

RECHERCHE COOPÉRATIVE SUR PROGRAMME N° 25

PIERRE DEGOND

Méthodes particulières en mécanique des fluides et en physique des plasmas

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1988, tome 39
« Conférences de P. Degond, R. Gérard, C. Itzykson, F. Wegner et Mlle S. Rousset », ,
exp. n° 4, p. 51-68

http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1988__39__51_0

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1988, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Méthodes Particulaires en Mécanique des Fluides et en Physique des Plasmas.

Pierre Degond

Centre de Mathématiques Appliquées
École Polytechnique
91128 Palaiseau Cedex

1. Historique :

Les méthodes particulières ont été introduites pour la première fois en mécanique des fluides par *Rosenhead* (1931). Elles se sont surtout développées à partir des années 1960 dans deux domaines de la physique : la mécanique des fluides, et en particulier, des fluides incompressibles, d'une part, et la physique des plasmas d'autre part.

Les méthodes particulières ont tout d'abord été utilisées pour la résolution d'équations de convection pure, comme l'équation d'Euler incompressible bidimensionnelle en formulation tourbillon ou l'équation de Vlasov-Poisson (voir à ce sujet *Leonard* (1980, 1985), *Hockney et Eastwood* (1981) et *Birdsall et Langdon* (1985)). Rapidement est apparue la nécessité de discrétiser des termes dissipatifs, comme la viscosité dans l'équation de Navier-Stokes, ou des termes de collisions pour l'équation de Vlasov-Boltzmann; l'introduction de techniques Monte-Carlo (voir *Chorin* (1973)) a donné une première solution à ce problème. Néanmoins, les difficultés inhérentes à la méthode Monte-Carlo (bruit numérique) ont fait rechercher des traitements déterministes des termes dissipatifs. Les premières méthodes proposées ont concerné l'équation de convection-diffusion linéaire, et l'équation de Navier-Stokes : *Cottet et Mas-Gallic* (1983, a et b, 1987) *Mas-Gallic et Raviart* (1987-a et b), *Mas-Gallic et Degond* (1988). L'extension à des termes de collision intégraux est faite dans *Mas-Gallic* (1987). Par ailleurs, l'application des méthodes particulières aux systèmes hyperboliques non linéaires a été introduite par *Gingold et Monaghan* (1982) et analysée, dans un cas linéaire, par *Mas-Gallic et Raviart* (1987 a).

2. Présentation de la méthode particulière : exemple de l'équation de convection linéaire.

A ce sujet, on se référera à *Raviart* (1985, 1987).

Considérons l'équation suivante :

$$(1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(au) = 0$$

où $x \in \mathbb{R}^n, t > 0$, $a(x, t)$ est un champ de $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+$ dans \mathbb{R}^n , que nous supposons pour simplifier régulier, à divergence nulle :

$$\operatorname{div} a = 0.$$

La méthode particulière repose sur la remarque fondamentale et excessivement simple suivante : la distribution

$$(2) \quad u(x, t) = \delta(x - X(t))$$

(où δ est la distribution de Dirac et $X : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^n$ est une application) est une solution *exacte* de l'équation (1) si et seulement si $X(t)$ est une caractéristique de (1), i.e.

$$(3) \quad \frac{dX}{dt} = a(X(t), t).$$

La méthode particulière de résolution de l'équation (1) se décompose alors en :

1. Approximation de la donnée initiale $u_0(x)$ par une combinaison de masses de Dirac :

$$(4) \quad u_0(x) \simeq u_0^h(x) = \sum_i \alpha_i \delta(x - x_i^0)$$

2. Résolution de l'équation caractéristique pour chaque particule :

$$(5) \quad \frac{dX_i}{dt} = a(X_i(t), t) ; X_i(0) = x_i^0$$

et obtention de l'approximation au temps t :

$$(6) \quad \begin{aligned} u(x, t) &\simeq u^h(x, t) \\ u^h(x, t) &= \sum_i \alpha_i \delta(x - X_i(t)). \end{aligned}$$

L'étape 1. peut être réalisée en recouvrant le domaine de calcul d'un maillage régulier de pas $(\Delta x = (\Delta x_1, \dots, \Delta x_n))$ et en prenant (avec $i \in \mathbb{Z}^n$).

$$\begin{aligned} \alpha_i &= W_i u_i^0 ; x_i^0 = (i_1 \Delta x_1, \dots, i_n \Delta x_n) \\ W_i &= \Delta x_1 \dots \Delta x_n ; u_i^0 = u_0(x_i^0). \end{aligned}$$

Dans ce cas, on dit que W_i est le volume de contrôle de la particule numéro i , et u_i^0 son poids. D'autres procédures plus complexes peuvent

être envisagées. L'étape 2 est résolue à l'aide de n'importe quel schéma convergent pour les systèmes différentiels ordinaires (méthode de Runge-Kutta, ou méthode multipas).

