



HAL
open science

Simulation 3D d'une décharge couronne pointe-plan, dans l'air : calcul haute performance, algorithmes de résolution de l'équation de Poisson et analyses physiques

Joseph-Marie Plewa

► To cite this version:

Joseph-Marie Plewa. Simulation 3D d'une décharge couronne pointe-plan, dans l'air : calcul haute performance, algorithmes de résolution de l'équation de Poisson et analyses physiques. Astrophysique [astro-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2017. Français. NNT : 2017TOU30184 . tel-01978730

HAL Id: tel-01978730

<https://theses.hal.science/tel-01978730>

Submitted on 11 Jan 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)

Présentée et soutenue par :

Joseph-Marie Plewa

le vendredi 13 octobre 2017

Titre :

Simulation 3D d'une décharge couronne pointe-plan dans l'air:
calcul haute performance, algorithmes de résolution de l'équation de Poisson
et analyses physiques

École doctorale et discipline ou spécialité :

ED GEET : Ingénierie des PLASMAS

Unité de recherche :

Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie (LAPLACE) UMR 5213

Directeur/trice(s) de Thèse :

O. Eichwald, Professeur à l'Université Toulouse 3, LAPLACE Toulouse

O. Ducasse, Maître de conférences à l'Université Toulouse 3, LAPLACE Toulouse

Jury :

C. Laux, Professeur à CentraleSupélec, EMC2 Paris	Rapporteur
A. Rhallabi, Professeur à l'Université de Nantes, IMN Nantes	Rapporteur
M. Yousfi, Directeur de recherche au CNRS, LAPLACE Toulouse	Président
N. Bonifaci, Chargée de recherche au CNRS, G2Elab Grenoble	Examinatrice
O. Eichwald, Professeur à l'Université Toulouse 3, LAPLACE Toulouse	Directeur de thèse
O. Ducasse, Maître de conférences à l'Université Toulouse 3, LAPLACE Toulouse	Co-directeur
P. Dessante, Professeur à CentraleSupélec, CentraleSupélec Paris	Invité
N. Renon, Ingénieur-calcul à l'Université Toulouse 3, CALMIP Toulouse	Invité

A Henri
A mon épouse Coralie
A mes parents
A mon frère Jérémie
A toute ma famille et mes amis

Remerciements

Ce travail de recherche a été effectué dans le cadre d'une thèse réalisé au Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie (LAPLACE) au sein du groupe Plasmas Réactifs Hors Equilibre (PRHE). Ces trois années de thèse ont été pour moi une expérience très enrichissante d'un point vue scientifique, professionnel et aussi personnel.

Je souhaite tout d'abord exprimer ma profonde gratitude à mes directeurs de thèse, Monsieur Olivier EICHWALD, professeur à l'université Toulouse 3 et Monsieur Olivier DUCASSE, Maître de conférence à l'université Toulouse 3, pour leur encadrement de haut niveau et leurs précieux conseils. Votre expérience et vos compétences accrues dans le monde de la recherche scientifique m'ont permis de mener ces travaux avec rigueur. De plus, votre amabilité et votre disponibilité ont fait un cadre de travail agréable. Ce fut un grand plaisir de travailler avec vous durant ces trois années. Je vous remercie énormément pour tout cela et pour tout ce que vous m'avez apporté.

J'adresse aussi mes remerciements à Monsieur Christophe LAUX, professeur à CentraleSupélec (EMC2, Paris) et à Monsieur Ahmed RHALLABI, professeur à l'université de Nantes (IMN, Nantes) d'avoir analysé et rapporté sur mes travaux de thèse.

Je souhaite ensuite remercier Monsieur Mohammed YOUSFI, directeur de recherche au CNRS (LAPLACE, Toulouse) et Madame Nelly BONIFACI, chargée de recherche au CNRS (G2Elab, Grenoble) d'avoir accepté d'être examinateurs et pour l'intérêt porté à mon travail.

Je remercie également Monsieur Philippe DESSANTE, professeur à CentraleSupélec (GEEPS, Gif-Sur-Yvette) et Monsieur Nicolas RENON, Ingénieur-calcul à l'université Toulouse 3 (CALMIP) d'avoir accepté d'être membres invités lors de ma soutenance de thèse. Je vous remercie aussi pour la bonne entente et votre précieuse aide dans l'avancement du projet.

Je tiens à remercier tous les membres de l'équipe PRHE avec qui ce fut un réel plaisir de travailler. Je remercie également l'ensemble des personnes que j'ai côtoyé de près comme de loin durant la thèse, collègues et amis.

Merci à ma famille et tout particulièrement un grand merci à mes parents qui m'ont toujours encouragé dans mes projets. Merci également à mon frère Jérémie, avec qui j'ai toujours tout partagé, tu es d'un grand soutien. Je remercie aussi Henri pour tous ses encouragements.

Enfin, je tiens à remercier mon épouse avec qui je partage ma vie, Coralie, tu es ma source d'inspirations et de motivations. Merci de m'avoir soutenu dans ce projet, merci pour tes encouragements constants et merci pour ta confiance.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE 1

CHAPITRE 1 LES DECHARGES COURONNES : CARACTERISTIQUES

EXPERIMENTALES ET SIMULATIONS 5

1.1	INTRODUCTION	5
1.2	LES DECHARGES COURONNES	5
1.2.1	GENERALITES	5
1.2.2	DECHARGES COURONNES EN REGIME DE TENSION CONTINUE	7
1.2.2.1	Régime « onset streamer »	8
1.2.2.2	Régime « glow »	8
1.2.2.3	Régime « breakdown streamer »	10
1.2.3	DECHARGES COURONNES EN REGIME DE TENSION PULSEE	12
1.3	ETAT DE L'ART DE LA SIMULATION 3D DES STREAMERS	14
1.3.1	MODELES COMPORTEMENTAUX	14
1.3.2	MODELES PARTICULAIRES	17
1.3.3	MODELES FLUIDES	19
1.4	CHOIX DU MODELE ET STRATEGIE DE RESOLUTION	23
1.4.1	DESCRIPTION DU MODELE PHYSIQUE	23
1.4.2	ARCHITECTURE D'UN SUPERCALCULATEUR ET CALCUL HAUTE PERFORMANCE	27
1.4.2.1	Le supercalculateur EOS	27
1.4.2.2	Les différents modes de parallélisation	30
1.5	CONCLUSION	35

CHAPITRE 2 COMPARAISON DES METHODES DE RESOLUTION 3D DE

L'EQUATION DE POISSON EN CALCUL HAUTE PERFORMANCE 37

2.1	INTRODUCTION	37
2.2	DISCRETISATION 3D DE L'EQUATION DE POISSON	37
2.3	METHODES NUMERIQUES DE RESOLUTION DE L'EQUATION DE POISSON	40
2.3.1	DESCRIPTION DES METHODES ITERATIVES SOR R&B ET BiCGSTAB	40
2.3.1.1	SOR R&B	41
2.3.1.2	BiCGSTAB	42

2.3.2	PRINCIPE DE LA METHODE DIRECTE MUMPS	44
2.4	ETUDES COMPARATIVES DE L'EFFICACITE DES METHODES NUMERIQUES DANS LE CADRE DU CALCUL HAUTE PERFORMANCE	47
2.4.1	ETUDES PRELIMINAIRES DANS LE CADRE DE LA RESOLUTION DE L'EQUATION DE LAPLACE	47
2.4.1.1	Conditions de simulation	47
2.4.1.2	Sensibilité de la méthode SOR R&B aux valeurs du rayon spectral	48
2.4.1.3	Sensibilité des méthodes au mode découpage du domaine	52
2.4.1.4	Sensibilité des méthodes à la répartition des cœurs sur les nœuds de calcul	55
2.4.1.5	Etude de la précision des solutions numériques	63
2.4.1.6	Comparaison des processus de parallélisation	64
2.4.2	RESOLUTION DE L'EQUATION DE POISSON EN REGIME INSTATIONNAIRE	66
2.4.2.1	Conditions de simulation	66
2.4.2.2	Solution à $t = 0s$	68
2.4.2.3	Comparaison des performances des trois méthodes	70
2.5	CONCLUSION	76

CHAPITRE 3 TRAITEMENT 3D DES EQUATIONS DE TRANSPORT ET VALIDATION DU CODE DE SIMULATION **77**

3.1	INTRODUCTION	77
3.2	TRAITEMENT DU TRANSPORT DES FORTS GRADIENTS DE DENSITE	77
3.2.1	PROBLEMATIQUE	77
3.2.2	L'ALGORITHME MUSCL	80
3.3	TESTS 3D PRELIMINAIRES DANS LE CAS DE LA RESOLUTION DE L'EQUATION DE CONTINUITE SANS TERMES SOURCES.	82
3.3.1	DESCRIPTION DES TESTS	82
3.3.2	TRANSPORT DE LA DENSITE AVEC UNE VITESSE CONSTANTE SELON UN DES AXES DU DOMAINE	84
3.3.3	TRANSPORT DE LA DENSITE AVEC VITESSE OSCILLANTE ET PERIODIQUE	90
3.3.4	TRANSPORT DE DENSITE AVEC VITESSE CONSTANTE SELON TROIS DIRECTIONS	92
3.4	VALIDATION DU MODELE 3D DANS LE CADRE DE LA PROPAGATION AXISYMETRIQUE D'UN STREAMER MONO-FILAMENTAIRE	94
3.4.1	PRESENTATION DU CODE 3D	94

3.4.2	CONDITIONS DE SIMULATION	96
3.4.3	RESULTATS	97
3.5	CONCLUSION	103

CHAPITRE 4 SIMULATION 3D D'UNE DECHARGE COURONNE DANS UNE CONFIGURATION POINTE-PLAN EN REGIME PULSE **105**

4.1	INTRODUCTION	105
4.2	CONDITIONS DE SIMULATION	105
4.3	RESULTATS	108
4.4	CONCLUSION	124

CONCLUSION GENERALE **127**

ANNEXE : EXPRESSION DES DONNEES DE BASE DES ELECTRONS ET DES IONS DANS L'AIR EN FONCTION DU CHAMP REDUIT **129**

BIBLIOGRAPHIE **131**

INDEX DES NOTATIONS **137**

ABSTRACT **141**

RESUME **142**

Introduction générale

Les décharges électriques dans les gaz sont connues de l'homme depuis longtemps au travers des phénomènes naturels comme la foudre ou les aurores boréales. Cependant, leur étude en laboratoire n'a véritablement commencé qu'au cours de ces deux derniers siècles grâce aux progrès effectués dans le domaine de l'électricité. Les propriétés particulières des décharges électriques ont rapidement suscité un grand intérêt dans beaucoup de domaines. Les applications actuelles dans l'industrie sont nombreuses tels que l'éclairage, les ozoneurs, les procédés de traitement des surfaces incluant le dépôt de couches minces et la gravure pour la micro-électronique, la soudure ou la vitrification des déchets. Plus récemment, les applications ont été étendues aux domaines très vastes de l'interaction avec le vivant (pour la décontamination, la stérilisation, le biomédical ou encore l'activation de la croissance des plantes) et aussi au domaine environnemental pour la dépollution d'effluents (liquide ou gazeux) notamment lorsque les polluants sont en très faible concentration dans les mélanges.

