) \cdot \hat{s} = 0 \\ (\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) \cdot (\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) = 1 - 1 = 0 \\ (\hat{\theta} - i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) \cdot (\hat{\theta} + i\varepsilon_\ell\hat{\varphi}) = 1 + 1 = 2 \end{cases}$$

on a

$$\vec{\Pi}_\ell(\hat{s}, \phi) \cdot \Phi' = (\phi_\theta + i\varepsilon_\ell\phi_\varphi)(\phi'_\theta - i\varepsilon_\ell\phi'_\varphi)$$

qui n'est autre que (128). Le lemme est démontré.

4.6 Conséquences sur l'intégration sur la sphère

Comme nous l'avons dit, un des points clé de l'efficacité de la méthode multipôle réside dans le choix des formules de quadrature utilisées pour l'intégration sur la sphère unité. Ce maillage peut en effet être adapté à la taille de la boîte considérée au prix de l'utilisation d'opérateurs d'interpolation et de filtrage permettant de passer d'un niveau à l'autre. Pour la FMM classique, on montre que les champs proches et lointains sont des combinaisons linéaires finies d'harmoniques sphériques dont le nombre dépend, pour une précision donnée, précisément de la taille de la boîte à laquelle ils sont attachés. On peut alors utiliser des procédures maintenant standard pour effectuer filtrage et interpolation, [4], [6]. Il existe toutefois un point nouveau dans l'algorithme FMM que nous venons de présenter qui tient à ce que l'on ne manipule pas directement les champs mais leurs projections sur la sphère unité et cette opération de projection n'est pas neutre quant au contenu en harmoniques sphériques de la fonction projetée. On peut toutefois adapter les algorithmes de filtrage et d'interpolation pour tenir compte de la projection. Sur cet aspect, nous renvoyons le lecteur à [8].

References

- [1] N. Bartoli and F. Collino. Integral equations via saddle point problem for 2d electromagnetic problems. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, To appear 2000.
- [2] F. Collino and B. Després. Integral equations via saddle point problems for time-harmonic Maxwell's equations. *SIAM J. Appl. Math.*, submitted.
- [3] D. Colton and P. Kreiss. *Inverse Acoustic Electromagnetic Scattering Theory*. Applied Mathematical Science. Springer-Verlag, 1992.
- [4] E. Darve. The fast multipole method: Numerical implementation. *Journal of Comput. Physics*, 160(1):196–240, May 2000.
- [5] B. Després. Quadratic functional and integral equations for harmonic wave problems in exterior domains. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 31(6):679–732, 1997.
- [6] R. Jakob-Chien and K. Alpert. Fast spherical filter with uniform resolution. *Journal of Comput. Physics*, 136(2):580–584, September 1987.
- [7] K. Mer-Nkonga. Reformulation des équations intégrales de després, validation et optimisation du code maxim. Technical Report DO 280 99, C.E.A., 31-33 rue de la fédération, 75752 Paris cedex 15, France, 1999.
- [8] K. Mer-Nkonga. La méthode multipôle appliquée aux équations intégrales de després. Technical report, C.E.A., 31-33 rue de la fédération, 75752 Paris cedex 15, France, 2000.