La différence entre u et u^h est mesurée dans la topologie faible des mesures. Soit φ une fonction continue, à support compact. On note $X(t; \chi, 0)$, la solution de l'équation (3), qui passe par χ au temps $t = 0$. Par le changement de variable $x = X(t; \chi, 0)$, on a :

$$\begin{aligned}
 (7) \langle u - u^h, \varphi \rangle &= \\
 &= \int_{\mathbb{R}^n} u(x, t) \varphi(x) dx - \sum_i \alpha_i \varphi(X_i(t)) \\
 &= \int_{\mathbb{R}^n} u_0(\xi) \varphi(X(t; \xi, 0)) d\xi - \sum_i u_0(x_i^0) \varphi(X(t; x_i^0, 0)) W_i.
 \end{aligned}$$

On voit donc que la méthode particulière s'identifie à une formule de quadrature pour la fonction $\xi \rightarrow u_0(\xi) \varphi(X(t; \xi, 0))$. Cette remarque a été formulée pour la première fois dans *Cottet* (1982) et *Raviart* (1985), et permet l'utilisation du lemme de Bramble-Hilbert pour estimer l'erreur. Si u_0 et φ sont régulières, (par exemple $u_0 \in W^{m, \infty}(\mathbb{R}^n)$, et $\varphi \in W^{m, 1}(\mathbb{R}^n)$), la différence (7) est de l'ordre de h^m , où $h = (\Delta x_1^2 + \dots + \Delta x_n^2)^{1/2}$. Une telle conclusion peut se formaliser en disant que $u - u^h$ est de l'ordre de h^m dans la topologie de $W^{-m, p}$. (Voir à ce sujet *Cottet* (1987-b)).

Dans la pratique, il est utile d'obtenir une approximation, non pas au sens des mesures ou de $W^{-m, p}$, mais au sens de fonctions régulières (par exemple L^∞). Pour cela, il faut introduire une fonction de régularisation $\zeta_\epsilon(x)$ qui vérifie les propriétés suivantes :

$$(8) \quad \zeta_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^n} \zeta\left(\frac{x}{\epsilon}\right); \quad \int_{\mathbb{R}^n} \zeta(x) dx = 1.$$

On considère alors l'approximation particulière régularisée

$$u_\epsilon^h(x, t) = u^h(t) * \zeta_\epsilon = \sum_i \alpha_i \zeta_\epsilon(x - X_i(t))$$

qui est une fonction aussi régulière que ζ . L'erreur s'écrit alors

$$\begin{aligned}
 (9) \quad u(x, t) - u_\epsilon^h(x, t) &= \\
 &= (u(x, t) - u(t) * \zeta_\epsilon) \\
 &+ \int_{\mathbb{R}^n} u(y, t) \zeta_\epsilon(x - y) dy - \sum_i \alpha_i \zeta_\epsilon(x - X_i(t)).
 \end{aligned}$$

Le premier terme est simplement une erreur de convolution et est classiquement estimé comme $\epsilon^k \|u(t)\|_{W^{k,\infty}}$, si la fonction ζ possède ses $k - 1$ premiers moments nuls :

$$(10) \quad \int x^\alpha \zeta(x) dx = 0 \quad 1 \leq |\alpha| \leq k - 1.$$

Dans le second terme, nous reconnaissons l'erreur de quadrature (7), concernant la fonction test $\zeta_\epsilon(y - \cdot)$. Celle-ci s'exprime donc comme $(h/\epsilon)^m$. (En effet la norme $W^{m,1}$ de ζ_ϵ se comporte comme ϵ^{-m}). Il en résulte d'après (9), que l'erreur totale est donc :

$$(11) \quad \|u - u^h\|_{L^\infty} \leq C(\epsilon^k + (h/\epsilon)^m) \|u_0\|_{W^{m,1} \cap W^{k,\infty}}.$$

Dans cette présentation sommaire apparaissent tous les concepts qui sont à la base des développements récents des méthodes particulières : parenté avec les formules de quadrature, régularisation.

3. Premier cas non linéaire. Équation d'Euler bidimensionnelle en formulation tourbillon.

Cette équation s'écrit pour $x \in \mathbb{R}^2$ et $t > 0$:

$$(12) \quad \frac{\partial \omega}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \omega = 0$$

$$(13) \quad \begin{cases} \text{rot } \vec{u} = \omega \\ \text{div } \vec{u} = 0 \\ \vec{u}(x, t) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \vec{u}_\infty. \end{cases}$$

Ici \vec{u} représente la vitesse du fluide au point (x, t) , et ω , le tourbillon ($\omega = \text{rot } \vec{u}$), est un scalaire. Le tourbillon est convecté par la vitesse, ce qui donne lieu à une équation de transport du type (1), mais le champ de convection \vec{u} dépend lui-même du tourbillon, par l'intermédiaire de la résolution d'un problème elliptique (13). Il s'ensuit une complexification importante, car les caractéristiques ne sont plus connues à l'avance, mais dépendent de la solution (approchée), trouvée pour le tourbillon.

Le système (11) peut se réécrire :

$$(14) \quad \begin{cases} \vec{u}(x, t) = \vec{u}_\infty + \vec{K} * \omega \\ \vec{K}(x) = \frac{1}{2\pi|x|^2} \begin{pmatrix} -x_2 \\ x_1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

\vec{u} dépend donc de ω par l'intermédiaire d'un opérateur intégral. De plus, $\vec{K}(x)$ est un noyau singulier. Par conséquent, si on considère un vortex (ou particule de tourbillon), centré en x_i ($\omega = \delta(x - x_i)$), la vitesse engendrée par ce vortex vaut $K(x - x_i)$, et est donc singulière quand x tend vers x_i . En particulier, elle ne permet pas de définir le mouvement de ce vortex. Pour lever cette singularité, on considère une régularisation du vortex (ou de manière équivalente, du noyau K), à l'aide d'une fonction de régularisation ζ_ϵ vérifiant les propriétés (8)–(10), qui engendre un champ de vitesse régulier $(K * \zeta_\epsilon)(x - x_i)$. La nécessité de la régularisation a pour la première fois été mis en évidence par *Chorin* (1973).

