

Analyse numérique
Conservation de la charge dans les codes PIC

Régine Barthelmé

IRMA, université Louis-Pasteur, 67084 Strasbourg, France

Reçu le 30 août 2004 ; accepté après révision le 1^{er} septembre 2005

Présenté par Philippe G. Ciarlet

Résumé

Cette Note présente une formulation intégrale originale de la méthode de déposition de la charge et du courant, proposée par Villasenor et Buneman en 1992, assurant la conservation de la charge dans les codes PIC. Cette version intégrale s'étend directement à des fonctions de forme splines d'ordre supérieur, dont l'usage produit moins de bruit numérique. On obtient ainsi une méthode numérique conservant la charge pour des facteurs forme d'ordre élevé sur des maillages cartésiens uniformes. Le cas non uniforme se déduit aisément à l'ordre un. *Pour citer cet article : R. Barthelmé, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005).*

© 2005 Publié par Elsevier SAS pour l'Académie des sciences.

Abstract

Charge conservation in PIC codes. This Note introduces a new integral form of the charge and current deposition scheme given in 1992 by Villasenor and Buneman, which permits the conservation of charge in PIC codes. This integral form extends directly to higher order spline shape factors, whose use produces less numerical noise. We thus get a discrete charge conserving method for high order shape factors. This method extends easily to nonuniform Cartesian grids for first order shape factors. *To cite this article: R. Barthelmé, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005).*

© 2005 Publié par Elsevier SAS pour l'Académie des sciences.

Abridged English version

In the numerical resolution of the Vlasov–Maxwell system with PIC codes, one needs to interpolate the charge and current densities from the particle positions to the grid. Suppose the discrete differential operators for Maxwell verify $\text{div curl} = 0$ and the initial electric field verifies Gauss's law at $t = 0$. If the interpolated charge and current densities satisfy the discrete version of the charge conservation equation (1), then the Ampère–Faraday solution verifies automatically the electric Gauss law at each time step. The currents will be computed here at locations for a Maxwell discretization by a Yee scheme, where we have such differential operators.

First, we recall the process of charge assignment on a uniform Cartesian two-dimensional grid, with grid spacing Δx and Δy in x and y directions and nodes coordinates (X_i, Y_j) . We define a dual grid by taking the midpoints of the initial grid edges and note their coordinates $(X_{i+1/2}, Y_{j+1/2})$. We denote $S^m = (S^0)^{*(m+1)}$ the m th order spline

Adresse e-mail : barthelm@math.u-strasbg.fr (R. Barthelmé).

obtained by convolution, with $S^0 = \mathbb{1}_{[-1/2, 1/2[}$. We scale it by denoting $S_{\Delta x}^m(x) = \frac{1}{\Delta x} S^m(\frac{x}{\Delta x})$. The contribution of a particle at position (x^n, y^n) at time t^n to the discrete charge density is given at node (X_i, Y_j) and time t^n by

$$\rho_{i,j}^n = q S_{\Delta x}^m(X_i - x^n) S_{\Delta y}^m(Y_j - y^n).$$

We call the function $S_{\Delta x}^m(\cdot - x^n) S_{\Delta y}^m(\cdot - y^n)$ the m th order shape factor. Its support, centered at the particle location, is of $(m + 1)$ cells size. Hence only the $(m + 1)^2$ particle nearest nodes may have nonzero charge density values. Due to the spline properties, we can see this charge assignment equivalently as the evaluation of the m th order shape factor, or as the integration of a charged cloud (the $(m - 1)$ th order shape factor) over the dual grid cell centered at the node (see Fig. 1(a) for first order shape factor).

Then we give an analytic version of the Villasenor–Buneman current assignment. We suppose that the particle trajectory during $[t^n, t^{n+1}[$ is a straight line. The initial geometric point of view for first order shape factors ($m = 1$) computes the charge, represented by a uniform, one cell sized cloud, crossing a dual edge, that is, it computes a trapeze surface (see Fig. 1(b)). It is equivalent to the new integral formulation (2). This last formulation extends directly to higher order splines ($m \geq 1$) (3). Due to the spline property (4), we can then verify analytically that the discrete charge conservation equation is satisfied.

