A PARALLEL LEAST SQUARE SPECTRAL ELEMENT METHOD FOR THE MAXWELL EQUATIONS IN THE FREQUENCY DOMAIN

CARLO PITZIANTI$^{(a,b)}$, FABIO MAGGIO$^{(a)}$, GIUSEPPE MAZZARELLA$^{(b)}$

(a) Center for Advanced Studies, Research and Development in Sardinia (CRS4)
(b) Dipartimento di Ingegneria Elettrica ed Elettronica (DIEE) Università di Cagliari
E-Mail: c.pitzianti@diee.unica.it[1]

SOMMARIO. We propose a high order numerical solver for the Maxwell equations in the frequency domain in the div-curl form. The least squares approach preserve the solution from the spurious modes, present in the classical finite element solutions. Most examples of this non physical solution exist in literature, and elimination of this spurious effects is a subject of great interest. The other object of this articles is the combination of the least square approach with the spectral element method (SEM). The latter approach is a numerical technique for the solution of partial differential equations (PDE's), which has recently gained popularity in field like computational fluid-dynamics and solid mechanics. Least squares spectral elements are merged with a domain decomposition approach, and each resulting sub-problem is assigned to a processor of a parallel computer. The parallel implementation can provide significant reduction of CPU-times. In the authors opinion this approach can be fruitfully used for the treatment of large scale electromagnetic problems.

INTRODUZIONE

Consideriamo il sistema delle equazioni di Maxwell nel dominio della frequenza del primo ordine, definite su un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ con le seguenti condizioni al contorno di conduttore elettrico perfetto (CEP)

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \bigtriangledown \times H & = & \jmath\omega\,\varepsilon\,E + J_e & Legge\,di\,Faraday - Neumann \\ \bigtriangledown \times E & = & -M_e - \jmath\omega\,\mu H & Legge\,di\,Maxwell - Ampere \\ \bigtriangledown \cdot \varepsilon\,E & = & \rho_e & Legge\,di\,Gauss\,(CE) \\ \bigtriangledown \cdot \mu\,H & = & \rho_m & Legge\,di\,Gauss\,(CM) \end{array} \right. \tag{1}$$

$$\left\{ \begin{array}{rcccccccl} n \times E & = & 0 & \Rightarrow & E_t & = & 0, & \frac{\partial E_n}{\partial n} & = & 0 & su\,\partial\Omega \\ n \cdot (\mu\,H) & = & 0 & \Rightarrow & H_n & = & 0, & \frac{\partial H_t}{\partial n} & = & 0 & su\,\partial\Omega \end{array} \right. \tag{2}$$

Nel caso 3D, il sistema (1) corrisponde a 8 equazioni scalari (complesse) e solo 6 incognite e risulta quindi numericamente sovradeterminato. La soluzione comunemente usata consiste nel considerare ridondanti le equazioni della divergenza e risolvere due curl-equations del primo ordine o un'equazione curl-curl del secondo ordine. Questa approccio può purtroppo portare all'insorgenza di modi spuri, ovvero soluzioni che non soddisfano le equazioni della divergenza e non coincidono con le soluzioni reali di un risuonatore o di una struttura guidante. Il problema dei modi spuri, comune agli approcci del primo e secondo ordine, può rendere un particolare modello numerico inutilizzabile. Inoltre mantenendo l'equazione della divergenza si preserva l'ellitticità di (1): questo è un vantaggio considerevole per i metodi di

[1] Lavoro finanziato dall'ASI (contratto ASI/I/R34/00)

griglia, che assicurano in questo caso tassi di convergenza migliori. Il metodo dei minimi quadrati [3] costituisce un approccio naturale al problema