La tendance est au développement de dispositifs plasmas pouvant fonctionner directement dans l'air dans les conditions ambiantes de température et de pression. D'une façon générale ces dispositifs sont basés sur l'emploi de décharges à barrière diélectriques (DBD), de décharges couronne ou d'un mélange des deux. Indépendamment du design des électrodes, ces dispositifs ont beaucoup évolué à cause de l'apparition d'alimentations de haute tension pulsées performantes et souples d'utilisation. Celles-ci permettent de générer des plasmas froids non thermiques chimiquement très actifs en évitant le passage à l'arc électrique. De par l'intérêt que suscitent ces décharges, il existe de nombreux travaux de recherche dans la littérature consacrés à une meilleure compréhension de leurs propriétés et caractéristiques physico-chimiques. Cependant, ces études à la pression atmosphérique sont complexes pour deux raisons essentielles : La faible dimension spatiale et la très forte dynamique des phénomènes à observer et à caractériser. En effet, les décharges DBD ou couronne présentent naturellement une structure filamentaire avec la propagation de micro-décharges de quelques centaines de microns de diamètre qui traversent l'espace inter-électrode en quelques dizaines de nanosecondes. Pour mieux comprendre ces dispositifs et les optimiser, il est donc nécessaire de coupler les études expérimentales et de simulations qui dans les deux cas se trouvent confrontés aux limites de détection et de sensibilité pour les unes et de vitesse de calcul et de mémoire pour les autres.

En 2013, l'équipe PRHE (Plasmas Réactifs Hors Equilibre) du LAPLACE (Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie) a proposé le projet « Plasma ReMoVal » à l'ANR (Agence Nationale de la Recherche) dans le but de développer des outils performants de simulation multidimensionnelle des réacteurs corona validés expérimentalement. Ce projet regroupe les expertises de trois laboratoires : le LAPLACE à Toulouse, CentralSupElec à Paris et le GREMI à Orléans.

C'est dans le cadre de ce projet que s'inscrivent les travaux de cette thèse. Ils concernent la simulation 3D à l'aide du calcul haute performance d'une décharge couronne alimentée en tension pulsée entre une pointe et un plan relié à la masse. En effet, lorsque l'on applique une impulsion de haute tension entre une pointe et un plan, les lignes de champ électrique fortement resserrées autour de la pointe induisent la formation puis la propagation simultanée de plusieurs micro-décharges (ou streamers) générant ainsi une décharge couronne de structure arborescente. Dans ces conditions de rupture de symétrie, seule une simulation 3D en coordonnées cartésiennes est apte à reproduire cette structure arborescente et fournir les ordres de grandeur de l'énergie déposée et de la concentration des espèces créées durant la phase de décharge. Cependant, cette simulation 3D est très consommatrice en temps et mémoire de calcul et n'est accessible que grâce à l'utilisation d'algorithmes performants et de la puissance de supercalculateur. L'objectif principal de la thèse est donc de réaliser un code 3D pour résoudre un modèle électro-hydrodynamique complet de la décharge qui couple les équations de transport, de Poisson et de cinétique réactionnelle. Ce code 3D doit pouvoir utiliser la puissance du calcul massivement parallèle et a été conçu et développé à l'aide de la librairie MPI (Message Passing Interface) pour s'exécuter sur un supercalculateur.

Pour présenter les travaux effectués, le manuscrit est scindé en quatre chapitres principaux. Le premier chapitre rappelle les principales caractéristiques des régimes de décharge couronnes sous tension continue et pulsée en s'appuyant sur des résultats expérimentaux issus de l'équipe PRHE du LAPLACE et de la littérature. Ensuite, un état de l'art est présenté sur les modèles qui ont été utilisés pour simuler en 3D la ramification des streamers et la structure arborescente d'une décharge couronne. Enfin, sur la base de cette étude bibliographique, la dernière section du chapitre décrit le modèle physique adopté dans le cadre de cette thèse ainsi que les spécificités de sa résolution en calcul parallèle sur un super calculateur.

Le deuxième chapitre est consacré aux tests de performances de trois méthodes de résolution directes ou itératives des équations elliptiques (type équation de Poisson) discrétisées par la méthode des volumes finis sur un grand nombre de mailles et utilisant le calcul massivement parallèle. Deux méthodes sont extraites d'une librairie d'algorithmes en accès libre et une méthode est développée spécifiquement dans le cadre de cette thèse. Deux conditions de test sont décrites et exploitées : la première résout l'équation de Laplace dans une configuration statique plan/plan et la seconde propage une charge d'espace analytique représentative de celle transportée par le front d'onde d'ionisation à l'avant d'un streamer.

Le troisième chapitre est dédié dans un premier temps à l'étude paramétrique de la méthode MUSCL (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws) 3D de résolution des équations de transport des espèces chargées sous forts gradients de densité. Là aussi, des tests mathématiques spécifiques permettent de valider le comportement de la méthode sous champ de vitesse homogène ou fortement oscillant. Puis dans une dernière section, le comportement du code 3D est validé en confrontant les premiers résultats obtenus dans le

cadre d'une simulation d'une décharge mono-filamentaire axisymétrique en configuration pointe/plan avec les résultats d'une simulation 2D cylindrique.

Enfin, et avant de conclure, le dernier chapitre compare et analyse les premiers résultats d'une simulation 3D en configuration pointe/plan avec la propagation excentrée d'un, ou de deux ou quatre streamers coplanaires.

Chapitre 1 Les décharges couronnes : caractéristiques expérimentales et simulations

1.1 Introduction

Ce chapitre sensibilise le lecteur aux différentes notions requises pour la construction d'un modèle de décharge électrique de type couronne. On s'intéresse en particulier aux décharges couronnes générées entre une pointe et un plan et qui présentent une forme arborescente liée à la propagation simultanée de micro-décharges aussi appelées streamers. Sur la base de travaux expérimentaux réalisés dans une configuration d'électrodes mono-pointe/plan, la première section de ce chapitre rappelle les différents régimes de décharge couronne positive lorsque la pointe est alimentée sous tension continue (DC) puis pulsée. Les principales caractéristiques des streamers y sont revisitées. La deuxième section décrit un état de l'art de la simulation 3D des décharges couronnes de type streamer. Il fait le bilan des principaux types de modèles utilisés et résultats obtenus. Basé sur ces précédentes observations, nous décrivons ensuite les caractéristiques du modèle fluide d'ordre 1 retenu pour simuler en 3D l'électrodynamique des streamers dans une configuration pointe/plan. Enfin, et avant de conclure, la dernière section de ce chapitre, présente les spécificités du calcul parallèle haute performance sur un supercalculateur.

1.2 Les décharges couronnes

Les décharges couronnes font parties des plasmas froids non thermiques à la pression atmosphérique caractérisés par leur état hors équilibre thermodynamique et chimique. La température du gaz est dans ce cas très proche de la température ambiante alors que celle des électrons est suffisante pour permettre un taux élevé de collisions inélastiques. La majeure partie de l'énergie injectée est alors convertie en réactivité chimique et non pas en énergie thermique.

1.2.1 Généralités

D'une façon générale, les décharges couronnes apparaissent entre deux électrodes dont au moins une d'elles présente un faible rayon de courbure facilitant l'amorçage des décharges par effet de champ à des niveaux de tension raisonnable. La décharge s'amorce autour de l'électrode incurvée et son développement est limité naturellement par la chute du champ électrique géométrique lorsqu'elle s'avance dans l'espace inter-électrode. En fonction des applications, l'intérêt des décharges couronnes par rapport aux décharges à barrières diélectriques (dite DBD) est qu'elles se développent sur des distances de plusieurs cm sans induire le claquage du gaz (c'est à dire la formation d'un canal de courant disruptif entre les électrodes). Il existe différentes configurations d'électrodes permettant de créer des décharges

couronnes. La Figure 1-1 montre les configurations les plus communément utilisées qui sont de types fils/plan, pointe/plan, couteau/plan, et fils/cylindre.

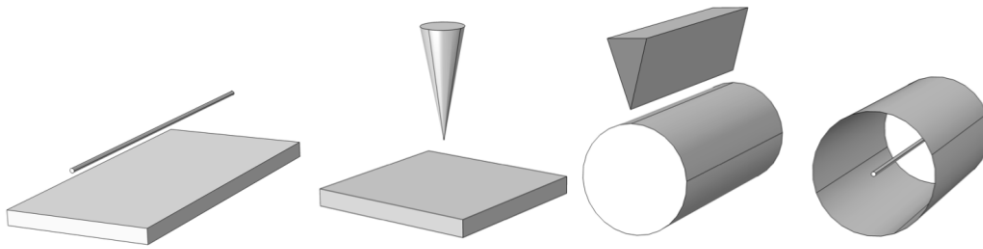


Figure 1-1 : Configurations d'électrodes pour la génération de décharges couronnes

En fonction des cas, une des électrodes peut être recouverte d'un diélectrique. Ces systèmes à géométries variables s'adaptent à une large gamme d'applications tels que par exemple la dépollution des gaz [1] [2] avec des dispositifs multi-pointes plan et fil-cylindre par exemple, le traitement de l'eau [3] avec des géométries pointes fines plan, la production d'ozone [4] en multi-pointes et fil-cylindre, le traitement de surface [5] [6] ou l'acoustique [7]. En plus de la géométrie des électrodes, le choix de la référence de masse, l'amplitude et la forme des signaux de haute tension sont autant de paramètres qui influencent la nature des décharges couronnes que nous décrirons dans la suite.

L'application d'une tension positive ou négative sur l'électrode à faible rayon de courbure va déterminer la polarité de la décharge couronne. La décharge couronne est dite positive lorsque la haute tension positive est appliquée sur l'électrode incurvée, l'autre étant reliée à la masse. Avant de décrire plus en détail les différents régimes de décharges couronnes positives, il est important de rappeler les mécanismes d'amorçage dans la configuration de base pointe/plan représentée sur la Figure 1-2.

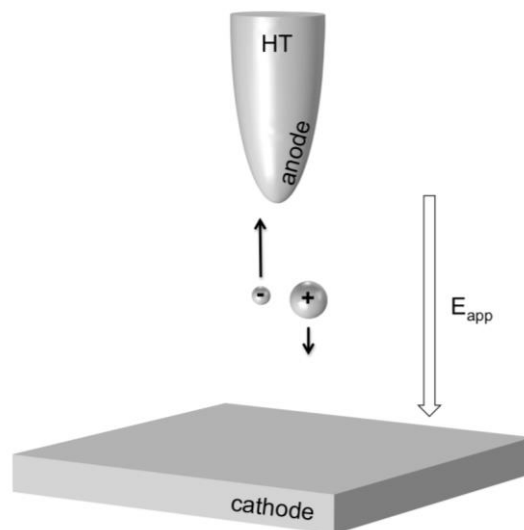


Figure 1-2 : Schéma d'un réacteur corona mono-pointe-plan

Dans cette configuration, la forte valeur du champ électrique au voisinage de la pointe est propice à l'ionisation. Le champ électrique élevé conduit à l'augmentation de l'énergie cinétique des électrons germes (créés par rayonnements cosmiques ou détachement) qui est transférée aux espèces neutres du gaz par le biais des collisions élastiques et inélastiques. Si l'énergie cinétique gagnée entre deux collisions successives est supérieure au seuil d'ionisation des espèces neutres, des avalanches électroniques s'amorcent au voisinage de la pointe. Les électrons et les ions négatifs, de par le signe de leur charge électrique, sont accélérés vers la pointe alors que les ions positifs sont à l'inverse repoussés vers le plan. Les électrons étant beaucoup plus mobiles que les ions, ils dérivent rapidement vers la pointe laissant derrière eux une charge d'espace positive induite par l'accumulation des ions positifs autour de la pointe. Cette charge d'espace écrante le champ géométrique, le champ total (somme des champs géométriques et de charge d'espace) devenant maximum devant la charge d'espace en aval de la pointe. En fonction de l'amplitude du phénomène, soit un halo lumineux se stabilise autour de la pointe (qui est à l'origine du mot couronne) soit des décharges filamenteuses se développent à partir de la pointe vers l'espace inter-électrode. Avant de caractériser les décharges couronnes sous tension positive pulsée, la section suivante introduit les différents régimes de décharge couronne sous tension positive continue (DC).