We next extend the Villasenor–Buneman method on a nonuniform Cartesian two-dimensional grid in the first order case. We note now $h_{i+1/2}^x, h_{j+1/2}^y$ the grid spacings, and h_i^x, h_j^y the dual grid spacings. The charge distribution by area weighting extends easily (5) and gives the discrete charge density (6). We can again derive a current density formulation (7) which satisfies the discrete version of (1). The computed formulation (8) is very close to that of Villasenor–Buneman.

The methods extend naturally to three-dimensional spaces, by taking for the shape functions tensor products of three one-dimensional shape functions.

We finally present numerical results which show the advantage to conserve charge (Fig. 2) and the interest of using higher order shape factors to reduce the numerical noise (Fig. 3).

1. Introduction

Dans la résolution numérique du système des équations de Vlasov et Maxwell par une méthode PIC (Particle-In-Cell) [2], la fonction de distribution f est représentée par un nombre fini de pseudo particules évoluant dans le domaine d'observation, alors que les champs auto-consistants sont calculés sur un maillage donné de ce domaine. Des étapes de projections de la grille sur les particules et des particules sur la grille sont donc nécessaires. Néanmoins, elles conduisent à des valeurs des densités de charge et de courant ne satisfaisant qu'approximativement la version discrète de l'équation de conservation de la charge

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0. \quad (1)$$

Or au niveau continu, cette dernière relation avec la propriété $\text{div } \mathbf{rot} = 0$, assure que la solution des équations d'Ampère et de Faraday avec conditions initiales satisfaisant les lois de Gauss, vérifie les lois de Gauss pour tout temps. Si on dispose d'opérateurs différentiels discrets vérifiant $\text{div } \mathbf{rot} = 0$, il faut encore que l'Éq. (1) discrète soit satisfaite exactement afin d'éviter que l'erreur sur la loi de Gauss électrique ne devienne grande, et les résultats non physiques qui s'en suivent.

Dans la section suivante, nous rappelons comment la charge est déposée sur les nœuds d'un maillage cartésien uniforme par la méthode PIC, et donnons plusieurs interprétations de cette action.

Ensuite, nous donnons une version analytique du calcul du courant par la méthode de Villasenor–Buneman [4], ce qui nous permettra de l'étendre à des facteurs forme d'ordre supérieur et de vérifier mathématiquement qu'il assure la conservation de la charge.

Enfin, nous étendons la distribution de la charge et le calcul du courant de Villasenor–Buneman d'ordre un à des maillages cartésiens non uniformes.

Finalement, nous donnons deux illustrations numériques qui montrent l'avantage de conserver la charge et l'intérêt d'augmenter l'ordre des facteurs formes pour diminuer le bruit numérique.

2. Généralisation de la méthode de Villasenor–Buneman à des ordres supérieurs sur des maillages cartésiens uniformes

2.1. Calcul de la densité de charge dans la méthode PIC

Plaçons nous d’abord en une dimension d’espace. Notons $X_i = i \Delta x$ les nœuds d’un maillage uniforme de pas Δx . La densité de charge discrète est la somme des contributions de chaque particule. Par linéarité, il suffit d’expliquer le processus d’assignement de charge pour une seule particule. Notons x^n la position de la particule à l’instant $t^n = n \Delta t$, où Δt est le pas de temps, et q sa charge.

Pour une fonction $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, nous noterons $f_{\Delta x}(x) = \frac{1}{\Delta x} f(\frac{x}{\Delta x})$. Soient S^0 la spline d’ordre 0 : $S^0(x) = \mathbb{1}_{[-1/2, 1/2]}(x)$, et S^m , $m \geq 1$, les splines d’ordre supérieur obtenues par convolution : $S^m = (S^0)^{*m}$.