IL METODO DEI MINIMI QUADRATI

Consideriamo il problema semplificato

$$\begin{cases} \nabla \times u &= \omega \quad in \quad \Omega \\ \nabla \cdot u &= \rho \quad in \quad \Omega \\ n \cdot u &= 0 \quad su \quad \Gamma_1 \\ n \times u &= 0 \quad su \quad \Gamma_2 \end{cases} \tag{3}$$

dove n è la normale uscente a $\partial\,\Omega$. Definiamo lo spazio V delle funzioni reali a quadrato integrabili con derivate a quadrato integrabili

$$V_R \equiv \left\{ u:\ \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \mid \int_\Omega (u_i)^2 d\Omega < +\infty \ e \ \int_\Omega (\frac{\partial\, u_i}{\partial\, x_j})^2 d\Omega < +\infty \ \forall\, i,j = 1,...,d \right\}$$

Definiamo quindi

$$W_{DC} \equiv \{u \in V_R \mid u \cdot n = 0\, su\, \Gamma_1\, e\, u \times n = 0\, su\, \Gamma_2\}$$

e introduciamo il funzionale reale $I : V_R \to \mathbb{R}$ definito come

$$I(w) \equiv \|\nabla \times w - \omega\|_0^2 + \|\nabla \cdot w - \rho\|_0^2 = \int_\Omega (\nabla \times w - \omega)^2\, d\Omega + \int_\Omega (\nabla \cdot w - \rho)^2\, d\Omega \tag{4}$$

Chiameremo soluzione nel senso dei minimi quadrati di (3) il vettore $u \in V_R$ che minimizza la seguente espressione:

$$\lim_{\tau \to 0} \frac{d}{d\tau} I(u + \tau\, v) = 0 \ \ \forall v \in V_R \tag{5}$$

Il problema (5) equivale alla ricerca di $u \in V_R$ tale che $\forall v \in V_R$

$$B(u\,, v) = L(v) \tag{6}$$

dove

$$B(u, v) = \int_\Omega [(\nabla \times u) \cdot (\nabla \times v) + (\nabla \cdot u)\,(\nabla \cdot v)]\, d\Omega \tag{7}$$

e

$$L(v) = \int_\Omega [\omega \cdot (\nabla \times v) + \rho\,(\nabla \cdot v)]\, d\Omega \tag{8}$$

Nel caso elettromagnetico (1) definiamo lo spazio delle funzioni complesse con modulo a quadrato integrabile e derivate con modulo a quadrato integrabile:

$$V_C \equiv \left\{ u : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}^d \mid \int_\Omega |u_i|^2\, d\Omega < +\infty \ e \ \int_\Omega \left| \frac{\partial\, u_i}{\partial\, x_j} \right|^2 d\Omega < +\infty \ \forall\, i,j = 1,...,d \right\}$$

e lo spazio W_{EM} delle coppie di campi vettoriali complessi appartenenti a V_C e soddisfacenti le condizioni al bordo introdotte in (1)

$$W_{EM} \equiv \{(E, H)\ :\ E \in V_C,\ H \in V_C \ \mid n \times E = 0,\ \ n \cdot (\mu\, H) = 0\, su\, \partial\, \Omega\}$$

Definiamo poi il funzionale

$$I(E, H) \equiv \int_\Omega |\nabla \times H - \jmath\omega\, \varepsilon\, E - J_e|^2\, \Omega + \int_\Omega |\nabla \times E + M_e + \jmath\omega\, \mu H|^2\, \Omega +$$

$$+\int_{\Omega} |\nabla \cdot \mu\, H - \rho_m|^2\, \Omega + \int_{\Omega} |\nabla \cdot \varepsilon\, E - \rho_e|^2\, \Omega \tag{9}$$

Definiamo soluzione nel senso dei minimi quadrati di (1) la coppia $E, H \in W_{EM}$ tale che

$$\lim_{\tau \to 0} \frac{d}{d\tau} I((E,H) + \tau\,(\widetilde{E}, \widetilde{H})) = \mathrm{n} \qquad \forall v(\widetilde{E}, \widetilde{H}) \in V \tag{10}$$

