

Chapitre 4

Les méthodes numériques pour la résolution de l'équation de Vlasov

Différents types de méthodes sont actuellement utilisées en pratique pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov, couplée non linéairement aux équations de Maxwell ou de Poisson. Les grands types de méthodes utilisées sont les méthodes particulières, les méthodes spectrales basées sur des développement de Fourier, et dans certains cas de Hermite, de la fonction de distribution, et finalement les méthodes utilisant un maillage de l'espace des phases. Un petit historique des méthodes utilisées pour la simulation de plasmas montre que les méthodes numériques doivent sans cesse évoluer et être améliorées en adéquation avec les moyens de calcul. Des situations de plus en plus complexes peuvent être traitées lorsque les moyens de calcul évoluent, mais cela nécessite le développement de nouvelles méthodes numériques. Ainsi, la simulation numérique de plasmas et de faisceaux de particules s'est développée en fonction des ressources de calcul disponibles : au début, dans les années 1960 et 1970 où l'on pouvait traiter uniquement des problèmes 1D, d'innombrables méthodes ont vu le jour, chacune avec ses avantages et ses inconvénients. Ensuite il s'est avéré que l'une de ces méthodes, la méthode Particle-In-Cell (PIC), a été utilisée de manière quasi-exclusive dans les années 1980 et 1990, car elle permettait de faire des simulations de problèmes physiquement réalistes de manière satisfaisante avec les moyens disponibles. Depuis une dizaine d'années les moyens de calcul permettent de revenir à des méthodes utilisant un maillage de l'espace des phases qui permettent d'avoir des résultats plus précis dans certains cas. Ces méthodes doivent bien entendu être améliorées et analysées pour comprendre l'étendue de leur applicabilité. Plus généralement il reste un travail important à faire pour la compréhension, voire l'amélioration, et l'analyse de méthodes numériques existantes.

4.1 Les méthodes particulières

4.1.1 Introduction

La première méthode à avoir été développée historiquement et encore de nos jours la plus utilisée pour la simulation des équations de Vlasov-Maxwell ou de Vlasov-Poisson est la méthode PIC (pour Particle In Cell) qui consiste en le couplage d'une méthode particulière pour Vlasov et une méthode sur maillage pour Maxwell ou Poisson. Le principe de la méthode est de discrétiser la fonction de distribution par une ensemble

de macro-particules représentant à l'instant initial une réalisation de la loi de probabilité associée à la fonction de distribution initiale $f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ qui normalisée telle que son intégrale vaut 1 représente une densité de probabilité. On avance ces macro-particules en temps en résolvant numériquement leur équation du mouvement dans un champ électromagnétique. Le couplage avec le solveur de champ se fait en calculant les sources, densité de charge et de courant, pour les équations de Maxwell grâce à une méthode de régularisation. Un solveur de champ classique peut alors être utilisé. Pour continuer la boucle en temps on doit alors calculer les champs aux positions des particules, ce qui se fait de manière naturelle avec certains solveurs (Eléments finis par exemple) ou par interpolation avec d'autres. Il existe une littérature considérable sur ces méthodes incluant deux livres plutôt orientés vers la physique, celui de Birdsall et Langdon [5] et celui de Hockney et Eastwood [11]. Des preuves de convergence des algorithmes existent également dans certains cas particuliers par Neunzert et Wick [13], Cottet et Raviart [9], Victory et Allen [15] et Wollman [17].

Il existe également une variante de la méthode PIC qui est souvent utilisée lorsque la physique étudiée reste proche d'une configuration d'équilibre, notamment dans les tokamaks ou dans les accélérateurs de particules. Cette méthode est appelée δf . Elle consiste à développer la fonction de distribution au voisinage d'un équilibre connu f^0 en $f = f^0 + \delta f$ et à approximer uniquement la partie δf par une méthode PIC. Une autre méthode particulière, apparentée aux méthodes SPH (smooth particle hydrodynamics) utilisées en mécanique des fluides à été introduite par Bateson et Hewett [2], mais semble relativement peu utilisée depuis. Elle consiste à faire évoluer un nombre relativement faible de macro-particules de forme gaussienne dont la taille peut varier et qui interagissent directement les unes avec les autres. Nous ne détaillerons pas cette méthode.