La fonction $S_{\Delta x}^m(\cdot - x^n)$, à support de longueur $(m + 1)\Delta x$ centré en x^n , est appelée fonction de forme ou facteur forme d’ordre m . Pour distribuer la charge à l’ordre $m \geq 0$, on évalue le facteur forme d’ordre m aux nœuds du maillage, ce qui fournit $m + 1$ valeurs non nulles aux nœuds les plus proches de la particule :

$$\rho_i^n = q S_{\Delta x}^m(X_i - x^n).$$

Remarque 1. Par définition des splines, on peut également écrire, pour $m \geq 1$,

$$\rho_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{X_{i-1/2}}^{X_{i+1/2}} q S_{\Delta x}^{m-1}(x - x^n) dx.$$

L’évaluation du facteur forme d’ordre m en X_i est donc équivalente à l’intégration du facteur forme d’ordre $m - 1$ sur la maille de longueur Δx centrée en X_i . A l’ordre 1, on retrouve le point de vue CIC (Cloud In Cell), où la particule est représentée par un nuage uniformément chargé de taille une maille, centré en la particule, i.e. le facteur forme d’ordre 0, et la contribution au nœud X_i est proportionnelle à l’intersection de ce nuage avec la maille centrée en X_i , i.e. l’intégrale du facteur forme d’ordre 0 sur la maille centrée en X_i .

Remarque 2. Le fait que $\int_{\mathbb{R}} S_{\Delta x}^{m-1}(x - x^n) dx = 1$ assure la conservation de la charge totale.

En dimension supérieure, on considère des facteurs formes qui sont produits tensoriels de facteurs formes unidimensionnels.

Plaçons nous en deux dimensions pour expliquer la méthode de Villasenor–Buneman de calcul du courant.

2.2. Calcul du courant satisfaisant l’équation de conservation de la charge

Étant connues deux positions consécutives d’une particule x^n et x^{n+1} , on veut interpoler le courant créé par ce déplacement. On suppose la trajectoire de la particule linéaire entre deux positions connues. Dans leur article [4], Villasenor et Buneman représentent la particule chargée par un nuage rectangulaire de la taille d’une maille, uniformément chargé, centré en la particule, qui est en fait le facteur forme d’ordre 0. Ils en déduisent le courant au point $(X_{i+1/2}, Y_j)$ comme étant proportionnel à la surface d’un trapèze représentant la quantité de charge ayant traversé le segment $\{X_{i+1/2}\} \times [Y_{j-1/2}, Y_{j+1/2}]$ (voir Fig. 1(b)).

On obtient le même résultat en intégrant le nuage particulaire sur l’arête $\Gamma = \{X_{i+1/2}\} \times [Y_{j-1/2}, Y_{j+1/2}[$ durant l’intervalle de temps $[t^n; t^{n+1}[$:

$$\begin{aligned} J_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{n+\frac{1}{2}} &= \frac{q}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{|\Gamma|} \int_{\Gamma} \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{n} S_{\Delta x}^0(x - x(t)) S_{\Delta y}^0(y - y(t)) d\sigma(x, y) dt \\ &= \frac{q}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{\Delta y} \int_{Y_{j-1/2}}^{Y_{j+1/2}} v_x^{n+\frac{1}{2}} S_{\Delta x}^0(X_{i+\frac{1}{2}} - x(t)) S_{\Delta y}^0(y - y(t)) dy dt \end{aligned}$$

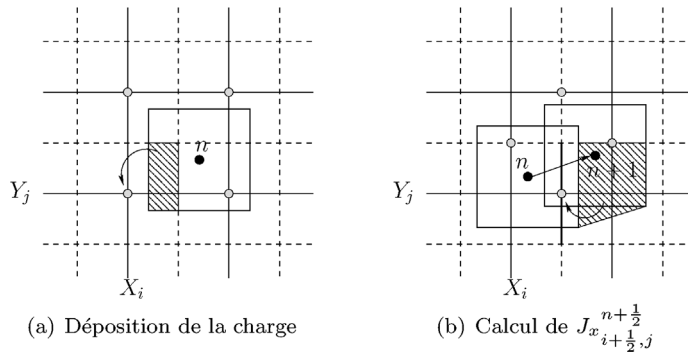


Fig. 1. Méthode de Villasenor–Buneman à l'ordre 1.