Il problema risultante è ancora del tipo:

$$B_{EM}((E,H)\,,(\widetilde{E}, \widetilde{H})) = L_{EM}((\widetilde{E}, \widetilde{H})) \qquad \forall(\widetilde{E}, \widetilde{H}) \in W_{EM} \tag{11}$$

dove la forma esplicita di $B_{EM}((E,H)\,,(\widetilde{E}, \widetilde{H}))$ e $L_{EM}((\widetilde{E}, \widetilde{H}))$ è ricavabile da (9) e (10)

IL METODO DEGLI ELEMENTI SPETTRALI (SEM)

I metodi di griglia, come ad esempio il metodo degli elementi finiti, sono indipendenti dal tipo di dominio su cui il solutore agisce, a differenza dei metodi semianalitici quale ad esempio il metodo dei momenti che richiede modifiche sostanziali al solutore quando il dominio viene modificato anche minimamente. Un solutore basato sugli elementi finiti può trattare indifferentemente problemi di propagazione guidata e di propagazione libera: è sufficiente cambiare le condizioni al contorno del problema e definire le proprietà elettromagnetiche dei diversi mezzi presenti nel dominio. Uno svantaggio importante dei metodi di griglia è la notevole occupazione di memoria richiesta. Nel caso 3D il trattamento del sistema (1) tramite metodi di griglia comporta 12 gradi di liberta per ogni nodo. Considerando che occorrono diversi grid-points per lunghezza d'onda, nel caso 3D si hanno problemi computazionali con un'occupazione di memoria dell'ordine delle centinaia di Mbytes. Questo implica l'uso di elaboratori di potenza adeguata. Nelle nostre prove abbiamo utilizzato una macchina parallela IBM SP e dei cluster di PC con sistema operativo Linux. Quest'ultima soluzione rappresenta un ottimo compromesso tra potenza di calcolo e contenimento dei costi.
Il metodo degli elementi spettrali [1], da noi usato, è un metodo di ordine elevato che può essere considerato come un estensione del metodo degli elementi finiti. Il vantaggio dei SEM rispetto ai FEM è che i secondi possono giocare solo sul raffinamento della griglia per aumentare l'accuratezza della soluzione numerica, mentre i primi possono trarre vantaggio anche dalla scelta del grado dei polinomi interpolanti usati per costruire la soluzione numerica, che viene scelto dall'utente a run-time. La maggiore flessibilita' dei SEM rispetto ai FEM permette di ridurre notevolmente il costo computazionale del problema [2]. Nella discretizzazione basata sugli elementi spettrali il dominio computazionale viene diviso in una famiglia di quadrilateri (2D) o esaedri (3D). Successivamente si mappa ogni quadrilatero del dominio fisico in un dominio di riferimento. In questo dominio vengono generati automaticamente i nodi supplementari in numero corrispondente al grado spettrale scelto. La soluzione dell'equazione alle derivate parziali, viene approssimata tramite una funzione continua polinomiale a tratti di grado fissato dall'utente. Vengono poi utilizzate opportune formule per la risoluzione numerica delle derivate e degli integrali che compaiono nella formulazione del problema. Il problema (11) viene cosi' trasformato in un problema algebrico con una matrice fortemente sparsa, non strutturata e di grandi dimensioni. Per risolvere in modo efficace il problema, il dominio computazionale viene diviso in un numero di sottodomini pari al numero di processori a disposizione: questo passo viene saltato se non si dispone di una macchina parallela. La decomposizione avviene secondo il principio di bilanciare al meglio

il carico di lavoro e di minimizzare le comunicazioni tra i processori, che è causa di rallentamento nel processo di soluzione. Ogni processore risolve solo una parte del sistema e il tempo di calcolo si riduce di conseguenza.