1.2.2 Décharges couronnes en régime de tension continue

On s'intéresse ici aux différents régimes de la décharge couronne pour une haute tension continue (DC) appliquée sur la pointe. La Figure 1-3 montre la caractéristique courant-tension d'une décharge couronne pointe/plan dans de l'air synthétique (80% d'azote et 20% d'oxygène) à pression atmosphérique et température ambiante. Le rayon de courbure de la pointe est de 20 μ m (donnée constructeur) et la distance inter-électrode de 7mm (la fréquence de répétition des décharges est plus stable à cette distance). Cette courbe va nous permettre d'identifier les régimes de décharge.

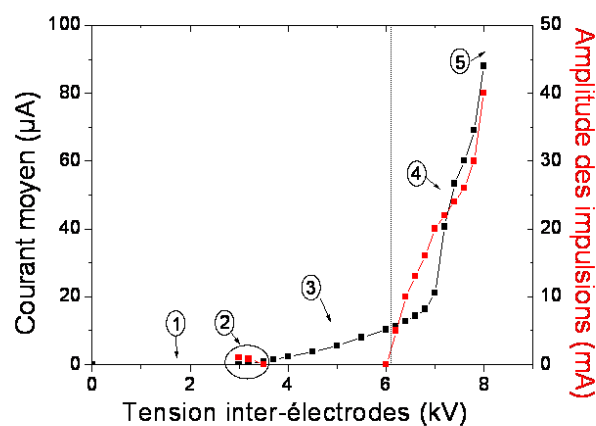


Figure 1-3 : Caractéristique courant-tension des décharges couronnes pointe/plan dans l'air sec à pression atmosphérique avec une distance inter-électrode de 7 mm [8]

L'évolution du courant moyen en fonction de l'amplitude de la tension DC peut être divisée en 5 zones indicées sur la Figure 1-3. Dans la zone 1, en dessous d'une tension seuil minimale aucun courant n'est mesuré, indiquant qu'il n'y a pas de décharges ou que le courant moyen est trop faible pour être détecté avec les instruments utilisés. A l'autre extrémité, dans la zone 5, au-delà d'une tension seuil de claquage, le courant moyen passe brusquement de quelques dizaines de μA à quelques A traduisant le passage à un régime de décharge spark. Les zones intermédiaires 2, 3 et 4 correspondent à trois régimes spécifiques de décharges couronnes que nous allons détailler ci-dessous en trois sous parties.

1.2.2.1 Régime « onset streamer »

Le régime « onset streamer », référencé par la zone 2 sur la Figure 1-3, est caractérisé par un faible courant moyen et de faibles impulsions de courant qui apparaissent de manière aléatoire avec une fréquence moyenne de quelques milliers de Hertz. L'amplitude de ces impulsions, atteignant quelques dizaines de milliampère, est représentée en rouge sur la Figure 1-3. Ces impulsions de courant proviennent de petites décharges filamenteuses qui se développent à partir de la pointe et restent localisées à son voisinage. Les décharges sont trop peu lumineuses pour être observé l'œil nu. La Figure 1-4 montre une image de la décharge en régime « onset streamer » obtenue avec une caméra intensifiée. La visualisation de l'émission de ces petites décharges filamenteuses n'est possible qu'avec une durée d'acquisition égale à une seconde.

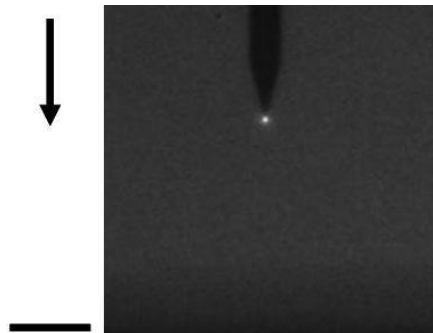


Figure 1-4 : Visualisation de la décharge couronne en régime « onset streamer » obtenue avec une caméra ICCD et une durée d'acquisition de 1s [8]

1.2.2.2 Régime « glow »

Le régime « glow » d'une décharge couronne présenté dans cette section est défini précisément dans les travaux [9] [10] [11] [12] [13] par exemple. Nous ne présentons ici que quelques caractéristiques principales.

Le régime « glow » représenté par la zone 3 sur la Figure 1-3 est caractérisé par l'augmentation de manière constante du courant moyen avec la tension. Aucun courant impulsionnel n'est observé dans cette zone. Le régime glow s'observe à l'œil nu. Une petite couronne lumineuse entoure la pointe, phénomène qui est à l'origine du nom des décharges. Sous caméra intensifiée, le halo lumineux est identique à celui montré sur la Figure 1-4 mais le temps d'acquisition pour l'observer avec la même intensité lumineuse descend à 10ms sur la Figure 1-5a. Un exemple de décharge couronne en régime « glow » est également donné sur la Figure 1-5b pour une tige se terminant en hémisphère. La décharge couronne est générée dans l'air à pression atmosphérique et température ambiante avec une distance inter-électrode de 1,5cm. La tension appliquée est de 10000 volts et le courant varie entre 10 et 42 microampères [14].

Pour ce type de décharge glow, l'espace inter-électrode peut être divisé en trois domaines. Localisé autour de la pointe, le premier domaine correspond à une zone active où le gaz est ionisé et excité à cause de la présence d'un fort champ électrique. Dans cette zone, les phénomènes d'ionisation prédominent et des avalanches électroniques de type Townsend se développent. Le second domaine correspond à une région de transition où le champ géométrique est tel que l'ionisation est compensée par les phénomènes de pertes d'électrons par attachement et recombinaison. Enfin, le dernier domaine occupe la majeure partie de l'espace inter-électrode et correspond à un espace de dérive des ions positifs créés dans la partie active de la décharge couronne. Le courant moyen mesuré est un courant de dérive ionique sur la cathode (le plan) et de dérive électronique sur l'anode (la pointe). La conservation de la densité de courant totale est assurée dans les trois domaines d'une décharge glow et à leur interface.

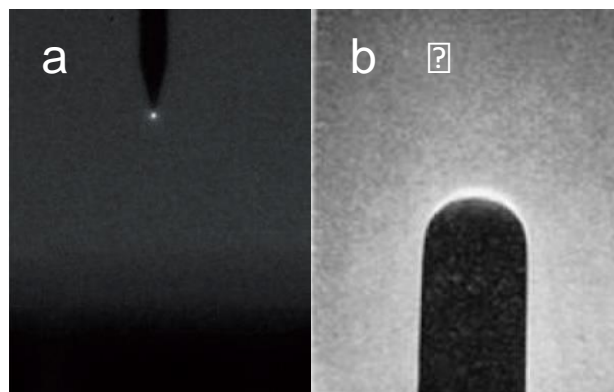


Figure 1-5 : (a) Image d'une décharge couronne en régime « glow » obtenue avec une caméra ICCD avec une durée d'acquisition de 10ms (air synthétique, distance inter-électrode de 7mm, 5000 volts sur une pointe de 20 μ m de rayon [15]). (b) Même phénomène au bout d'une tige (air, distance inter-électrode de 1,5 cm, 10000 volts [14]).

1.2.2.3 Régime « breakdown streamer »

La zone 4 de la Figure 1-3 représente le régime couronne nommé « breakdown streamer ». Ce régime est caractérisé par un courant moyen qui augmente de manière plus importante avec la tension. En effet, l'apparition de nouvelles impulsions de courant vient se superposer au régime « glow » précédemment expliqué. De plus, les amplitudes de ces impulsions de courant sont nettement plus élevées (dizaines de milliampères) que celles observées dans le régime « onset streamer » et augmentent avec la tension. Ces impulsions de courant sont dues à la propagation de décharges mono-filamentaires de quelques centaines de micromètres de diamètres qui traversent l'espace inter-électrode de la pointe vers le plan. La fréquence de répétition de ces décharges est d'environ 10kHz, tandis que leur durée de vie est de l'ordre de 100ns. En fait, chaque impulsion de courant traduit la propagation d'une onde d'ionisation ou d'un primary streamer qui se propage de la pointe vers le plan.

La Figure 1-6 illustre le phénomène de propagation d'une onde d'ionisation ainsi que la distribution de charge lors de cette propagation. Il faut garder à l'esprit que l'onde d'ionisation se propage en sens opposé de la dérive naturelle des électrons qui sont attirés vers la pointe. En fait, si la charge d'espace ionique créée devant la pointe est suffisamment intense, le champ électrique géométrique va être perturbé de telle sorte que le champ total (géométrique et de charge d'espace) sera maximum à l'avant de la charge d'espace (c'est-à-dire non plus sur la pointe mais juste un peu décalé vers le plan). De nouvelles avalanches électroniques apparaissent créant une nouvelle charge d'espace en aval de la première. Ce phénomène se reproduit de proche en proche induisant la propagation d'une onde de charge d'espace positive de la pointe vers le plan. Progressivement, un canal ionisé filamentaire se forme en amont de la charge d'espace qui draine les électrons de la zone de charge d'espace vers la pointe. La zone de charge d'espace, dans laquelle le champ électrique peut être très élevé (quelques 10^7V.m^{-1}), est très active (formation d'ions, d'espèces excitées et de radicaux) et très lumineuse.

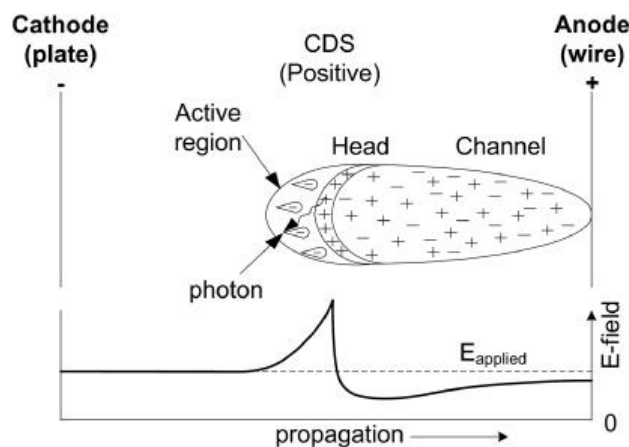


Figure 1-6: Principe de la propagation d'un primary streamer [16]

Grâce à l'imagerie rapide, on peut observer la propagation du point lumineux associé à cette zone localisée de charge d'espace, qui porte le nom d'onde d'ionisation ou de tête de streamer [17]. Le rayon du streamer (c'est-à-dire la décharge filamentaire) avoisine les quelques dizaines de micromètres et l'onde d'ionisation se propage à une vitesse d'environ 10^5m.s^{-1} [5]. Des électrons germes, créés en aval de la tête du streamer, entretiennent sa propagation et alimentent le filament en électrons qui dérivent ensuite jusqu'à la pointe. Il est couramment admis que ces électrons germes sont générés en amont de la tête du streamer par des processus de photo-ionisation.

La Figure 1-7 montre une image de la décharge filamentaire associée à une impulsion de courant. L'image intégrée du filament lumineux résulte en fait de la trace laissée par le passage de l'onde d'ionisation en se propageant de la pointe vers le plan. On constate que l'intensité lumineuse n'est pas identique le long de l'axe de propagation laissant à penser que l'intensité de l'onde d'ionisation est plus forte à son départ de la pointe. En fait, l'intensité de l'onde d'ionisation augmente en se rapprochant du plan, mais en touchant ce plan un second phénomène prend naissance dans le canal de courant formé. Ce second phénomène est associé à la propagation d'un secondary-streamer qui ré-illumine le premier tiers de l'espace inter-électrode [8].