La méthode de vortex s'écrit donc (avec $\vec{K}_\epsilon = \vec{K} * \zeta_\epsilon$) :

$$(15) \quad \omega(x, t) \simeq \sum_i \alpha_i \delta(x - X_i(t))$$

$$(16) \quad \frac{dX_i}{dt} = \vec{u}_h^\epsilon(X_i(t), t)$$

$$(17) \quad \vec{u}_h^\epsilon(x, t) = \vec{u}_\infty + \sum_i \alpha_i \vec{K}_\epsilon(x - X_i(t)).$$

(16) fournit donc un système différentiel qui couple toutes les trajectoires des vortex. On voit donc que des sources nouvelles d'erreur interviennent, dues au remplacement des caractéristiques exactes par des caractéristiques approchées (16) calculées à partir des vitesses régularisées engendrées par chaque vortex. On montre cependant, moyennant des techniques d'analyse fort complexes, que ces erreurs sont de même nature que celles signalées pour l'équation de convection linéaire, et conduisent à une estimation d'erreur du type (11). Les premières estimations d'erreur sont dues à *Hald* (1979), qui a le premier, montré l'intérêt d'utiliser des fonctions de régularisation d'ordre élevé (vérifiant (10) pour des valeurs de k strictement supérieures à 2). Ces résultats ont été améliorés par *Beale et Majda* (1982), dont *Cottet* (1982) et *Raviart* (1985) ont simplifié la preuve. On consultera *Leonard* (1980) pour une revue des applications physiques et des résultats numériques concernant le cadre bidimensionnel.

Lorsque le nombre de particules devient grand (ce qui est rendu nécessaire par certaines applications), ce calcul de la vitesse par la formule (17) peut devenir très coûteux, car il a une complexité en $O(N^2)$ où N est le nombre de particules. Deux méthodes ont été proposées pour pallier cet inconvénient. D'une part, un algorithme rapide de calcul des interactions mutuelles entre vortex a été mis au point par *Rokhlin* (1983)

et L. Greengard et Rokhlin (1987), permettant leur calcul en N opérations. Cet algorithme repose sur des développements multipolaires de la solution du problème (13). Auparavant, une autre méthodologie a été développée, dite méthode “Vortex in Cell” V.I.C. Elle repose sur l’introduction d’une grille fixe de pas $(\Delta x, \Delta y)$ (qui peut être différente de la grille choisie pour l’initialisation). Par régularisation et échantillonnage, des valeurs du tourbillon aux sommets de la grille sont obtenues :

$$(18) \quad \begin{aligned} \omega_{j,k} &\simeq \omega(j\Delta x, k\Delta y) \\ &= \sum_i \frac{\alpha_i}{\Delta x \Delta y} W\left(\frac{j\Delta x - x_i(t)}{\Delta x}, \frac{k\Delta y - y_i(t)}{\Delta y}\right) \end{aligned}$$

où $X_i(t) = (x_i(t), y_i(t))$ et W est une fonction de régularisation “de grille”. On résout alors un problème elliptique pour la fonction courant ψ donnée par $\vec{u} = \vec{\text{rot}}\psi$ par différences finies sur le maillage fixe. La vitesse est également recalculée aux sommets du maillage par différences finies, puis réinterpolée sur les particules selon la formule :

$$(19) \quad u_i(t) = \sum_{j,k} u_{j,k} W\left(\frac{x_i(t) - j\Delta x}{\Delta x}, \frac{y_i(t) - k\Delta y}{\Delta y}\right).$$

Cette méthode a été employée dès les premières simulations de vortex par Harlow (1956, 1964) et Christiansen (1973). Les fonctions de régularisation W sont usuellement des B -splines d’ordre 1 (méthode “Cloud in Cell” C.I.C.) ou d’ordre 2 (méthode “Triangular shaped Cloud” ou T.S.C.). Ces méthodes sont analysées dans Cottet (1987-a), qui montre une formule du type (11) avec $\epsilon = (\Delta x^2 + \Delta y^2)^{1/2}$, et $k = 2$ (les fonctions de régularisation “de grille” sont nécessairement d’ordre 2). Une variante de l’algorithme (18)–(19) est donnée dans Brackbill et Ruppel (1986). La méthodologie “Vortex in Cell” est plus adéquate au traitement de frontières; l’utilisation du noyau de Green (14) nécessite, dans le cas de frontières, la résolution d’une équation intégrale posée sur le bord.

4. Extension à l’équation d’Euler tridimensionnelle, en formulation tourbillon.

En tridimensionnel, le tourbillon $\vec{\omega}$ est un vecteur, et son évolution est régie par l’équation suivante :

$$(20) \quad \frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\omega} = (\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}$$

$$(21) \quad \begin{cases} \vec{\text{rot}} \vec{u} = \vec{\omega} \\ \text{div} \vec{u} = 0 \\ \vec{u}(x, t) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \vec{u}_\infty. \end{cases}$$

Le système elliptique (21) s'exprime en termes d'une fonction courant vectorielle $\vec{\psi}$ par :

$$(22) \quad \vec{u} = \text{rot} \vec{\psi}; \quad \vec{\Delta} \vec{\psi} = -\vec{\omega}$$

ou bien encore, peut être résolu à l'aide d'un opérateur intégral :

$$(23) \quad \vec{u}(x, t) = \int \underline{K}(x - x') \vec{\omega}(x', t) dx'$$

où $\underline{K}(x)$ est la matrice telle que $\underline{K}(x) \cdot \omega = \frac{1}{4\pi} \frac{x}{|x|^3} \wedge \omega$.