4.1.2 La méthode PIC

Le principe d'une méthode particulière est d'approcher la fonction de distribution f solution de l'équation de Vlasov par une somme de masses de Dirac centrées en les positions dans l'espace des phases $(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t))_{1 \leq k \leq N}$ d'un nombre N de macro-particules ayant chacune un poids w_k . La fonction de distribution approchée que nous notons f_N s'écrit alors

$$f_N(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{k=1}^N w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k(t)).$$

Dans ce but on initialise les positions \mathbf{x}_k^0 , les vitesses \mathbf{v}_k^0 et les poids w_k pour que $f_N(\mathbf{x}, \mathbf{v}, 0)$ soit une approximation, en un sens à préciser, de la fonction de distribution initiale $f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v})$. L'évolution en temps de l'approximation se fait en avançant les macro-particules le long des caractéristiques de l'équation de Vlasov, i.e. en résolvant le système d'équations différentielles

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_k}{dt} &= \mathbf{v}_k \\ \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} &= \frac{q}{m} (\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t) + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t)) \\ \mathbf{x}_k(0) &= \mathbf{x}_k^0, \quad \mathbf{v}_k(0) = \mathbf{v}_k^0. \end{aligned}$$

Proposition 2 La fonction f_N est une solution au sens des distributions de l'équation de Vlasov associée à la condition initiale $f_N^0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_{k=1}^N w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k^0) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k^0)$.

Preuve. Soit $\varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times]0, +\infty[)$. Alors f_N définit une distribution de $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times]0, +\infty[$ de la manière suivante :

$$\langle f_N, \varphi \rangle = \sum_{k=1}^N \int_0^T w_k \varphi(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t), t) dt.$$

On a alors

$$\left\langle \frac{\partial f_N}{\partial t}, \varphi \right\rangle = -\langle f_N, \frac{\partial \varphi}{\partial t} \rangle = -\sum_{k=1}^N w_k \int_0^T \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t), t) dt,$$

or

$$\frac{d}{dt}(\varphi(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t), t)) = \frac{d\mathbf{x}_k}{dt} \cdot \nabla_x \varphi + \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} \cdot \nabla_v \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial t}(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t), t),$$

et comme φ est à support compact dans $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times]0, +\infty[$, elle s'annule pour $t = 0$ et $t = T$. Donc

$$\int_0^T \frac{d}{dt}(\varphi(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t), t)) dt = 0.$$

Il en résulte que

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial f_N}{\partial t}, \varphi \right\rangle &= \sum_{k=1}^N w_k \int_0^T (\mathbf{v}_k \cdot \nabla_x \varphi + \frac{q}{m} (\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t) + \mathbf{v}_k \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t)) \cdot \nabla_v \varphi) dt \\ &= -\langle \mathbf{v} \cdot \nabla_x f_N + \frac{q}{m} (\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t)) \cdot \nabla_v f_N, \varphi \rangle. \end{aligned}$$

Ce qui signifie que f_N vérifie de manière exacte l'équation de Vlasov au sens des distributions. ■

Conséquence : Si on peut résoudre exactement les équations du mouvement (ce qui est le cas parfois lorsqu'on a uniquement un champ appliqué suffisamment simple), la méthode particulière donne la solution exacte pour une fonction de distribution initiale sous forme de somme de masses de Dirac.

Le champ électromagnétique auto-consistant est quand à lui calculé sur un maillage de l'espace physique utilisant une méthode classique (p.ex. Elements Finis, ou Différences Finies) pour résoudre les équations de Maxwell ou de Poisson.

Pour déterminer complètement une méthode particulière, il faut préciser comment est choisie la condition initiale f_N^0 et quelle est la méthode numérique choisie pour la résolution du système d'équations différentielles des caractéristiques.

On peut maintenant donner l'algorithme d'un code PIC qui est représenté schématiquement sur la figure 4.1.

Détaillons en les étapes principales.

Choix de la condition initiale.