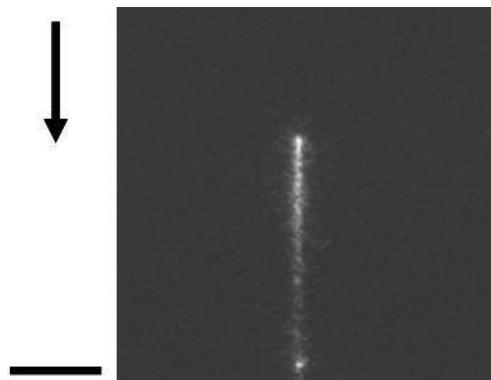


Figure 1-7 : Image d'une décharge en régime « breakdown streamer » obtenue avec une caméra ICCD pour une durée d'acquisition de $10\mu\text{s}$ [8]

Ce régime de décharge couronne DC permet des études expérimentales détaillées des caractéristiques d'un unique mono-filament. En outre, la symétrie de la décharge est un atout pour leur simulation qui peut être réalisée à l'aide de modèles 2D présentant une symétrie de révolution autour de l'axe pointe/plan. Ce type de modélisation existent depuis les années 1990 mais un nombre restreint d'entre-elles s'est attaché à confronter les résultats issus de l'expérience avec la simulation [18] [19] [20]. Cependant, en termes d'applications industrielles, le régime de décharge couronne sous tension DC n'est pas efficace à cause du très faible ensemencement en espèces actives et du faible volume occupé par les mono-filaments. L'application d'une haute tension pulsée est beaucoup plus efficace.

1.2.3 Décharges couronnes en régime de tension pulsée

D'une façon générale, lorsqu'une tension impulsionnelle est appliquée entre deux électrodes asymétriques, le régime de décharge résultant est caractérisé par la propagation simultanée de plusieurs streamers présentant une forte structure arborescente [21]. La Figure 1-8a et la Figure 1-8b montrent la structure d'une décharge couronne entre une pointe alimentée en tension pulsée et un plan.

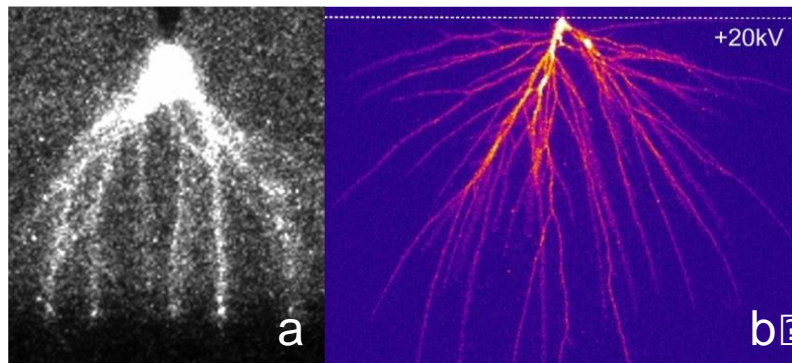


Figure 1-8 : Images ICCD de décharges couronnes en configuration pointe-plan alimentée en tension impulsionnelle : (a) air sec, distance inter-électrode de 8mm, 8kV [2], (b) air ambiant, distance inter-électrode de 40mm, 20kV [22]

La tension appliquée et le courant instantané d'une décharge couronne typique (correspondant à la Figure 1-8a) sont représentés respectivement en rouge et en noir sur la Figure 1-9.

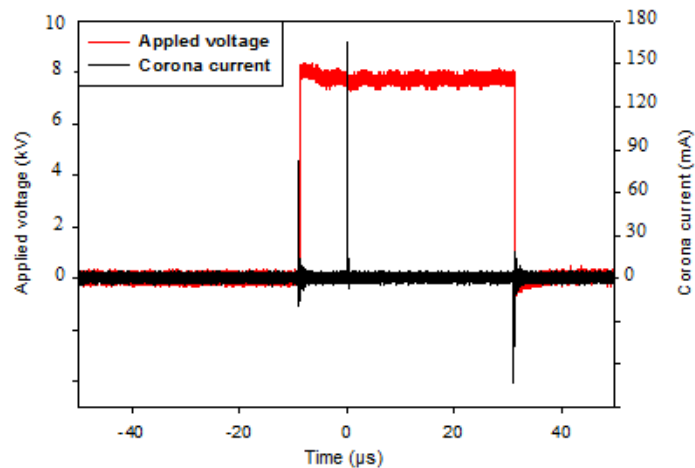


Figure 1-9 : Courant instantané de la décharge couronne pour une forme d'onde de tension impulsionnelle [2]

La décharge est générée dans l'air sec synthétique à la pression atmosphérique avec une tension d'alimentation sur la pointe de 8kV, une fréquence de répétition des pulses de tension

de 100Hz et des durées d'impulsion de 40 μ s. La distance inter-électrode est de 8mm et le rayon de courbure de la pointe est de 25 μ m.

Le courant mesuré sur la Figure 1-9 est caractérisé par trois pics durant le créneau de tension appliquée. Le premier et le troisième pic correspondent aux courants capacitifs dus aux électrodes qui forment un condensateur vu de la source de tension. Les fronts ascendant et descendant de tension génèrent donc aux instants correspondants, deux pics de courant capacitif, un premier positif puis un second négatif. Outre ces deux pics de courants superposés sur les fronts de montée et de descente de la tension, on observe un second pic d'intensité plus grande qui correspond au courant de décharge. La Figure 1-10 montre un agrandissement de ce courant instantané de décharge.

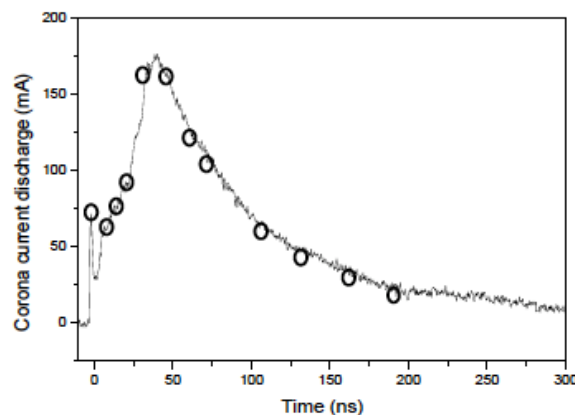


Figure 1-10 : Agrandissement du courant instantané de la décharge [2]

Si on analyse la forme du courant instantané de la décharge représentée sur la Figure 1-10, on remarque un premier pic de courant d'environ 70mA. Ce pic est corrélé à la formation de la charge d'espace créée par le champ élevé au voisinage de la pointe. Ensuite, le courant augmente régulièrement jusqu'à atteindre environ 175mA. Cet appel de courant correspond à la propagation simultanée des ondes d'ionisation (primary streamers) de la pointe vers la cathode. Les multiples filaments ionisés drainent vers la pointe les électrons captés puis démultipliés dans la tête des streamers. Le second pic de courant (à 175mA) correspond à l'arrivée (quasi-simultanée) des ondes d'ionisation sur la cathode. Dès cet instant, des streamers secondaires se développent dans les canaux ionisés en partant de la pointe et assurent la transition courant de déplacement (prédominant lors de la propagation des ondes d'ionisation) / courant de conduction (prédominant dès que les canaux ionisés relient la pointe et le plan). Enfin, le courant chute lentement à cause des phénomènes d'attachement puis de recombinaison. C'est le temps de relaxation de la décharge, jusqu'à ce qu'une autre impulsion de tension vienne induire ce même enchaînement de phénomènes.

On peut noter que si l'on applique un échelon de tension, seule la première décharge présente une très forte structure arborescente. Le nombre de branches diminue drastiquement entre la première décharge et la seconde, les décharges suivantes présentant très rapidement une

structure mono-filamentaire telle que observée sous tension DC avec une fréquence typique d'apparition de l'ordre de 10kHz. Ce passage d'une structure arborescente à une structure mono-filamentaire vient des effets mémoires d'une décharge sur l'autre. Ces effets mémoires proviennent des charges résiduelles [5] et de l'empreinte thermique [23] laissées par les décharges précédentes.

Ainsi, les décharges couronnes en régime streamer sous tension pulsée présentent naturellement une structure très arborescente qu'il n'est plus possible d'étudier à l'aide de simulations 2D présentant des symétries de révolution autour d'un axe de propagation. La rupture de symétrie nécessite le développement de codes de simulation 3D spécifiques. Le paragraphe suivant présente un état de l'art sur la simulation des décharges arborescentes et du phénomène de branching.

1.3 Etat de l'art de la simulation 3D des streamers

L'augmentation de la puissance des calculateurs a permis durant ces vingt dernières années le développement de la simulation des streamers (appelés également micro décharges à cause de leur diamètre) dans des configurations multidimensionnelles. L'apparition de nouveaux algorithmes pour le transport des forts gradients de densité et la résolution de l'équation de Poisson a également aidée à la simulation numérique de ces décharges complexes. Cependant, la simulation de la structure arborescente des streamers (encore appelé branching) reste un challenge. En effet, la simulation du branching demande une grande précision numérique et une bonne définition du maillage servant à discrétiser le domaine d'étude. De ce fait, plusieurs stratégies ont été adoptées et il existe différents modèles 3D de décharge plus ou moins raffinés dans littérature. Les sections suivantes scindent en trois catégories les principaux modèles utilisés dans la modélisation 3D des décharges sur la base de travaux réalisés par la communauté scientifique. On décrira donc les modèles comportementalistes, particuliers et fluides.

1.3.1 Modèles comportementaux

Les modèles comportementaux permettent de simuler des décharges sur des échelles de temps long et de grandes distances (respectivement de l'ordre de la μs et du centimètre). En 2003, Akyuz développe un algorithme pour simuler la propagation simultanée de streamers en prenant en compte le processus d'arborescence [24]. Dans ce travail, chaque streamer est modélisé comme un filament cylindrique parfaitement conducteur qui se termine par une sphère (représentant la tête du streamer). Le champ électrique dans l'espace inter électrode, résultant de la géométrie des électrodes et de la présence des filaments conducteurs, est calculé en 3D à l'aide du logiciel commercial ANSYS. Tous les paramètres des streamers (direction et vitesse de propagation, conditions du branching, longueur d'une branche, angle de déviation, etc.) sont estimés à l'aide de la répartition 3D du champ électrique à partir de critères physiques et expérimentaux détaillés dans l'article. Ainsi, à chaque étape de la

simulation, le champ électrique autour des bouts sphériques de chaque branche conductrice est déterminé pour vérifier si les critères de propagation et de ramification des streamers sont remplis. Si les conditions sont satisfaites, de nouveaux segments conducteurs sont ajoutés aux précédents (avec soit une continuité du canal conducteur ou soit une démultiplication de la branche précédente). Des simulations ont été effectuées sur la génération de streamers positifs se propageant dans l'air. Au travers de leur modèle, les auteurs étudient l'effet du rayon du streamer, du potentiel appliqué et du choix de l'angle de ramification. Les conditions de simulation indiquent que les électrodes se composent de deux plans parallèles (anode et cathode) séparées par une distance de 35mm. Les deux électrodes parallèles ont un profil de Rogowski avec un diamètre de 90mm. Elles servent à générer un champ homogène dans l'espace inter électrodes. Une pointe (de diamètre 0,35mm et de 4mm de long), isolée de l'anode par une douille diélectrique en PVC, sert d'amorçage pour les décharges. Dans les simulations, l'anode plane est mise à la masse et une tension négative de 17,5kV d'amplitude est portée sur la cathode (cela génère un champ géométrique de 500kV/m pour une distance inter-électrode de 35mm). La pointe est portée à une tension positive. La Figure 1-11 montre un résultat extrait de la publication. Akyuz souligne la difficulté de la simulation 3D notamment à cause de la définition du maillage qui doit être resserré au voisinage des bouts sphériques de chaque cylindre conducteur pour pouvoir appliquer correctement les critères de propagation et de ramification. De ce fait, les contraintes numériques liées à la consommation mémoire et à la puissance de calcul limitent le nombre de branches qu'il est possible de suivre simultanément.