La principale différence avec l'équation d'Euler bidimensionnelle est dans la présence du second membre $(\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u}$ de l'équation (20). Le traitement particulière de ce second membre s'effectue à l'aide de la variation des poids ω_j des particules. De manière plus précise, on écrira, comme dans le cas bidimensionnel :

$$(24) \quad \vec{\omega}(x, t) \simeq \sum_i W_i \vec{\omega}_i(t) \delta(x - X_i(t))$$

$$(25) \quad \frac{dX_i}{dt} = \vec{u}_h^\epsilon(X_i(t), t)$$

$$(26) \quad \vec{u}_h^\epsilon(x, t) = \vec{u}_\infty + \sum_i W_i \underline{K}_\epsilon(x - X_i(t)) \cdot \vec{\omega}_i(t)$$

avec les conditions initiales :

$$(27) \quad \begin{cases} X_i(0) &= x_i^0 = (i_1 \Delta x_1, i_2 \Delta x_2, i_3 \Delta x_3) \\ W_i &= \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3 \\ \vec{\omega}_i(0) &= \vec{\omega}_i^0 = \vec{\omega}_0(x_i^0) \end{cases}$$

et

$$(28) \quad \underline{K}_\epsilon = \underline{K} * \zeta_\epsilon$$

le cut-off ζ_ϵ vérifiant les propriétés (8) et (10).

La nouveauté est ici que les poids des tourbillons $\vec{\omega}_i(t)$ ne sont plus constants en temps, mais varient selon le système différentiel :

$$(29) \quad \frac{d\vec{\omega}_i}{dt} = (\vec{\omega}_i(t) \cdot \vec{\nabla}) \cdot \vec{u}_h^\epsilon(X_i(t), t).$$

Par l'action de la régularisation, la vitesse \vec{u}_h^ϵ est régulière, et la définition de la quantité $(\vec{\omega}_i(t) \cdot \nabla) \cdot \vec{u}_h^\epsilon$ ne pose pas de problèmes. D'un point de vue pratique, la formule (29) sera développée en utilisant (26), et exprimée en fonction des dérivées de la fonction cut-off. Cet algorithme a été proposé et analysé dans *Anderson et C. Greengard* (1985). L'estimation d'erreur en a été simplifiée par *Cottet* (1987-b). Un autre algorithme, proposé par *Beale et Majda* (1982), et repris par *Anderson et C. Greengard* (1985) repose sur le calcul de l'opérateur $(\vec{\omega} \cdot \vec{\nabla})$ par différence finie sur une grille fixe, utilisant une méthodologie "Vortex in Cell". Finalement, signalons qu'historiquement, les premières méthodes particulières pour les cas tridimensionnels ont consisté, non pas à discrétiser le tourbillon sous forme de masses de Dirac, mais sous forme de mesures portées par des courbes (filaments de vortex). Cette méthode a été analysée par *C. Greengard* (1986). Elle est sans doute plus proche de la physique réelle tridimensionnelle. Une revue des applications des méthodes de vortex au cas tridimensionnel se trouve dans *Leonard* (1985).

5. Deuxième cas non linéaire : Equation de Vlasov-Poisson.

L'équation de Vlasov-Poisson modélise la théorie cinétique d'un plasma non collisionnel. Celle-ci s'écrit pour la fonction de distribution $f(x, v, t)$ des électrons ($x \in \mathbb{R}^3, v \in \mathbb{R}^3, t > 0$).

$$(30) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f - E \cdot \nabla_v f = 0$$

$$(31) \quad E(x, t) = -\nabla_x \Phi(x, t)$$

$$(32) \quad -\Delta \Phi = \rho(x, t)$$

$$(33) \quad \rho(x, t) = n_i(x) - n_e(x, t)$$

$$(34) \quad n_e(x, t) = \int f(x, v, t) dv$$

Les opérateurs $v \cdot \nabla_x$ et $E \cdot \nabla_v$ représentent respectivement

$$v \cdot \nabla_x = \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial}{\partial x_i} ; \quad E \cdot \nabla_v = \sum_{i=1}^3 E_i \frac{\partial}{\partial v_i}$$

E, Φ, ρ, n_e, n_i sont respectivement le champ électrique, le potentiel électrique, la charge électrique, la densité locale électronique, et la densité locale ionique (donnée).