- *Méthode déterministe :* On définit un maillage de l'espace des phases (uniforme ou non). On prend comme position initiale des particules $(\mathbf{x}_k^0, \mathbf{v}_k^0)$ les barycentres des mailles et pour poids w_k associé l'intégrale de f_0 sur la maille correspondante : $w_k = \int_{V_k} f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ de sorte que $\sum_k w_k = \int f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$.
- *Méthode Monte-Carlo :* On choisit les positions initiales de manière aléatoire ou pseudo-aléatoire selon la densité de probabilité associée à f_0 .

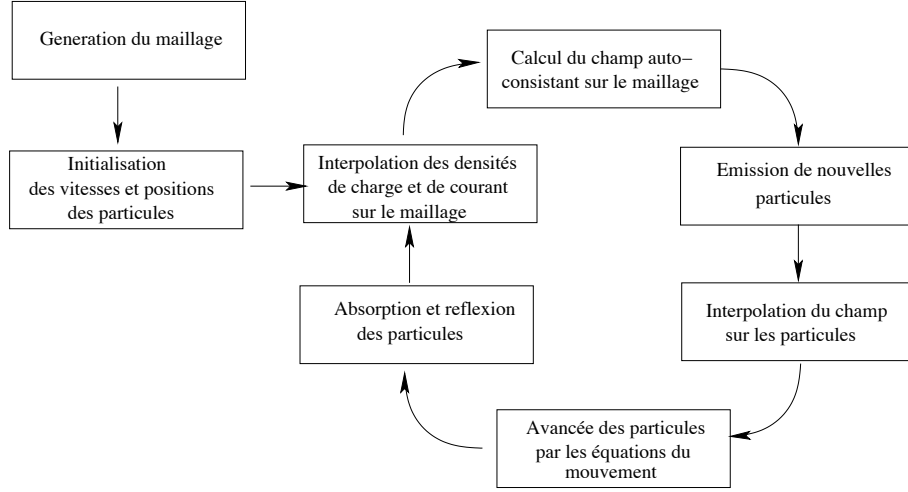


FIG. 4.1 – Les différentes étapes d'un code PIC.

Couplage particules-maillage. L'approximation particulaire f_N de la fonction de distribution ne permet pas de définir une valeur de cette fonction en tous les points de l'espace des phases. Ainsi pour le couplage avec le solveur de champ défini sur le maillage une étape de régularisation est nécessaire. On définit pour cela des noyaux de convolution qui seront utilisés pour la régularisation. Numériquement, il est intéressant de prendre comme noyaux de convolution des B-splines d'ordre fixé. Ces B-splines sont définies par récurrence : On définit la B-spline d'ordre 0 que nous noterons S^0 par

$$S^0(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} & \text{si } -\frac{\Delta x}{2} \leq x < \frac{\Delta x}{2}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les B-splines d'ordre supérieur sont alors définies par :
Pour tout $m \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} S^m(x) &= (S^0)^{*m}(x), \\ &= S^0 * S^{m-1}(x), \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} S^{m-1}(u) du. \end{aligned}$$

On obtient en particulier à l'ordre 1

$$S^1(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} (1 - |\frac{x}{\Delta x}|) & \text{si } |x| < \Delta x, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

et à l'ordre 2

$$S^2(x) = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} \frac{1}{2} (\frac{3}{2} - |\frac{x}{\Delta x}|)^2 & \text{si } \frac{1}{2} \Delta x < |x| < \frac{3}{2} \Delta x, \\ \frac{3}{4} - (\frac{x}{\Delta x})^2 & \text{si } |x| < \frac{1}{2} \Delta x, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les B-splines vérifient les propriétés importantes suivantes :

Proposition 3 – *Moyenne unité*

$$\int S^m(x) dx = 1.$$

– *Partition de l'unité.* Pour $x_j = j\Delta x$,

$$\sum_j S^m(x - x_j) = 1.$$

Les sources pour les équations de Maxwell ρ et \mathbf{J} sont définies à partir de la fonction de distribution f_N par

$$\rho_N = \sum_k q_k w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k), \quad \mathbf{J}_N = \sum_k q_k w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k.$$

On applique ensuite le noyau de convolution S pour pouvoir définir ρ et \mathbf{J} en tout point de l'espace et en particulier aux points du maillage :

$$\rho_h(\mathbf{x}, t) = \int S(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho_N(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'$$

Interprétation probabiliste de la méthode PIC Même quand les particules sont initialisées de manière non aléatoire les effets non linéaires de pair avec les erreurs d'arrondi induisent des effets aléatoires après un certain temps. Il est donc naturel d'analyser les erreurs commises par la méthode PIC avec des techniques probabilistes et de rapprocher cette méthode des méthodes de type Monte-Carlo utilisées pour diverses applications.