Fig. 1. The Villasenor–Buneman method of 1st order.

$$= \frac{q}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} v_x^{n+\frac{1}{2}} S_{\Delta x}^0(X_{i+\frac{1}{2}} - x(t)) S_{\Delta y}^1(Y_j - y(t)) dt. \tag{2}$$

Cette formulation du courant s'étend alors sans peine aux ordres supérieurs. On trouvera des calculs détaillés à l'ordre $m = 2$ dans [1]. On a le résultat suivant :

Proposition 2.1. Soit $m \in \mathbb{N}^*$. Les densités de charge et de courant définies pour tous i, j par

$$\begin{aligned} \rho_{i,j}^n &= q \sum_k S_{\Delta x}^m(X_i - x_k^n) S_{\Delta y}^m(Y_j - y_k^n), \\ J_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{n+\frac{1}{2}} &= q \sum_k \frac{(v_x^{n+\frac{1}{2}})_k}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} S_{\Delta x}^{m-1}(X_{i+\frac{1}{2}} - x_k(t)) S_{\Delta y}^m(Y_j - y_k(t)) dt, \\ J_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} &= q \sum_k \frac{(v_y^{n+\frac{1}{2}})_k}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} S_{\Delta x}^m(X_i - x_k(t)) S_{\Delta y}^{m-1}(Y_{j+\frac{1}{2}} - y_k(t)) dt, \end{aligned} \tag{3}$$

satisfont la version discrète de l'équation de conservation de la charge.

Pour démontrer cette proposition, on utilise la propriété suivante des splines :

$$\frac{dS^m}{dx}(x) = S^{m-1}\left(x + \frac{1}{2}\right) - S^{m-1}\left(x - \frac{1}{2}\right). \tag{4}$$

3. Adaptation de la méthode de VB d'ordre 1 à des maillages cartésiens non uniformes

3.1. Répartition de la charge

Notons à présent $X_0 < X_1 < \dots < X_{N_x}$ et $Y_0 < Y_1 < \dots < Y_{N_y}$ les nœuds dans les directions respectives x et y d'un maillage cartésien non uniforme du domaine de calcul. Les milieux de ces arêtes, notés $X_{i+\frac{1}{2}} = (X_i + X_{i+1})/2$ et $Y_{j+\frac{1}{2}} = (Y_j + Y_{j+1})/2$ génèrent le maillage dual. Les longueurs des arêtes sont notées $h_{i+\frac{1}{2}}^x = X_{i+1} - X_i$ et $h_{j+\frac{1}{2}}^y = Y_{j+1} - Y_j$, alors que celles des arêtes duales sont notées $h_i^x = X_{i+\frac{1}{2}} - X_{i-\frac{1}{2}}$ et $h_j^y = Y_{j+\frac{1}{2}} - Y_{j-\frac{1}{2}}$.

Étant donnée une particule de position $(x^n, y^n) \in [X_i, X_{i+1}[\times [Y_j, Y_{j+1}[$, sa charge est répartie aux quatre nœuds les plus proches par interpolation linéaire :