L'équation de Poisson (31) à (33) est équivalente à

$$(35) \quad E(x, t) = K * \rho(t) ; K(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{x}{|x|^3}.$$

Hormis par la présence de l'intégrale en vitesse (34), l'équation de Vlasov-Poisson est très semblable à l'équation d'Euler bidimensionnelle. La méthode particulière s'en déduit immédiatement :

$$(36) \quad f(x, v, t) \simeq \sum_i \alpha_i \delta(x - X_i(t)) \delta(v - V_i(t))$$

$$(37) \quad \frac{dX_i}{dt} = V_i ; \quad \frac{dV_i}{dt} = -E_h^\epsilon(X_i, t)$$

$$(38) \quad E_h^\epsilon(x, t) = K * n_i(x) - \sum_i \alpha_i K_\epsilon(x - X_i(t)).$$

Dans la pratique, la majorité des auteurs préfèrent à la formule (38) un calcul du champ électrique par différences finies sur une grille fixe, à l'aide d'une méthode analogue à la méthode "Vortex in Cell", et qui porte le nom de méthode "Particle in Cell" (P.I.C.). On trouvera des précisions et de nombreux exemples dans *Hockney et Eastwood* (1981) et *Birdsall et Langdon* (1985). Voir aussi *Brackbill et Cohen* (1985), pour des techniques récentes, concernant des schémas d'intégration en temps implicites des équations du mouvement (37), ainsi que des modèles hybrides fluides-cinétiques. Des estimations d'erreur pour la méthode (36)–(38) ont été prouvées par *Cottet et Raviart* (1984) et pour la méthode P.I.C., par *Neunzert et Wick* (1980) et *Cottet et Raviart* (1986). Elles sont également du type (11).

6. Approximation particulière de l'hydrodynamique compressible.

Cette extension est due à *Gingold et Monaghan* (1982), *Monaghan* (1982), *Monaghan et Gingold* (1983). Elle a été reprise par *Ovadia et Raviart* (1986) et *Ovadia* (1988). Elle est analysée par *Mas-Gallic et Raviart* (1987-a), dans le cas des systèmes hyperboliques linéaires. Nous suivons ici leur présentation. On considère le problème suivant :

$$(39) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k} (A^k u) + A^0 u = f$$

avec $u : (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^p$. Les matrices $A^k(x, t)$, $k = 0, \dots, n$ sont des matrices $p \times p$ symétriques, et le second membre $f(x, t)$ est donné. Soit $a(x, t) = (a_k(x, t))_{k=1, \dots, n}$ un champ de vecteur sur \mathbb{R}^n a priori donné. On définit les matrices $B^k(x, t)$ pour $k = 1, \dots, n$ selon :

$$(40) \quad A^k(x, t) = a_k(x, t)I + B^k(x, t)$$

où I est la matrice identité de \mathbb{R}^p . On peut donc réécrire le système (39) selon :

$$(40) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(au) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k}(B^k u) + A^0 u = f.$$

Dans la pratique, le champ de convection a doit être un champ caractéristique du problème, et les matrices B^k doivent être “petites” dans un sens qui n’est pas encore bien conceptualisé. La méthode particulière consiste alors à convecter les particules selon le champ a , et à traiter les termes différentiels $\frac{\partial}{\partial x_k}(B^k u)$ par variation des poids des particules, en utilisant la différentiation d’une fonction de régularisation. Cette méthode est (d’un point de vue conceptuel) la généralisation directe de la méthode de vortex tridimensionnelle exposée à la section 4.

On écrit donc :

$$(41) \quad u(x, t) \simeq \sum_i W_i(t) u_i(t) \delta(x - X_i(t))$$

$$(42) \quad \frac{dX_i}{dt} = a(X_i(t), t).$$

L’initialisation est faite de la manière exposée plus haut (voir (27)). Le champ a n’étant pas nécessairement à divergence nulle, les volumes $W_i(t)$ vont évoluer selon :

$$(43) \quad \frac{dW_i}{dt} = (\operatorname{div} a)(X_i(t), t) \cdot W_i.$$

Enfin les poids évoluent selon

$$(44) \quad \frac{du_i}{dt} + (A^0 + \operatorname{div} a)(X_i(t), t) u_i(t) = f(X_i(t), t) - \sum_j W_j(t) \sum_{k=1}^n \{B^k(X_i(t), t) u_i(t) + B^k(X_j(t), t) u_j(t)\} \frac{\partial \zeta_\epsilon}{\partial x_k}(X_i - X_j).$$

Le dernier terme de (44) est une quadrature particulière de

$$\sum_{k=1}^n \int \{(B^k u)(x, t) + (B^k u)(y, t)\} \frac{\partial \zeta_\epsilon}{\partial X_k}(x - y) dy$$

qui est bien une approximation de $\sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial x_k}(B^k u)$, lorsque ϵ tend vers 0, si le cut-off ζ satisfait les conditions (8)–(10). De nouveau, l'estimation d'erreur prouvée dans *Mas-Gallic et Raviart* (1987-a) est du type (11).

L'application de la méthode (41) à (44) aux équations de l'hydrodynamique compressible est détaillée dans les références citées plus haut. Nous donnons ici la méthode pour mémoire : Le champ de convection a choisi est bien entendu la vitesse du fluide. L'équation de conservation de la masse se combine avec l'équation des volumes (43) pour aboutir au fait que la masse m_i d'une particule i est constante. Sa vitesse u_i et son énergie totale E_i évoluent (en 1-D) selon :

$$(45) \quad m_i \frac{du_i}{dt} = - \sum_j \frac{m_i}{\rho_i} \frac{m_j}{\rho_j} (p_i + p_j) \zeta'_\epsilon(X_i - X_j)$$

$$(46) \quad m_i \frac{dE_i}{dt} = - \sum_j \frac{m_i}{\rho_i} \frac{m_j}{\rho_j} (p_j u_j + p_i u_i) \zeta'_\epsilon(X_i - X_j)$$

avec l'équation des trajectoires donnée par :

$$(47) \quad \frac{dX_i}{dt} = u_i$$

et la densité locale ρ_i par :

$$(48) \quad \rho_i = \sum_j m_j \zeta_\epsilon(X_i - X_j).$$

La pression p_i est donnée en fonction de la loi d'état :

$$(49) \quad p_i = p(\rho_i, E_i - \frac{1}{2} u_i^2),$$

En fait, comme pour toute méthode non dissipative en hydrodynamique, il est nécessaire de stabiliser le système (45)–(47) par l'adjonction d'une pseudo-viscosité. Des détails sur cette question (importante) se trouvent dans les références citées plus haut. Remarquons que les seconds membres des équations (45) (46) correspondent aux forces de pression.