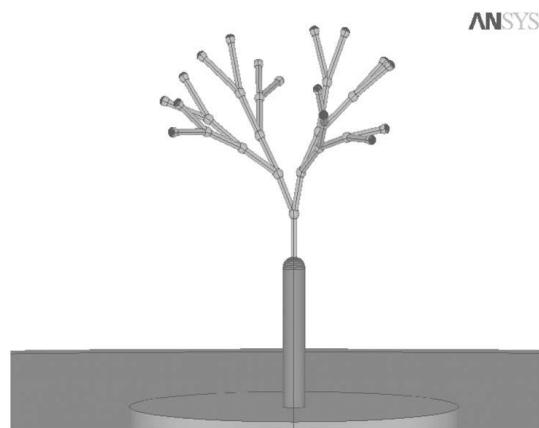


Figure 1-11 : Résultat d'une simulation pour une tension de 5kV appliquée sur la pointe. On observe le développement de 16 streamers (soit 6 de plus que pour une pointe alimentée sous 2,5kV) [24]

Toutefois, plusieurs caractéristiques intéressantes ont été déduites des résultats de la simulation. Il a été observé que la démultiplication des branches était intense au premier stade du développement de la décharge c'est-à-dire au voisinage de la pointe. Ensuite, dans les étapes ultérieures, lorsque le streamer a dépassé la région de champ élevée proche de la pointe, les branches déjà existantes ont tendance à poursuivre leur propagation en ligne droite. Dans le cas où le champ électrique est augmenté, le processus de branching se révèle plus

intense. En outre, dans ce cas, la longueur de chaque filament est plus élevée, ce qui indique que la vitesse des streamers est également plus élevée. Enfin, lorsque le rayon des streamers est augmenté de 50 à 100 μm le processus de branching est inhibé dans les premiers instants. Le premier streamer issu de la pointe se propage tout d'abord sur une certaine distance avant l'amorçage des ramifications dont le nombre est plus faible.

En 2014, des travaux utilisant un modèle similaire ont été présentés par Luque et Ebert [25]. Dans leur modèle, les filaments ne sont plus considérés comme des conducteurs parfaits et le champ électrique ainsi que la charge portée au bout de chaque filament sont estimés à partir de la loi physique de conservation de charge. Le modèle des streamers est introduit en tant que structure de canaux linéaire possédant chacun une conductivité et un diamètre fixes. Luque se concentre dans son papier sur le comportement qualitatif global des arborescences de streamers. La configuration générale de ce modèle permet l'implémentation d'approximations sur la propagation et le branching telles que les valeurs des diamètres, des vitesses, des taux d'ionisation et des taux de branching. La Figure 1-12 montre des résultats obtenus par ce modèle concernant la répartition du champ électrique régnant dans l'espace ainsi que le champ électrique interne à la structure arborescente. Dans cette simulation, les streamers se propagent dans un fond continu de champ électrique de 15kV/cm vertical et dirigé vers le bas.

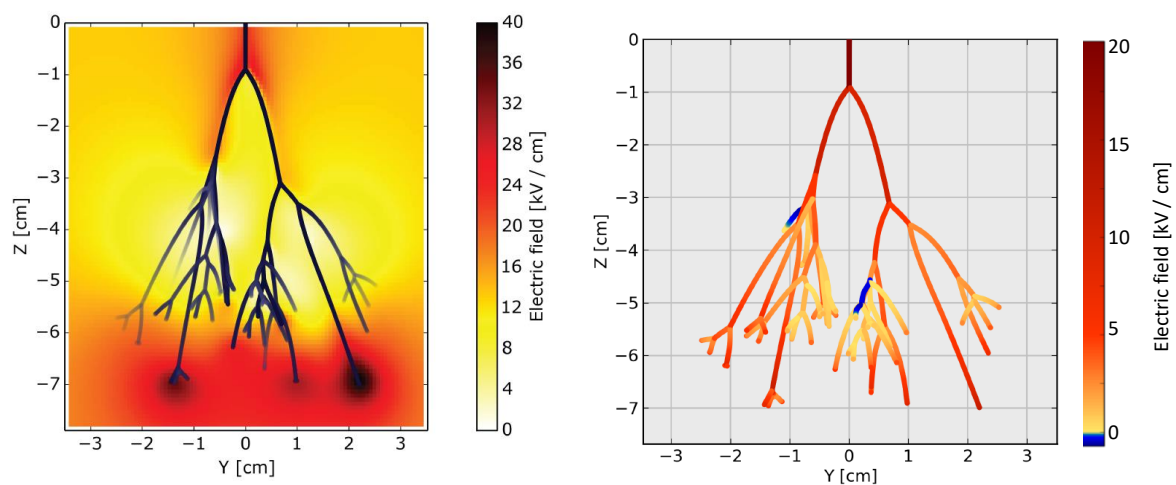


Figure 1-12 : Simulation d'une arborescence de streamer positif générée dans l'air en présence d'un fond continu de champ électrique de 15kV.cm⁻¹ [25]. Image de gauche : champ électrique dans l'espace, Image de droite : champ électrique dans les canaux ionisés

Comme nous venons de le voir, les modèles comportementaux permettent de simuler le comportement global des décharges couronne. Le branching est initié à partir de critères physiques et/ou empiriques et les caractéristiques des canaux ionisés (vitesse de propagation, diamètre et conductivité) sont soit des paramètres ajustables soit estimés à partir d'équation physique macroscopique (tel que l'équation de conservation de la charge par exemple). Les modèles sont auto cohérents dans le sens que les critères utilisés dépendent le plus souvent du

champ électrique local régnant dans l'espace inter électrode, champ électrique modifié par la présence et la propagation des streamers.

Toutefois, ces modèles ne sont pas en mesure de fournir des informations sur la densité des espèces ou l'énergie déposée par la décharge. Ce type d'informations peut être fourni à différents niveaux par des modèles particulaires et fluides.

1.3.2 Modèles particulaires

Les modèles particulaires sont les plus précis. Ils permettent le suivi individuel de chaque particule (ou d'un paquet représentatif de particules) grâce aux méthodes PIC/MCC (Particule In Cell / Monte Carlo Collision). Les méthodes PIC/MCC suivent chaque espèce une à une et traitent de façon stochastique les processus collisionnels à l'aide des sections efficaces différentielles. Une contrainte importante des modèles particulaires est le nombre d'électrons et d'ions qu'ils doivent traiter notamment lorsque les avalanches électroniques démultiplient leur population ce qui est le cas à la pression atmosphérique. Ce nombre peut facilement dépasser les limites de mémoire de l'ordinateur et leur traitement se heurte également aux limites des puissances de calcul. Ainsi, à la pression atmosphérique, les modèles particulaires ne peuvent être mis en œuvre que pour la phase initiale de démarrage des streamers. Pour suivre les streamers dans les phases ultérieures, des super-particules sont généralement utilisées où chaque super-particule possède la masse et la charge d'un nombre représentatif de particules réelles. En raison des temps de calcul prohibitifs pour suivre une grande quantité de particules et résoudre l'équation de Poisson en 3D pour en extraire le vecteur champ électrique, un modèle particulaire 3D complet de décharge est difficile à mettre en œuvre et dans certaines situations impossible à réaliser. Un compromis peut être réalisé en calculant les positions et les vitesses des particules avec une procédure PIC/MCC standard et d'estimer le champ électrique en 1D ou en 2D, pour ensuite décrire le mouvement des particules dans le champ électrique par interpolation. Contrairement aux modèles comportementaux, les modèles particulaires permettent d'extraire toutes les informations physiques sans aucune hypothèse a priori. Toutefois, ils ne permettent pas de simuler les phénomènes sur de grandes distances ou des temps longs. Un exemple de résultats issus d'un modèle particulaire est donné sur la Figure 1-13. Seulement 0,2ns sont simulées sur une distance de 0,2mm. Le gaz est du N₂ pur dans les conditions ambiantes de température et de pression soumis à un champ électrique homogène de 5MV/m.

D'autres types de méthodes sont utilisés, comme celle présentée dans les travaux de Li, Ebert et Hundsdorfer en 2012 [26]. Les auteurs développent le concept de modèle spatialement hybride en 3D. Ainsi, ils combinent l'efficacité en termes de calcul d'un modèle fluide (que nous décrirons plus loin) avec la description physique détaillée du modèle particulaire.

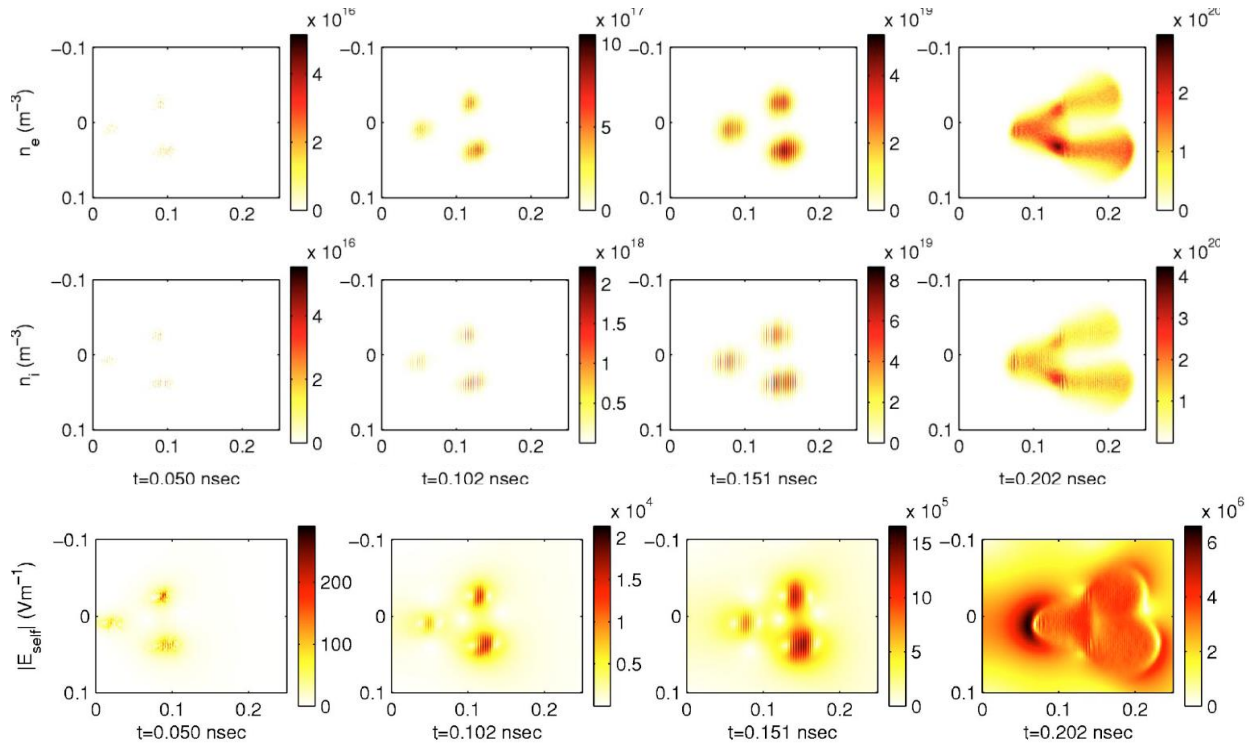


Figure 1-13: Génération de trois canaux ionisés (type streamer) à partir de trois germes électroniques [27]. L'évolution en temps est représentée de gauche à droite. Les axes x et y représentent les distances exprimées en mm. Du haut vers les bas, les images montrent l'évolution des densités électroniques, ioniques et du champ électrique de charge d'espace.

Les régions à champ élevé et à faible densité électronique sont traitées à l'aide d'une description particulaire tandis que les régions à faible champ et à forte densité électronique sont traitées par une description fluide. Ce modèle hybride décrit la dynamique du canal d'un streamer d'une manière très efficace tout en étant capable de suivre le mouvement de chaque électron dans la région la plus active de la tête du streamer. Le modèle hybride 3D est donc un outil puissant pour étudier les phénomènes physiques dans la zone de transition entre la tête du streamer et le canal de plasma. La Figure 1-14 ci-dessous montre un résultat de simulation hybride 3D intégrant également la photo-ionisation avec une approche Monte-Carlo.