$$\begin{aligned} \rho_{i,j}^n &= \frac{q}{h_i^x h_j^y} \left(\frac{X_{i+1} - x^n}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \right) \left(\frac{Y_{j+1} - y^n}{h_{j+\frac{1}{2}}^y} \right), & \rho_{i+1,j}^n &= \frac{q}{h_{i+1}^x h_j^y} \left(\frac{x^n - X_i}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \right) \left(\frac{Y_{j+1} - y^n}{h_{j+\frac{1}{2}}^y} \right), \\ \rho_{i,j+1}^n &= \frac{q}{h_i^x h_{j+1}^y} \left(\frac{X_{i+1} - x^n}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \right) \left(\frac{y^n - Y_j}{h_{j+\frac{1}{2}}^y} \right), & \rho_{i+1,j+1}^n &= \frac{q}{h_{i+1}^x h_{j+1}^y} \left(\frac{x^n - X_i}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \right) \left(\frac{y^n - Y_j}{h_{j+\frac{1}{2}}^y} \right). \end{aligned} \tag{5}$$

La charge totale est bien conservée. Le facteur forme dépend à présent du nœud considéré :

$$\rho_{i,j}(t) = q S_i^{1,x}(x(t)) S_j^{1,y}(y(t)) \tag{6}$$

avec

$$S_i^{1,x}(x) = \frac{1}{h_i^x} \left(\frac{x - X_{i-1}}{X_i - X_{i-1}} \mathbb{1}_{[X_{i-1}, X_i[}(x) + \frac{X_{i+1} - x}{X_{i+1} - X_i} \mathbb{1}_{[X_i, X_{i+1}[}(x) \right)$$

et

$$S_j^{1,y}(y) = \frac{1}{h_j^y} \left(\frac{y - Y_{j-1}}{Y_j - Y_{j-1}} \mathbb{1}_{[Y_{j-1}, Y_j[}(y) + \frac{Y_{j+1} - y}{Y_{j+1} - Y_j} \mathbb{1}_{[Y_j, Y_{j+1}[}(y) \right).$$

3.2. Calcul de la densité de courant

Le développement de

$$\frac{\rho_{i,j}^{n+1} - \rho_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{d}{dt} (q S_i^{1,x}(x(t)) S_j^{1,y}(y(t))) dt$$

permet de vérifier que les courants

$$J_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{q v_x^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \mathbb{1}_{[X_i, X_{i+1}[}(x(t)) S_j^{1,y}(y(t)) dt, \tag{7}$$

$$J_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{q v_y^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{1}{h_{j+\frac{1}{2}}^y} \mathbb{1}_{[Y_j, Y_{j+1}[}(y(t)) S_i^{1,x}(x(t)) dt$$

satisfont la version discrète de l'équation de conservation de la charge.

Par exemple, lorsque la particule reste dans la maille $[X_i, X_{i+1}[\times [Y_j, Y_{j+1}[$ pour $t \in [t^n, t^{n+1}[$, on obtient quatre courants non nuls : $J_{x_{i+1/2},j}^{n+1/2}$, $J_{x_{i+1/2},j+1}^{n+1/2}$, $J_{y_{i,j+1/2}}^{n+1/2}$, $J_{y_{i+1,j+1/2}}^{n+1/2}$. En particulier,

$$J_{x_{i+\frac{1}{2},j}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{q}{\Delta t} \frac{h_j^y}{h_j^y} \frac{x^{n+1} - x^n}{h_{i+\frac{1}{2}}^x} \frac{Y_{j+1} - y^n + Y_{j+1} - y^{n+1}}{2 h_{j+\frac{1}{2}}^y}. \tag{8}$$

4. Illustrations numériques

La Fig. 2 représente un faisceau de particules chargées injectées à vitesse constante, soumises à un champ électrique uniforme extérieur, dans l'espace (x, y) après 200 itérations. Par la méthode classique, la contrainte de Gauss électrique n'est plus satisfaite et des phénomènes non physiques se produisent (attraction de particules de même charge), par contre en calculant le courant par la méthode de Vilasenor–Buneman (VB) le champ électrique vérifie la contrainte de Gauss et le comportement du faisceau est plus réaliste.