Une méthodologie “Vortex in Cell” a, là encore, été proposée pour le calcul de ces forces, en effectuant les dérivations $\frac{\partial \rho}{\partial x}$ et $\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)$ sur une grille fixe (voire adaptative). Voir pour cela *Brackbill et Ruppel* (1986) et *Brackbill* (1988).

7. Traitement des termes de diffusion.

Cette question est d’importance primordiale en mécanique des fluides, pour obtenir des approximations particulières de l’équation de Navier-Stokes (en formulation tourbillon). Historiquement, la première méthode proposée est due à *Chorin* (1973), qui superpose un mouvement Brownien à la trajectoire des particules. De nombreuses simulations ont été réalisées avec cette méthode (voir *Leonard* (1980)). Cependant, la nécessité de recourir à des traitements déterministes de la diffusion se fait sentir dans les nombreux cas où le bruit numérique dû aux tirages au sort dans la méthode de Chorin masque un certain nombre de phénomènes d’intérêt physique. La première méthode dans cette direction est due à *Cottet et Gallic* (1983 a et b, 1987) et repose sur le splitting visqueux de l’équation de Navier-Stokes analysé par *Beale et Majda* (1981). *Choquin et Huberson* (1986), et *Choquin et Lucquin-Desreux* (1987) ont réalisé les premiers tests numériques de cette méthode. Dans le même temps deux méthodes sans splitting sont proposées par *Mas-Gallic et Raviart* (1987-a et b). Ces méthodes ont été synthétisées dans la présentation générale de *Degond et Mas-Gallic* (1988) que nous résumons ci-dessous pour une équation de convection-diffusion linéaire. Des tests numériques, et une méthodologie de traitement des conditions aux limites sont détaillés dans *Cottet* (1988). Une synthèse de ces méthodes figure dans *Raviart* (1987).

Considérons l’équation de convection-diffusion suivante :

$$(50) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(au) + a_0 u - \nu \Delta u = 0$$

où $u : (x, t) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$. Dans une première étape, nous définissons un opérateur intégral Q^ϵ qui approche l’opérateur de Laplace lorsque ϵ tend vers 0. Q^ϵ est défini par :

$$(51) \quad Q^\epsilon \cdot u = \int \sigma^\epsilon(x, y)(u(y) - u(x))dy$$

avec

$$(52) \quad \sigma^\epsilon(x, y) = \frac{1}{\epsilon^2} \eta_\epsilon(x - y)$$

et η satisfaisant les conditions de moment un peu spéciales suivantes :

$$(53) \quad \int_{\mathbb{R}^n} x^\alpha \eta(x) dx = \begin{cases} 0, & \forall \alpha \in \mathbb{N}^n \quad \alpha \neq 2e_i, \quad 1 \leq |\alpha| \leq r + 1 \\ 2 & \text{si } \alpha = 2e_i \text{ pour } i = 1, \dots, n \end{cases}$$

Ici, e_i désigne le i -ième vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^n , et $r \geq 2$ fournit l'ordre de l'approximation, à savoir :

$$(54) \quad \|Q^\epsilon u - \Delta u\|_{L^\infty} \leq C\epsilon^r \|u\|_{W^{r+2,\infty}}.$$

On montre alors, que la solution u^ϵ du problème intégral-différentiel :

$$(55) \quad \frac{\partial u^\epsilon}{\partial t} + \operatorname{div}(au^\epsilon) + a_0 u^\epsilon - \nu Q^\epsilon \cdot u^\epsilon = 0$$

existe et est bornée dans $W^{m,\infty}$ indépendamment de ϵ , pourvu que ν et ϵ soient reliés par une condition de stabilité :

$$(56) \quad \nu\epsilon^{-2} \leq C_{\text{stab}}.$$

Dans ce cas les deux solutions u et u^ϵ sont proches à l'ordre r :

$$(57) \quad \|u - u^\epsilon\|_{L^\infty} \leq C\nu\epsilon^r \|u_0\|_{W^{r+2,\infty}}.$$

La deuxième étape consiste à définir une approximation particulière du problème (55). Cela se fait classiquement en posant :

$$u^\epsilon(x, t) \simeq \sum_i W_i(t) u_i(t) \delta(x - X_i(t))$$

avec

$$(58) \quad \frac{dX_i}{dt} = a(X_i(t), t)$$

$$(59) \quad \frac{dW_i}{dt} = (\operatorname{div} a)(X_i(t), t) \cdot W_i.$$

L'évolution des poids u_i s'obtient en effectuant une quadrature particulière de l'opérateur (51) :

$$(60) \quad \frac{du_i}{dt} + (a_0 + \operatorname{div} a)(X_i(t), t) u_i = \nu \sum_j \sigma^\epsilon(X_i, X_j) (u_j - u_i) W_j.$$

L'estimation d'erreur obtenue est encore du type (11). Dans *Degond et Mas-Gallic* (1988), nous proposons une extension de cette méthode aux opérateurs de diffusion matriciels (dont un exemple est donné par l'opérateur de collision de Fokker-Planck en théorie cinétique). Les conditions

de moment (53) sont nettement plus complexes dans ce cas. Enfin, signalons une méthode complètement différente, exposée dans *Degond et Mus-tieles* (1987), reposant sur la définition d'un champ de convection associé à l'opérateur de diffusion.