Une vision Monte-Carlo de la méthode PIC peut être introduite comme suit : On commence par tirer des macro-particules dans l'espace des phases comme une réalisation aléatoire de la loi de probabilité associée à la densité de probabilité p obtenue à partir de la distribution initiale f_0 par

$$p = \frac{1}{\mathcal{N}} f_0, \quad \text{où } \mathcal{N} = \int f_0 dx dv.$$

Une fois les particules initialisées, elles sont avancées à l'aides des équations du mouvement qui sont déterministes, mais à chaque temps t les particules données par leurs positions dans l'espace des phases $(\mathbf{x}_k(t), \mathbf{v}_k(t))_{1 \leq k \leq N}$ représentent une réalisation de la loi de probabilité associée à la densité $p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{1}{\mathcal{N}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ liée à la solution au temps t de l'équation de Vlasov.

Dans ce cadre, les différentes grandeurs physiques peuvent être exprimées comme des espérances sous la loi de probabilité associée à p . Pour une fonction g , son espérance sous p est définie par

$$\mathbb{E}_p(g) = \int g(\mathbf{x}, \mathbf{v}) p(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v} = \frac{1}{\mathcal{N}} \int g(\mathbf{x}, \mathbf{v}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v}.$$

Grâce à la loi forte des grands nombres, ces espérances peuvent être approximées par les réalisations aléatoires :

$$\mathbb{E}_f(g(\mathbf{x}, \mathbf{v})) \approx \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k).$$

De plus le théorème central limite permet d'obtenir une estimation d'erreur $\mathbb{E}_f(g(\mathbf{x}, \mathbf{v})^2) < +\infty$, et donc l'erreur

$$\epsilon_N = \mathbb{E}_f(g(\mathbf{x}, \mathbf{v})) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g(\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k)$$

est telle que $\frac{\sqrt{N}}{\sigma} \epsilon_N$ converge vers la gaussienne centrée réduite dont la variance σ est donnée par

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \mathbb{E}_f(g(\mathbf{x}, \mathbf{v})^2) - \mathbb{E}_f(g(\mathbf{x}, \mathbf{v}))^2, \\ &= \int g(\mathbf{x}, \mathbf{v})^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) dx dv - \left(\int g(\mathbf{x}, \mathbf{v}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) dx dv \right)^2. \end{aligned}$$

On en déduit que cette approximation converge comme $1/\sqrt{N}$ quand N tend vers $+\infty$ et que l'approximation est d'autant meilleure que la variance est petite. En particulier des techniques de réduction de variance utilisées en statistique peuvent constituer un moyen d'améliorer cette approximation.

Les différentes quantités physiques peuvent s'interpréter à l'aide de la terminologie probabiliste. On voit par exemple que l'énergie cinétique vaut

$$\mathcal{N} \mathbb{E}_f(\mathbf{v}^2) = \int \mathbf{v}^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x} d\mathbf{v},$$

la densité de charge au point \mathbf{x}_i est

$$\rho_i = \mathcal{N} \mathbb{E}_f(S_i) = \int S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x} d\mathbf{v},$$

et la densité de courant au point \mathbf{x}_i est

$$J_i = \mathcal{N} \mathbb{E}_f(\mathbf{v} S_i) = \int S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x} d\mathbf{v}.$$

De plus ces espérances peuvent être approximées avec la réalisation aléatoire de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_f(\mathbf{v}^2) &\approx \frac{1}{N} \sum \mathbf{v}_k^2, & \rho_i &= \mathbb{E}_f(S_i) \approx \frac{1}{N} \sum S(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i), \\ & & J_i &= \mathbb{E}_f(\mathbf{v} S_i) \approx \frac{1}{N} \sum S(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i) \mathbf{v}_k. \end{aligned}$$