Simulons l'instabilité de Weibel avec les mêmes paramètres que dans [3]. La Fig. 3 représente les particules dans l'espace (v_x, x) , le quart des particules de plus petites vitesses étant translaté à gauche, le quart des particules de plus grandes vitesses étant translaté à droite, et une coupe du champ magnétique pour des calculs du courant utilisant la méthode de VB d'ordre 1 et la nouvelle méthode d'ordre 2. On constate que l'augmentation de l'ordre des facteurs formes permet de réduire le bruit numérique.

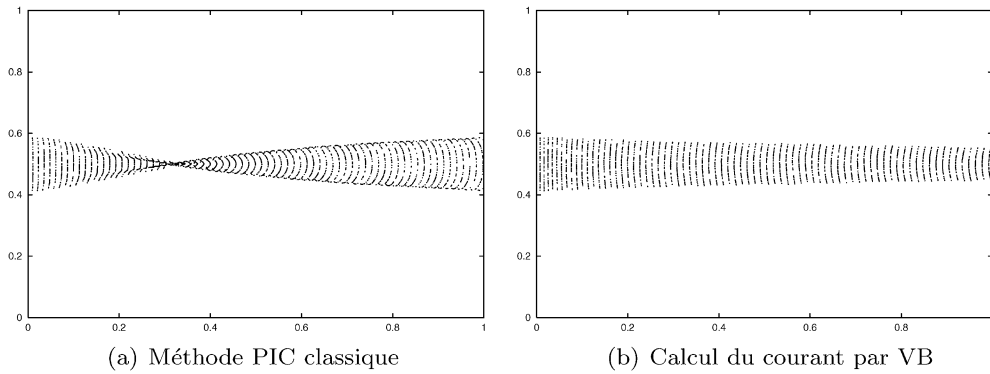


Fig. 2. Modélisation d'un faisceau de particules chargées (voir texte pour les conditions).

Fig. 2. Modelling of a charged particle beam (see text for details).

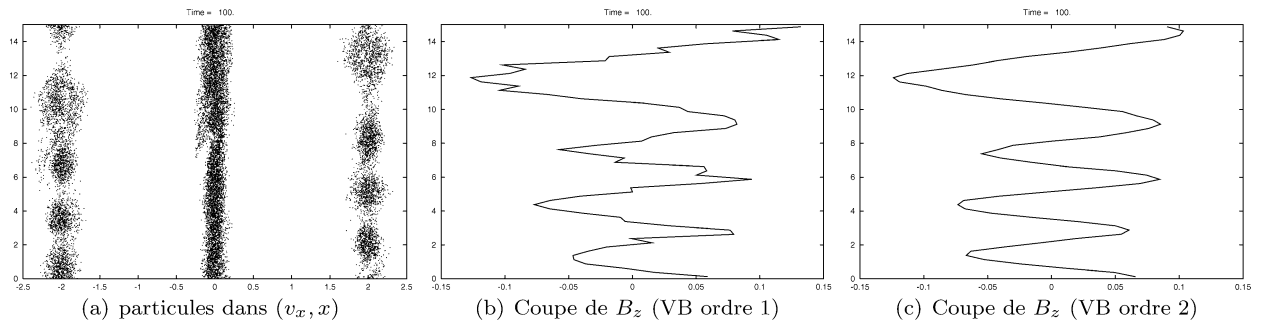


Fig. 3. Modélisation des particules dans l'espace (v_x, x) .

Fig. 3. Modelling of particles in (v_x, x) space.

Références

- [1] R. Barthelmé, C. Parzani, Numerical charge conservation in Particle-In-Cell codes, in: CEMRACS 2003 Proceedings, IRMA Series in Mathematics and Theoretical Physics (EMS).
- [2] C.K. Birdsall, A.B. Langdon, Plasma Physics via Computer Simulation, McGraw-Hill, New York, 1995.
- [3] R.L. Morse, C.W. Nielson, Numerical simulation of the Weibel instability in one and two dimensions, Phys. Fluids 14 (1971) 830.
- [4] J. Villasenor, O. Buneman, Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers, Comput. Phys. Commun. 69 (1992) 306–316.