8. Opérateurs Intégraux de la théorie cinétique.

L'équation de Vlasov-Boltzmann (qui fournit un modèle cinétique de semiconducteurs), est une extension du système de Vlasov-Poisson (30)-(34). Elle s'écrit :

$$(61) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f - E \cdot \nabla_v f = Q(f)$$

$$(62) \quad Q(f) = \int [S(x, v', v)f(x, v', t) - S(x, v, v')f(x, v, t)] dv'$$

Un traitement particulière du terme de collision est proposé par *Mas-Gallic* (1987) et *Mas-Gallic et Poupaud* (1987). Auparavant, la méthode de Monte-Carlo, pendant de la méthode de Chorin dans ce cadre, a été très largement utilisée par des physiciens. Elle est analysée par *Bird* (1963, 1970), *Deshpande* (1978), *Nanbu* (1982, 1986), dans le cadre de l'opérateur non linéaire de la dynamique des Gaz. *Babovski* (1986, 1987) et *Lécot* (1988) ont proposé une variante déterministe de la méthode Monte-Carlo, dans ce cadre. Les applications de la méthode Monte-Carlo à la physique des semiconducteurs sont rapportés dans *Reggiani* (1985). Au contraire, la méthode que nous présentons ci-dessous a encore été très peu testée. Ses premières applications à la physique des semiconducteurs sont décrites dans *Niclot Degond et Poupaud* (1988) et *Degond et Guyot* (1988).

Là encore, l'opérateur $Q(f)$ doit être remplacé par un opérateur intégral Q^ϵ sur le couple de variables (x, v) :

$$(63) \quad Q^\epsilon \cdot f = \iint [S(x', v', v)f(x', v', t) - S(x, v, v')f(x, v, t)] \zeta_\epsilon(x' - x) dx' dv'$$

où ζ_ϵ satisfait les conditions (8), (10). Une discrétisation particulière est alors fournie par :

$$f(x, v, t) \simeq \sum_i W_i f_i(t) \delta(x - X_i(t)) \delta(v - V_i(t))$$

$$\frac{dX_i}{dt} = V_i; \quad \frac{dV_i}{dt} = E_h^\epsilon(X_i(t), t).$$

L'équation des poids s'obtient par quadrature particulière de l'opérateur intégral (63) :

$$(64) \quad \frac{df_i}{dt} = \sum_j [S(X_j, V_j, V_i) f_j - S(X_i, V_i, V_j) f_i] \zeta_\epsilon(X_j - X_i) W_j.$$

Le champ électrique E_h^ϵ est calculé comme à la section 5. L'estimation d'erreur est encore du type (11) (voir *Mas-Gallic* (1987)).

9. Conclusion.

Nous avons donné une présentation succincte des méthodes particulières, en nous attachant à montrer que celles-ci sont souples d'emploi et s'adaptent à des situations très diverses. Il ne faut cependant pas croire qu'elles sont universelles et à employer de préférence à toute autre méthode. Elles sont généralement assez coûteuses, et difficiles à mettre en oeuvre, notamment en ce qui concerne la prise en compte des conditions aux limites. Nous n'avons pas abordé cette question car elle nous entraînerait dans des problèmes techniques qui dépassent le cadre de cette revue. De plus, la discrétisation particulière de certains problèmes aux limites n'est pas encore correctement formulée, et c'est un domaine où l'activité de recherche est extrêmement importante actuellement. Les méthodes particulières sont cependant un outil extrêmement efficace, par exemple en dynamique des fluides faiblement visqueux, à cause de leur très faible dissipation, et en théorie cinétique à cause de leur caractère Lagrangien.

Références.

- C. ANDERSON and C. GREENGARD, 1985 : SIAM J. Numer. Anal. 22 pp. 413-440.
- H. BABOVSKY,
 1986 : Math. Meth. in the Appl. Sci. 8 pp. 223-233.
 1987 : A Convergence Proof for Nanbu's Boltzmann Simulation Scheme (preprint n° 119, University of Kaiserslautern, FRG).
- J.T. BEALE and A. MAJDA,
 1981 : Math. Comput. 37 pp. 243-259.
 1982 : Math. Comput. 39 pp. 1-52.
- G.A. BIRD,
 1963 : Phys. Fluids 6 p. 1518.
 1970 : Phys. Fluids 13 p. 2676.
- C.K. BIRDSALL, and A.B. LANGDON,
 1985 : Plasma Physics via Computer Simulations, Mc Graw-Hill, New-York.
- J.U. BRACKBILL,