VALIDAZIONE NUMERICA

La validazione numerica effettuata fino a questo momento riguarda l'analisi dell'accuratezza della soluzione numerica per il problema div-curl (3). Per effettuare il test abbiamo considerato un semplice caso 2D, con $\Omega = (0,1)^2$, con ρ, ω e condizioni al bordo fissate in modo da avere la soluzione analitica:

$$u_x = sin(2\pi\, a(x - x_0))\, sin(2\pi\, b(y - y_0)) \quad u_y = sin(2\pi\, a(x - x_0))\, sin(2\pi\, b(y - y_0))$$

in cui a, b, x_0, y_0 sono costanti di normalizzazione. Per problemi con soluzione analitica, ci si aspetta una convergenza esponenziale rispetto a N, il grado delle funzioni spettrali. Nella figura a sinistra, e' mostrato l'andamento dell'errore al crescere del grado spettrale del solutore basato sugli elementi spettrali, mentre a destra viene mostrato l'andamento, rispetto al decrescere di h (dimensione lineare tipica dei quadrilatteri che compongono la mesh passo della griglia), di un solutore bastato sugli elementi finiti. Entrambi verificano l'andamento previsto, con una maggiore accuratezza del solutore spettrale rispetto a quello ad elementi finiti. In entrambi i grafici è riportata anche l'accuratezza con cui l'equazione della divergenza è soddisfatta; come prevedibile, l'accuratezza è minore di quella relativa alla soluzione, trattandosi di una grandezza misurata sulla base delle derivate prime della soluzione numerica.

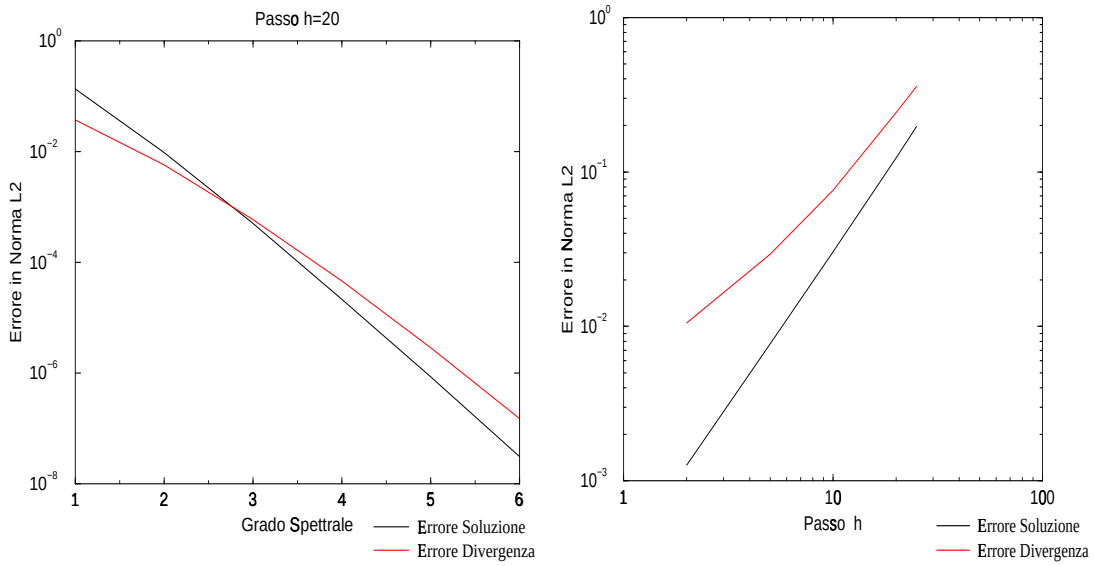

FIGURA 1. Validazione numerica

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

[1] Y. Maday and A. T. Patera, "Spectral element methods for the Navier-Stokes equations, in State of the Art Surveys in Computational Mechanics, A. K. Noor, ed., ASME, New York (1989).

[2] F. Casadei, G. Fotia, E. Gabellini, F. Maggio, and A. Quarteroni"A hybrid spectral-element/finite-element method for complex wave propagation applications", to appear in "Computer methods in applied mechanics and engineering" (2000)

[3] B.N. Jiang, J.Wu, L.A. Povinelli, "The origin of spurious solutions in computational electromagnetics" Journal of computational physics (1995)