Les modèles particuliers ou hybrides sont très précis et permettent d'obtenir des informations concernant la densité des espèces, leur énergie et leur vitesse sans fixer d'hypothèses préalables. Cependant, il est très difficile de gérer une simulation complète en 3D avec ce genre de modèle et les phénomènes physiques sont souvent étudiés sur des durées inférieures à la ns et localisées sur des fractions de mm. Dans la littérature, le modèle le plus couramment utilisé pour étudier les décharges de type streamer est le modèle fluide. Ce modèle est un intermédiaire entre les modèles comportementaux et les modèles particuliers. Le modèle fluide est présenté dans la section suivante.

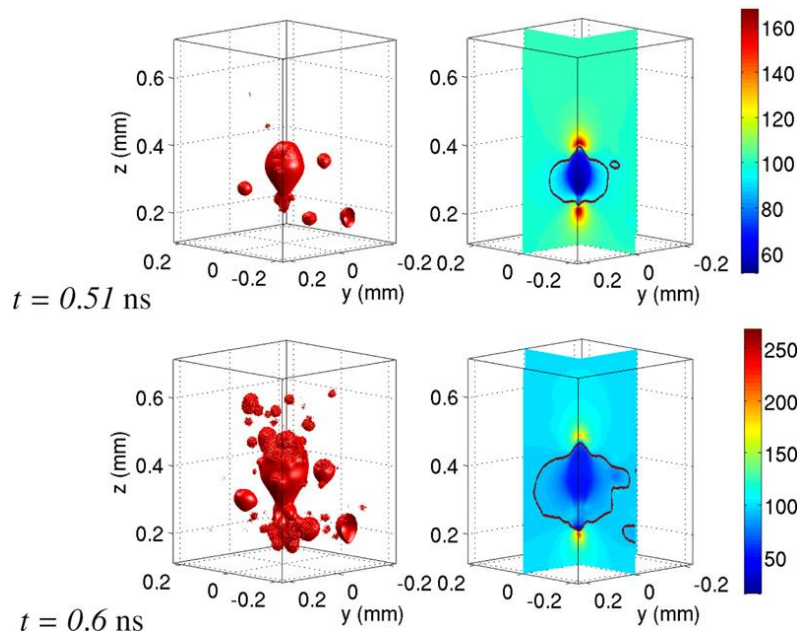


Figure 1-14 : Double tête de streamer dans l'air. Images à gauche : iso surface de la densité électronique à 10^{13}cm^{-3} . Images à droite : module du champ électrique en kV/cm. L'interface entre le traitement particulaire et fluide dans le modèle hybride est marquée par un contour noir sur les figures du champ électrique [26]

1.3.3 Modèles fluides

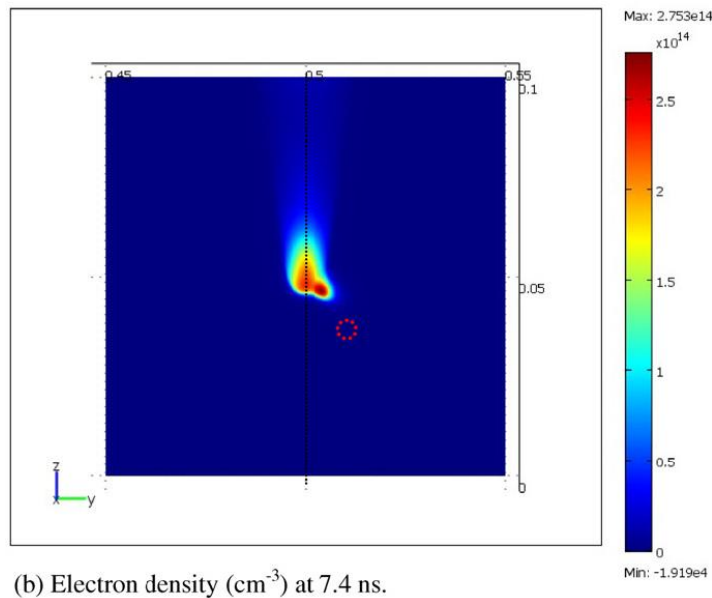
Les modèles fluides couplent les équations de la mécanique des fluides pour chaque espèce chargée (ou non) avec les équations de Maxwell et l'équation de transport radiatif. Le comportement de chaque espèce est modélisé comme un fluide continu possédant ses propres caractéristiques (densité, vitesse et énergie) et réagissant avec les autres fluides par l'intermédiaire d'une cinétique réactionnelle (incluant l'ionisation, l'attachement, la recombinaison, le détachement, etc.). Chaque fluide est soumis à l'action de forces électriques (parfois magnétiques) qui oriente sa propagation de façon auto-cohérente, les fluides chargés produisant leur propre champ électrique. L'ordre d'un modèle fluide dépend du nombre d'équations fluides servant à suivre l'évolution d'une espèce. Par exemple, un modèle fluide d'ordre 2 pour les électrons couple les équations de conservation de la densité, de la quantité de mouvement et de l'énergie moyenne des électrons. Dans les modèles fluides, les coefficients de transport tels que la mobilité, la diffusion et les taux de réaction doivent être préalablement calculés soit en fonction du champ électrique ou soit en fonction de l'énergie moyenne des espèces. La plupart des simulations des streamers sont réalisées avec des modèles fluides. Cependant, résoudre les équations fluides numériquement n'est pas une tâche facile en raison de la nature multidimensionnelle et multi-échelle des streamers. Les paragraphes suivants sont consacrés à la présentation de simulations 3D de streamer utilisant

un modèle fluide. Dans un premier temps sont cités quelques travaux utilisant la méthode des éléments finis puis nous verrons des travaux réalisés avec la méthode des volumes finis.

- Modèles fluides et éléments finis

En 2005, Georghiou et Hallac décrivent un algorithme FE-FCT (Finite Element – Flux Corrected Transport) destiné à résoudre un modèle fluide par la méthode des éléments finis en géométries complexes multidimensionnelles ([28], [29]). Ils incorporent de nouvelles techniques telles que l'utilisation de maillages adaptatifs et de sous-distribution de maillages pour le traitement par une méthode intégrale de la photo-ionisation.

En 2011 et sur la base des travaux de Georghiou et Hallac, Papageorgiou présente des résultats de décharge streamer 3D incorporant la photo-ionisation via la résolution des équations d'Helmholtz [30] [31].



(b) Electron density (cm^{-3}) at 7.4 ns.

Figure 1-15: Profil de la densité électronique (en cm^{-3}) à 7,4 ns et formation d'une ramification du streamer initial suite à l'influence d'un spot plasma localisé par un cercle en pointillé rouge [30]

Papageorgiou et ses collaborateurs utilisent un maillage non structuré afin de réduire autant que possible les temps de calcul. Dans ces travaux, la configuration des électrodes est de type plan-plan séparé de 10mm. Une tension de 5kV est appliquée sur l'une des électrodes. Le branching est amorcé dans l'air à l'aide d'un spot local de plasma ou d'une instabilité locale de pression. La Figure 1-15 montre l'influence d'un spot de plasma (sa localisation est délimitée par le cercle rouge en pointillé) sur la propagation initialement axiale d'un streamer. Une étude paramétrique est réalisée en fonction de la position du spot, de son diamètre et de

son amplitude. Les auteurs montrent également qu'une sphère de dépression (qui modifie localement le champ réduit) produit les mêmes effets.

En 2015, Singh et ses collaborateurs présentent des résultats obtenus dans une configuration pointe/plan (de 1mm de distance inter-électrode) dans l'air à pression atmosphérique [32]. Leur modèle fluide prend en compte la photo-ionisation à l'aide de l'approximation d'Eddington. Le modèle est résolu à l'aide du logiciel commercial Comsol et utilise les performances du maillage adaptatif dans le temps. Pour simuler le branching, le modèle incorpore des inhomogénéités représentées par des amas moléculaires ou des micropoussières qui agissent comme des centres d'accumulation de charges. Les résultats des simulations montrent que l'accumulation de charge dans chaque centre conduit à leurs interactions électrostatiques avec la tête de streamer et provoque les ramifications.

- Modèles fluides et volumes finis

En 2005, Pancheshnyi réalise une simulation 3D en volume fini de l'amorçage des streamers dans l'air dans une configuration pointe/plan [33]. Il place de façon aléatoire autour de la pointe des germes de densité électronique variant de 10^5 à 10^7cm^{-3} et correspondant à une estimation de la densité résiduelle d'ions négatifs O_2^- . En fonction de la pression du gaz (1atm ou 0,5atm), soit 4 branches se développent en partant de la pointe soit une seule branche de diamètre plus large se forme et se propage le long de l'axe pointe/plan (cf. Figure 1-16).

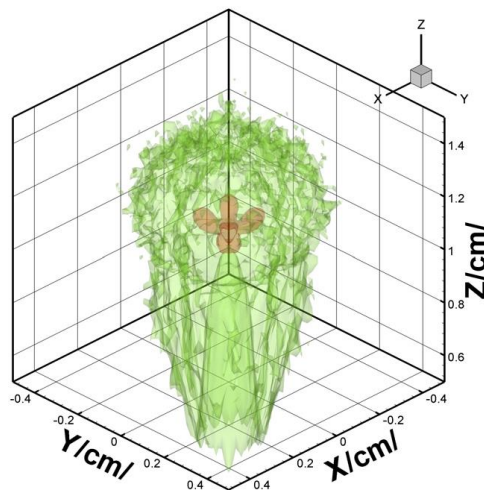


Figure 1-16 : Iso-surfaces de la densité électronique à 10ns pour une pression de 1atm [33].
4 branches se forment à partir du sommet de la pointe.

En 2008, Pancheshnyi et ses collègues développent un programme utilisant une bibliothèque AMR (Adaptive Mesh Refinement) pour générer un maillage adaptatif permettant d'augmenter la résolution spatiale dans la région de la tête de streamer [34].

L'avantage d'un tel maillage est de diminuer le nombre de cellules et donc les temps de calcul. La discrétisation du domaine plan/plan est basée sur la méthode des volumes finis et les algorithmes de résolution des équations de transport sont d'ordre 2 en temps et en espace. Les résultats indiquent que l'emploi de la méthode AMR permet de réduire d'un facteur 4 à 5 la durée des calculs par rapport à un maillage fixe et que la résolution de l'équation de Poisson consomme entre 95 et 98% du temps de calcul global.

En 2014, Benkhaldoun [35] simule en 3D un branching et les trajectoires déviées des streamers. Les équations du modèle sont discrétisées en 3D à l'aide de la méthode des volumes finis sur un maillage tétraédrique non structuré. Benkhaldoun effectue un maillage dynamique de plusieurs niveaux pour capturer les forts gradients dans les régions correspondant aux fronts d'ionisation des streamers. Il assigne un niveau d'adaptation à chaque volume du domaine en fonction de deux critères: le gradient de densité électronique et l'amplitude locale de l'ionisation. Le domaine simulé comprend deux électrodes planes séparées de 5mm et portées à une différence de potentiel de 12,5kV. Le streamer est amorcée via une distribution initiale électron-ion de forme gaussienne. La ramification du streamer initiale est ensuite générée via des spots d'électron-ion. Les temps physiques simulés sont de l'ordre de la dizaine de nanosecondes. La Figure 1-17 montre un résultat de ces travaux avec la dynamique du branching initié par un spot « plasma » et la structure correspondante du maillage.