- 1988 : J. Comput. Phys. 75 pp. 469–492.
- J.U. BRACKBILL and B.I. COHEN (editors),
1985 : Multiple Time Scales, Academic Press, New-York.
- J.U. BRACKBILL and H.M. RUPPEL,
1986 : J. Comput. Phys. 65 pp. 314–343.
- J. CHOQUIN and S. HUBERSON,
1986 : Particle Simulation of Viscous Flows (preprint, École Polytechnique, France).
- J.P. CHOQUIN and B. LUCQUIN-DESREUX,
1986 : Accuracy of the Deterministic Particle Method for the Navier-Stokes Equation (preprint).
- A.J. CHORIN,
1973 : J. Fluid. Mech. 57p. 785.
- J.P. CHRISTIANSEN,
1973 : J. Comput. Phys. 13 pp. 363–379.
- G.H. COTTET,
1982 : Méthodes Particulières pour l'Équation d'Euler dans le Plan (thesis, University Paris 6, France).
1987-a : Math. Comput. 49 pp. 407–425.
1987-b : to appear in Ann. Inst. Henri Poincaré, Anal. non linéaire.
1988 : Boundary Conditions and Deterministic Vortex Methods for the Navier–Stokes Equations (preprint).
- G.H. COTTET and S. MAS–GALLIC,
1983-a : A Particle Method to solve Transport Diffusion Equations, Part 1 : The Linear Case. (to be published).
1983-b : C.R. Acad. Sc. Paris 297 pp. 133–136.
1987 : A Particle Method to Solve transport Diffusion Equations, Part 2 : The Navier-Stokes Case (preprint, to be published).
- G.H. COTTET and P.A. RAVIART,
1984 : SIAM J. Numer. Anal. 21 p. 52.
1986 : Transp. Thory Stat. Phys. 15 pp. 1–31.
- P. DEGOND and F. GUYOT,
1988 : Particle Simulations of the Semiconductor Boltzmann Equation for One Dimensional Inhomogeneous Structures (preprint, École Polytechnique, France).
- P. DEGOND and F.J. MUSTIELES,
1987 : A Deterministic Approximation of Diffusion Equations using Particles (preprint, École Polytechnique, France).
- S.M. DESHPANDE,

- 1978 : Dept. Aero. Engng. Indian Inst. Science Report 78, FM 4.
- R.A. GINGOLD and J.J. MONAGHAN,
1982 : J. Comput. Phys. 46 pp. 429–453.
- C. GREENGARD,
1986 : Math. Comput. 47 pp. 387–398.
- L. GREENGARD and V. ROKHLIN,
1987 : J. Comput. Phys. 73 pp. 325–348.
- O.E. HALD,
1979 : SIAM J. Numer. Anal. 16 pp. 726–755.
- F.H. HARLOW,
1956 : J. Assoc. Comp. Mach. 3–4p. 137.
1964 : in Meth. Comp. Phys. vol 3, p. 319, Academic Press, New-York.
- R.W. HOCKNEY and J.W. EASTWOOD,
1981 : Computer Simulations using Particles, Mc Graw-Hill, New-York.
- C. LECOT,
1988 : A Direct Simulation Monte Carlo Scheme and Uniformly Distributed Sequences for Solving the Boltzmann Equation (preprint n° 131, University of Kaiserslautern, FRG).
- A. LEONARD,
1980 : J. Comput. Phys. 37 pp. 289–335.
1985 : Ann. Rev. Fluid Mech. 17 pp. 523–559.
- S. MAS-GALLIC,
1987 : Transp. Theory Stat. Phys. 16 pp. 855–887.
- S. MAS-GALLIC, and P. DEGOND,
1988 : The Weighted Particle Method for Convection-Diffusion Equations, Part 1 : The Case of an Isotropic Viscosity, and Part 2 : the Anisotropic Case (preprint, École Polytechnique, France).
- S MAS-GALLIC and F. POUPAUD,
1987 : To appear in Transp. Theory Stat. Phys.
- S. MAS-GALLIC and P.A. RAVIART,
1987-a : Numer. Math. 51 pp. 323–352.
1987-b : Particle Approximation of Convection-Diffusion Problems (unpublished).
- J.J. MONAGHAN,
1982 : SIAM J. Sci. Stat. Comput. 3pp. 422–433.
- J.J. MONAGHAN and R.A. GINGOLD,
1983 : J. Comput. Phys. 32 pp. 374–389.
- K. NANBU
1982 J. Phys. Soc. Jpn. 49 p. 2042.

1986 : in "Proceedings of the 15-th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Grado, Italy", V. Boffi and C. Cercignani, editors, p. 369, Teubner, Stuttgart.

H. NEUNZERT, and J. WICK,

1980 : in Mathematical Method of Plasma Physics, R. Kress and J. Wick editors, p. 271, Verlag Peter D. Lang, Frankfurt a. M, Bern, Cirencester.

B. NICLOT, P. DEGOND and F. POUPAUD,

1988 : Deterministic Particle Simulations of the Boltzmann Transport Equation of Semiconductors (preprint) J. Comput. Phys., 78 pp 313-349.

OVADIA

1988 : Internal Report (Centre d'Études de Limeil-Valenton, France).

OVADIA and P.A. RAVIART,

1986 : Internal Report (Centre d'Études de Limeil-Valenton, France).

P.A. RAVIART,

1985 : in "CIME Course on Numerical Methods in Fluid Dynamics, Como, July 1983", Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1127, Springer-Verlag, Berlin.

1987 : Cours de l'École d'été CEA-EDF-INRIA, Juillet 1987.

L. REGGIANI (editor)

1985 : Hot-Electron Transport in Semiconductors, in Topics in Applied Physics vol. 58, Springer-Verlag, Berlin.

V. ROKHLIN

1983 : J. Comput. Phys. 60 pp. 187-207.

L. ROSENHEAD 1931 : Proc. Roy. Soc. London A 134 pp. 170-192.