

Modélisation PIC : Principe et application aux plasmas froids

Serge Huberson

Institut Pprime, CNRS - Université de Poitiers
11 Bd Marie et Pierre Curie, BP 30179, F86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France.
courriel : serge.huberson@univ-poitiers.fr

Histoire et développement de la méthode

Les mécaniciens, et parmi eux les mécaniciens des fluides, apprennent très tôt qu'il existe deux « systèmes » pour décrire les objets qu'ils étudient : les coordonnées Eulériennes et les coordonnées Lagrangiennes. Cette dualité ne les gêne pas trop car l'essentiel du cours de mécanique élémentaire se fait avec les premières et ce n'est qu'en abordant certains aspects particuliers de la mécanique des fluides, ou encore la théorie des grandes déformations de solides, qu'ils utilisent les secondes. En passant à la simulation numérique, la même dualité se retrouve avec la nécessité de discrétiser les problèmes pour les transformer en une série de résolution d'équations algébriques, de préférence linéaires. Il est ainsi possible de décrire un écoulement, soit à partir des observations réalisées aux nœuds d'une grille fixe, soit en suivant le mouvement des particules qui composent le fluide. Cette dernière classe de méthodes est dite particulaire, avec une ambiguïté : il ne s'agit pas des particules élémentaires de la physique, mais de particules au sens du langage courant : « une petite quantité de fluide » qui se déforme et que l'on suit dans son mouvement avec une seule hypothèse : la particule ne se fragmente pas.

La discrétisation des écoulements de fluides par des méthodes particulières remonte, entre autre, au travail d'Harlow à Los Alamos il y a 50 ans. Les particules utilisées transportaient de la masse et on finalement conduit à la définition des méthodes MAC pour Markers and Cells plus connu pour la discrétisation pression / vitesse que pour leur caractère particulaire. Ultérieurement, Harlow s'est intéressé au transport du tourbillon pour aboutir à la définition des méthodes VIC, Vortex in Cells, et CIC, Clouds in Cells, qu'il a développées avec J.P. Christiansen. La méthode a été par la suite étendue aux écoulements tridimensionnels par Bünemann, Couet et Leonard. Les terminologies présentées ici sont sans doute légèrement inhabituelle, mais les méthodes correspondantes sont les vraies transpositions à la mécanique des fluides des méthodes PIC des plasmas. Le terme PIC, bien qu'impropre pour un mécanicien des fluides, sera donc utilisé dans ce résumé.

Construction d'une méthode PIC pour la MFN

Les méthodes PIC utilisées aujourd'hui ont finalement une architecture très proche de la méthode initialement développée par Harlow et Christiansen avec quatre étapes. Chacune de ces étapes présente des spécificités et a fait l'objet d'études particulières. Toutes concourent à la qualité de la modélisation avec une égale importance.

- Projection du champ de tourbillon (vorticité) des particules sur la grille La méthode PIC initiale utilise une projection des particules sur la grille d'ordre 1. La méthode développée ultérieurement par Harlow et Christiansen est d'ordre 2. une méthode de Spleen cubique a été suggérée par Williamson et une correction d'anti-diffusion par Jollès. Cette dernière forme conduit à une projection d'ordre 4 dont une forme algébrique est la fonction baptisée M4' par Cotet-Koumoutsakos. Toutefois, ces améliorations ne suffisent pas et une forme adaptée de la méthode de renormalisation initialement proposée par Jingle et Monaghan pour les méthodes SPH doit encore corriger l'effet de variation de la densité de particules par mailles.
- Calcul de la fonction de courant sur la grille et dérivation de la vitesse Dès la première version de la méthode CIC, Christiansen s'est intéressé aux améliorations des performances vis-a-vis des besoins en temps CPU. Sur un maillage régulier, le calcul de la fonction de courant peut être largement accéléré par

l'usage de transformation de Fourier rapide. Cette méthode fonctionne également pour des écoulements tridimensionnels.

- interpolation de la vitesse sur les particules Cette étape est définie dans la méthode CIC par une inversion de l'opérateur de projection. On peut toutefois montrer facilement qu'il s'agit en fait d'une interpolation classique. La construction de schémas d'ordre élevés peut donc se faire en suivant indifféremment l'un ou l'autre de ces points de vue. Les méthodes actuelles utilisent des schémas d'ordre 4.
- déplacement des particules Le déplacement des particules est réalisé dans la méthode initiale par un schéma d'intégration en temps du second ordre. C'est encore aujourd'hui le plus utilisé, même si l'on sait que ce schéma introduit une erreur de diffusion dans les régions où les lignes de courant présentent une courbure forte. Ceci détériore la précision des calculs sur le long terme et un schéma d'ordre plus élevé est préférable pour les écoulements confinés type cavité.

A ces étapes, il faut ajouter la prise en compte d'éventuels termes sources comme par exemple l'opérateur de diffusion du tourbillon pour la résolution des équations de Navier-Stokes. Il est préférable d'utiliser pour cela le champ calculé sur la grille ce qui permet l'usage de méthode de discrétisation type différences finies et la conservation de la précision des calculs.

Enfin, il faut se rappeler que l'introduction d'un maillage cartésien régulier ramène au premier plan deux problèmes que la méthode particulaire sans maillage avait résolus :

- Les conditions aux limites externes : les premières méthodes PIC utilisent des hypothèses de périodicité pour les éliminer, ou encore des conditions approchées respectant les conditions de compatibilité avec la circulation. Les méthodes les plus récentes utilisent les techniques dites Fast Vortex comme indiqué un peu plus loin.
- Les conditions aux limites à l'intérieur du domaine pour lesquelles les méthodes de frontières immergées ont été introduites par Peskin il y a plus de quarante ans. Ces techniques peuvent également être rapprochées des méthodes de corrections locales type PPM de Hockney-Eastwood.

Trois bonnes raisons d'utiliser la méthode PIC.

La première motivation pour utiliser la méthode PIC en mécanique des fluides est à l'origine du travail original de Christiansen. Les méthodes particulaires sans maillage nécessitent le calcul d'intégrales de convolution qui peuvent être très coûteuses en temps CPU. Des méthodes de calculs rapides basées sur des développements multipolaires n'ont été vraiment opérationnelle que dix ans plus tard. Cependant, et en particulier pour des calculs tridimensionnels, même les méthodes dites Fast Vortex restent d'un coût CPU élevé et l'on s'oriente aujourd'hui vers des méthodes hybrides utilisant la méthode PIC pour la résolution d'équations dont les conditions aux limites sont calculées avec des méthodes Fast Vortex.

La deuxième motivation est la possibilité de construire naturellement des méthodes hybrides utilisant simultanément sur un même maillage des méthodes PIC et des méthodes classiques de résolution d'équations représentant, soit une autre partie de l'écoulement -par exemple les effets de la compressibilité-, soit une autre partie du problème physique comme la présence de charges électriques.

La troisième motivation est le développement de méthodes multi-échelle. On sait aujourd'hui qu'il sera encore longtemps -peut-être définitivement- nécessaire de recourir à des résolutions multiples car il est impossible de décrire les écoulements turbulents par exemple en fixant la discrétisation sur les plus petites échelles présentes. La construction de méthode multi-échelle est largement facilitée par l'utilisation de grilles de maillages emboîtés.

Pour terminer cette présentation rapide des méthodes PIC pour la mécanique des fluides, il sera intéressant de regarder quelques exemples représentatifs des limites actuelles de la CFD.