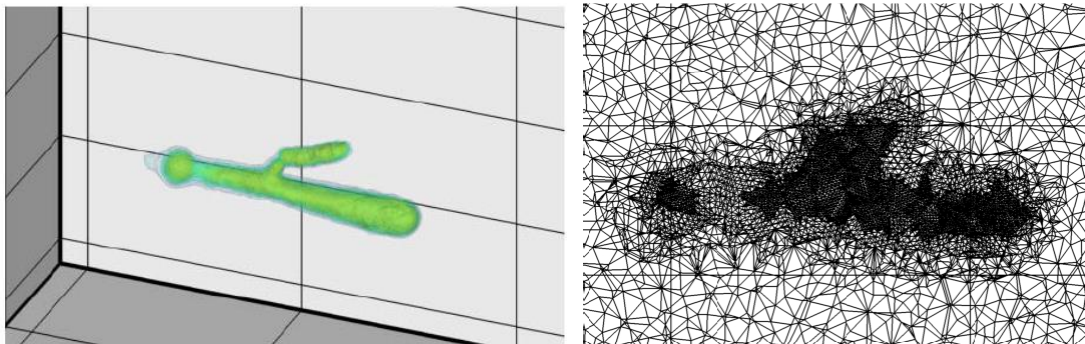


Figure 1-17: Isosurface de la densité électronique et structure du maillage au même instant [35]

Quelle que soit les modèles (comportementaux, particuliers ou fluides) et la base de la méthode de résolution du modèle fluide (éléments finis ou volumes finis), les auteurs des travaux évoqués précédemment expriment la difficulté à simuler des décharges de type streamer en trois dimensions. En dehors des spécificités numériques liées au transport des forts gradients de densité et à la nature multi-échelle des micro-décharges, les simulations 3D sont extrêmement consommatrices en mémoire et temps de calcul. Dans ce contexte, seul le calcul parallèle haute performance peut s'avérer être une alternative pour palier à ces problèmes [36].

1.4 Choix du modèle et stratégie de résolution

1.4.1 Description du modèle physique

Dans le cadre du traitement des gaz par décharges couronnes en régime pulsé de tension, notre objectif est d'obtenir par simulation la concentration et la répartition spatiale des radicaux créés par impacts électroniques durant la phase de décharge. L'étude bibliographique précédente a permis de distinguer plusieurs types de modèle. Les modèles basées sur la propagation pas à pas de canaux de conduction permettent d'étudier en 3D le comportement, la propagation et la formation des branches sur des distances et des temps longs mais ne donnent aucune information sur la nature, la densité et l'énergie des espèces (électrons, ions positifs et négatifs). A l'inverse, les modèles de type particulaire (PIC/MCC ou hybrides) permettent d'obtenir le maximum d'information à l'échelle microscopique ou mésoscopique. En effet, ces modèles suivent les particules (microscopiques ou fluides représentatives) une à une en fonction de leur vitesse et de leur interaction (ce qui nécessite l'emploi de sections efficaces différentielles). Par conséquent, les temps de calcul d'un tel modèle varient considérablement en fonction du nombre de particules suivies. A la pression atmosphérique et sous fort champ électrique, la gestion du nombre des particules devient alors très rapidement impossible à cause de l'efficacité des réactions ionisantes qui démultiplient considérablement la quantité de particules à considérer. Ce type de modèle donne des informations très précises mais uniquement durant l'amorçage des décharges arborescentes.

Dans le cadre de ce travail, notre choix s'est porté sur le modèle fluide de la décharge qui permet d'obtenir les informations souhaitées sur des durées et des volumes conformes à nos attentes. Le comportement de la décharge est ainsi modélisé à l'aide de plusieurs fluides en interaction entre eux et avec le champ électrique. On peut associer à chaque fluide une espèce ou un groupement d'espèces (par exemple l'ensemble des ions positifs ou négatifs d'une décharge). Les caractéristiques propres de chaque fluide et de leurs interactions sont données par des grandeurs physiques moyennées telles que les fréquences de réaction, les vitesses et les énergies moyennes. Ceci suppose que les espèces sont en équilibre localement avec le champ électrique c'est-à-dire que leur distribution en énergie microscopique s'établit très rapidement par rapport aux échelles de temps caractéristiques des variations macroscopiques.

Il existe plusieurs ordres de modèle fluide. Le modèle fluide d'ordre 2 par exemple, couple pour chaque espèce, les équations de conservation de la densité, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Dans notre cas, pour déterminer la dynamique des streamers, le modèle choisi est le modèle fluide d'ordre 1 dans l'approximation de dérive diffusion. Il met en jeu les équations hyperboliques de conservation de la densité et de la quantité de mouvement (c'est-à-dire les deux premiers moments de l'équation de Boltzmann) pour chaque espèce chargée couplées à l'équation elliptique de Poisson pour le calcul du potentiel et du champ électrique. L'approximation de dérive-diffusion simplifie l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour calculer directement la vitesse moyenne des particules chargées sans avoir à

résoudre la totalité de l'équation. La vitesse moyenne obtenue par l'approximation de dérive-diffusion contient un terme de dérive induit par la présence d'un champ électrique et un terme de diffusion induit par la présence d'un gradient de densité. Les équations du modèle fluide d'ordre 1 s'écrivent sous la forme suivante :

$\Delta V = -\frac{\rho}{\varepsilon}$	e 1-1
$\rho = \sum_{esp} q_{esp} n_{esp}$	e 1-2
$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}} V$	e 1-3
$\vec{v}_{esp} \left(\frac{E}{n_g} \right) = \mu_{esp} \left(\frac{E}{n_g} \right) \vec{E} - \frac{D_{esp} \left(\frac{E}{n_g} \right)}{n_{esp}} \overrightarrow{\text{grad}} n_{esp}$	e 1-4
$\frac{\partial n_{esp}}{\partial t} + \text{div} n_{esp} \vec{v}_{esp} \left(\frac{E}{n_g} \right) = S_{esp} \left(\frac{E}{n_g} \right)$	e 1-5

Dans l'équation de Poisson (e 1-1), V est le potentiel électrique exprimé en Volt. ε est la permittivité diélectrique du milieu. ρ représente la densité de charge d'espace créée par la différence de densité entre les espèces positives et négatives. Elle résulte de la somme sur chaque espèce esp , du produit de la charge q_{esp} avec sa densité n_{esp} (e 1-2). Le vecteur champ électrique \vec{E} est directement déduit du potentiel à l'aide de l'équation (e 1-3). L'équation (e 1-4) vient de la simplification de l'équation de conservation de la densité de quantité de mouvement dans le cadre de l'approximation de dérive-diffusion. \vec{v}_{esp} est la vitesse moyenne des particules comprenant une vitesse de dérive et une vitesse de diffusion de l'espèce esp . Ces deux vitesses sont explicitées dans l'équation (e 1-4) avec μ_{esp} et D_{esp} représentant respectivement la mobilité et le coefficient de diffusion de l'espèce esp . A cause de l'hypothèse d'équilibre avec le champ électrique local, ces grandeurs ne sont fonction que du champ réduit $\frac{E}{n_g}$ où n_g est la densité du gaz porteur de la décharge. L'équation de conservation de la densité est définie dans l'équation (e 1-5). Le produit de la densité n_{esp} et du vecteur vitesse \vec{v}_{esp} représente le flux de densité de l'espèce esp . S_{esp} est le terme source de création ou de disparition de l'espèce esp . Ce terme source est fonction des fréquences des processus collisionnels (ionisation, attachement recombinaison, etc.) et des processus de photo-ionisation ou d'émission secondaire à la cathode.

Ce système d'équations ((e 1-1) à (e 1-5)) est très fortement couplé. En effet, toutes variations locales du champ électrique modifient le transport $\vec{v}_{esp}(E/n_g)$ et la réactivité $S_{esp}(E/n_g)$ de toutes les espèces prises en compte dans le modèle. Cela induit une modification de la densité locale de chaque espèce (e 1-5) et donc une modification de la densité de charge d'espace (e 1-2) qui se répercute sur le potentiel (e 1-1) c'est-à-dire le champ électrique (e 1-3) et ainsi de suite. La complexité du modèle vient également du choix du nombre d'espèces et de la réactivité contenue dans les termes $S_{esp}(E/n_g)$. Dans le cadre de cette thèse, nous étudierons des décharges couronnes dans l'air à la pression atmosphérique. Le nombre d'espèces sera limité à 3 avec la prise en compte des électrons, d'un ion positif et d'un ion négatif dont les propriétés sont des moyennes pondérées des ions dans l'air ($N_4^+, N_2O_2^+, N_2^+, N^+, O_2^+, O^+$ pour les charges positives et O_2^-, O^- pour les charges négatives) [37] [38]. La réactivité entre ces trois espèces prend en compte les processus d'ionisation, d'attachement et de recombinaison qui sont les trois phénomènes prédominants lors des premières dizaines de nanosecondes de l'évolution des décharges. La photo-ionisation est modélisée soit par l'adjonction d'un fond continu d'électrons germes au fur et à mesure de la propagation des streamers soit par un fond continu d'électrons initialement présent et maintenu constant dans le temps. Le modèle cinétique est celui décrit dans les références [37] [39] [40] et est brièvement rappelé dans les équations suivantes, où S_e , S_p et S_n représentent respectivement le terme source des électrons, des ions positifs et négatifs. S^{ph} représente le terme source lié à la photo-ionisation.

$S_e \left(\frac{E}{n_g} \right) = S^{ph} + \alpha \left(\frac{E}{n_g} \right) \ \vec{v}_e\ n_e - \eta \left(\frac{E}{n_g} \right) \ \vec{v}_e\ n_e - \beta_{ep} n_p n_e$	e 1-6
$S_p \left(\frac{E}{n_g} \right) = S^{ph} + \alpha \left(\frac{E}{n_g} \right) \ \vec{v}_e\ n_e - \beta_{ep} n_p n_e - \beta_{np} n_n n_p$	e 1-7
$S_n \left(\frac{E}{n_g} \right) = \eta \left(\frac{E}{n_g} \right) \ \vec{v}_e\ n_e - \beta_{np} n_p n_n$	e 1-8

n_e , n_p , n_n sont respectivement la densité des électrons, ions positifs et ions négatifs. Les formules incluent le coefficient d'ionisation α et d'attachement η , et les coefficients de recombinaison β_{ep} entre électrons et ions positifs et β_{np} entre ion négatifs et ions positifs. Les coefficients de transport et de réaction utilisés pour résoudre le modèle fluide d'ordre 1 ont été pris des travaux de Lowke et Morrow [37]. Les coefficients réduits d'ionisation $\frac{\alpha}{n_g}$ et d'attachement $\frac{\eta}{n_g}$ dépendent du champ électrique réduit $\frac{E}{n_g}$ et sont représentés sur la Figure 1-18. Les vitesses de dérive des électrons et des ions positifs et négatifs sont tracées respectivement sur la Figure 1-19 et la Figure 1-20 en fonction du champ électrique réduit. Les formules correspondantes en fonction du champ électrique réduit sont données en annexe.

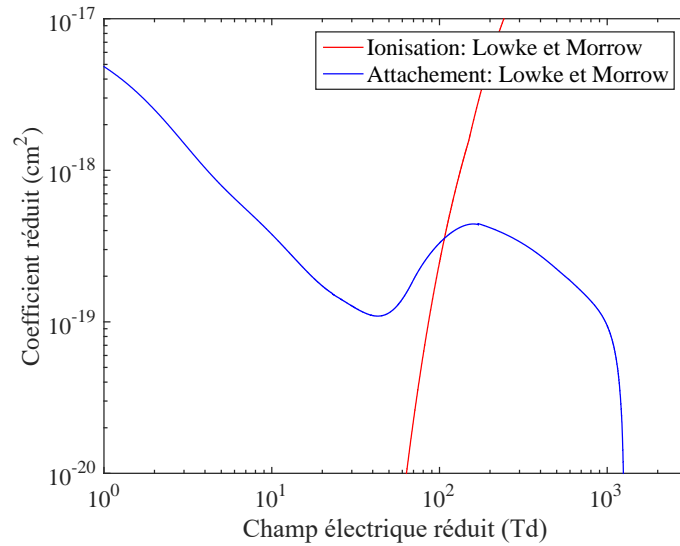


Figure 1-18: Coefficient réduit d'ionisation (en rouge) et d'attachement (en bleu) issus des interpolations proposées par Lowke et Morrow [37]

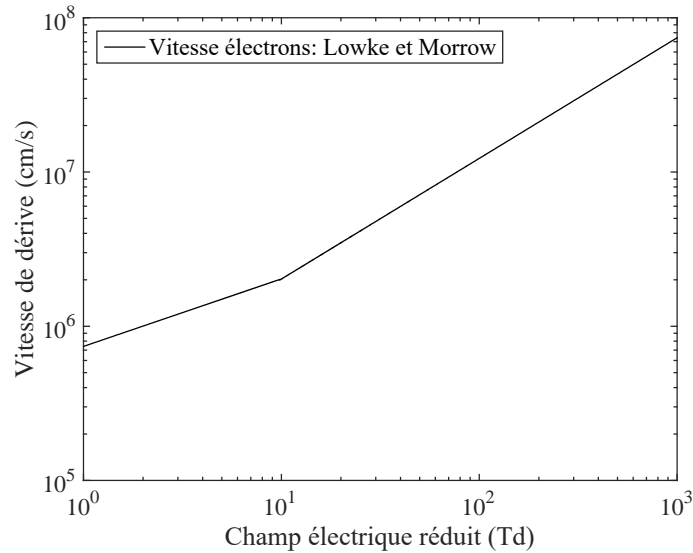


Figure 1-19: Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ réduit [37].

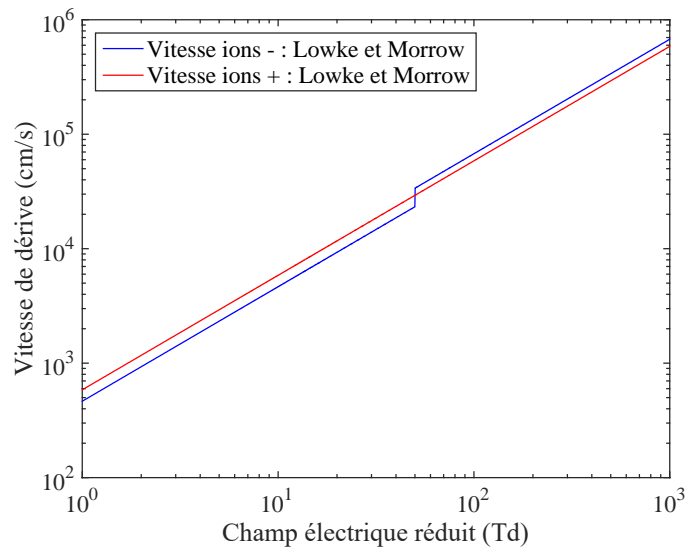


Figure 1-20: Vitesse de dérive des ions positifs et négatifs en fonction du champ réduit [37]

On peut noter, que lors de la simulation, il est préférable d'utiliser des fonctions d'interpolation plutôt que des valeurs discrètes de données. L'utilisation de valeurs discrètes connues pour certaines valeurs de champ réduit implique une interpolation numérique en chaque point du domaine étudié et à chaque instant ce qui impacte la durée de calcul.

Le modèle fluide d'ordre 1 choisi présente une simplicité apparente qui est un compromis entre sa complexité (nombre limité d'espèces et photo-ionisation réduite à sa plus simple expression) et la capacité à le résoudre en 3D. En effet, les streamers sont des phénomènes très dynamiques qui génèrent des filaments de faible diamètre ($\sim 100\mu\text{m}$) mais qui se propagent en quelques dizaines de ns sur plusieurs centimètres. Pour les étudier, il faut donc un maillage suffisamment bien défini, c'est à dire un nombre de mailles très grand si on veut couvrir des volumes d'expansion des décharges de l'ordre du cm^3 . D'un point de vue numérique cela implique des tailles mémoires importantes et des durées de calcul très longues. Comme nous l'avons déjà signalé, pour lever ces difficultés, la seule possibilité est d'utiliser le calcul massivement parallèle. Ceci n'est cependant pas trivial et pour s'en rendre compte le paragraphe suivant explique le design des super calculateurs et les spécificités de leur utilisation.

1.4.2 Architecture d'un supercalculateur et calcul haute performance

Comme nous venons de le voir précédemment la résolution 3D du modèle fluide est très consommatrice en temps et mémoire de calcul [41]. En effet, un modèle fluide de décharge couplant des équations hyperboliques de conservation et elliptiques (comme l'équation de Poisson) doit être résolu à chaque pas de temps d'évolution des streamers et avec une très bonne définition spatiale ce qui implique un nombre très important de mailles. De ce fait, seul le calcul massivement parallèle utilisant les bibliothèques MPI (Message Passing Interface), OpenMP (Open Multi-Processing) ou le couplage hybride des deux est capable de distribuer efficacement la mémoire nécessaire et exécuter la simulation avec des durées acceptables de calcul.

1.4.2.1 Le supercalculateur EOS

Il existe plusieurs architectures de calculateur parallèle (à mémoire distribuée ou partagée) conçues pour les modèles de programmation. De nos jours, la plupart des machines sont à mémoire distribuée.

Dans ce manuscrit, tous les calculs ont été réalisés sur le cluster Bullx DLC B710 nommé « EOS » [42]. Ce supercalculateur est hébergé par le mésocentre de calcul régional CALMIP (Calcul en Midi-Pyrénées) à Toulouse en France. EOS a été installé au cours du premier semestre 2014 pour la période 2014-2017 dans le nouveau bâtiment Espace Clément Ader (ECA) de l'Université de Toulouse sur le campus de Montaudran Aerospace. Financé par le

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, l'Union Européenne via son programme FEDER, la Région Midi-Pyrénées et la communauté urbaine Toulouse Métropole, ce calculateur permet à CALMIP d'accompagner l'essor des besoins en calcul intensif des recherches académiques et privées en Midi-Pyrénées. La Figure 1-21 montre une photographie du supercalculateur EOS.



Figure 1-21: Photographie du supercalculateur EOS

Le calculateur EOS s'est positionné 183^{ème} en juin 2014 au classement des 500 plus puissants supercalculateurs au monde. Face à l'évolution rapide des systèmes de calcul, EOS a été 220^{ème} en novembre 2014, 278^{ème} en juin 2015 et 398^{ème} en novembre 2015. EOS est un calculateur à mémoire distribuée composé de 612 nœuds de calcul, équipés chacun de deux processeurs Intel Ivybridge 10 cœurs fonctionnant à 2,8GHz avec 25Mo de mémoire cache. Il y a donc 20 cœurs disponibles par nœud et au total, on peut disposer au maximum de 12240 cœurs de calcul. Chaque cœur partage 64Go de mémoire RAM. Ces éléments qui constituent le supercalculateur sont illustrés sur la Figure 1-22. En allant de la gauche vers la droite, on trouve: le calculateur (constitué de 7 racks), les racks (contenant plusieurs chassis), les chassis (contenant 9 lames chacun), les lames (contenant deux nœuds de calcul chacune), les nœuds (comprenant chacun deux processeurs), les processeurs (constitués chacun de 10 cœurs physiques).

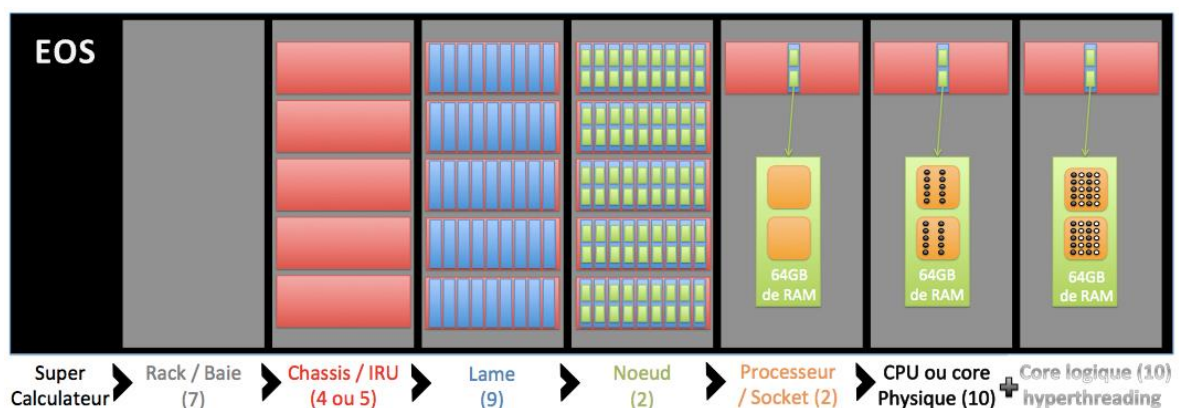


Figure 1-22: Eléments du supercalculateur EOS

Chaque cœur physique peut accomplir deux tâches simultanément, il est constitué de deux cœurs logiques (ce système est appelé Hyperthreading). Les caractéristiques d'EOS sont également résumées dans la Table 1-1, Table 1-2, Table 1-3, Table 1-4 et Table 1-5.

Téraflop Crête	274 TF
Linpac Turbo ON	255 TF
Nombre total de nœuds	612
Processeurs	Intel(r) IVYBRIDGE 2,8 Ghz 10-cores
Nombre total de cœurs	12240
RAM par nœud	64 Go
RAM totale	39 To

Table 1-1: Caractéristiques générales d'EOS

Interconnexion Rapide	Infiniband Full Data Rate
Bande passante par nœud	6,89 Go/s (une direction)
Bande passante bisectionnelle	1936 Go/s (une direction)
Topologie	Fat-tree non bloquant

Table 1-2: Réseau de communication d'EOS

Types	Espace Permanent	Espace Temporaire
Système de fichier	NFS	Lustre
Capacité Utile	111 To	780 To
Débit	3 Go/s	10 Go/s

Table 1-3: Espaces fichiers d'EOS

Visualisation	VirtualGL/TurboVNC
Cartes	nvidia Quadro 6000
Nombre de cartes	4

Table 1-4: Visualisation graphique sur EOS

Compilateurs	Intel /GNU
Librairies Scientifiques	Math Kernel Library
Profiling code MPI	Intel Trace Analyser/ MPIprof (opensource)
Profiling de code	Intel Vtune / Oprofile
Mesure performance	Perf/PCM (bande passante)
Librairie MPI	Intel MPI/ Bull_MPI
Débogeur parallèle	Totalview
Ordonnanceur des Travaux	Bullx Batch Manager (SLURM)

Table 1-5: Environnement de développement sur EOS

Le supercalculateur EOS présente énormément de caractéristiques qui sont en faveur du calcul haute performance. Son nombre conséquent de cœur de calcul (plus de 10000) et la

grande mémoire RAM associée (64Go) en font un outil capable de répondre au développement du calcul parallèle pour des domaines d'étude possédant un grand nombre de mailles. Cependant, afin de bénéficier des meilleures performances d'EOS, il est important de développer notre code de simulation avec la structure parallèle qui s'adapte au mieux aux caractéristiques physiques de la machine. Pour bien comprendre ce principe, la prochaine section présente les différents modes de parallélisation d'un programme informatique.

1.4.2.2 Les différents modes de parallélisation

Le but de cette section est de présenter les principaux types de programmation parallèle que l'on trouve dans le calcul haute performance avec quelques rappels sur le modèle de programmation séquentiel. Les explications ci-dessous sont appuyées par des schémas explicatifs. On se sert de la brique de base du calculateur EOS, c'est à dire le nœud afin que le lecteur puisse se familiariser avec le vocabulaire et la structure utilisés par la suite dans ce manuscrit. D'après la Figure 1-22 de la section précédente, on rappelle qu'un nœud de calcul sur EOS possède 64Go de mémoire RAM et est composé de deux processeurs ayant chacun 10 cœurs.

- Programmation séquentielle

Le domaine étudié est résolu à l'aide d'un seul cœur du calculateur. On parle aussi de calcul

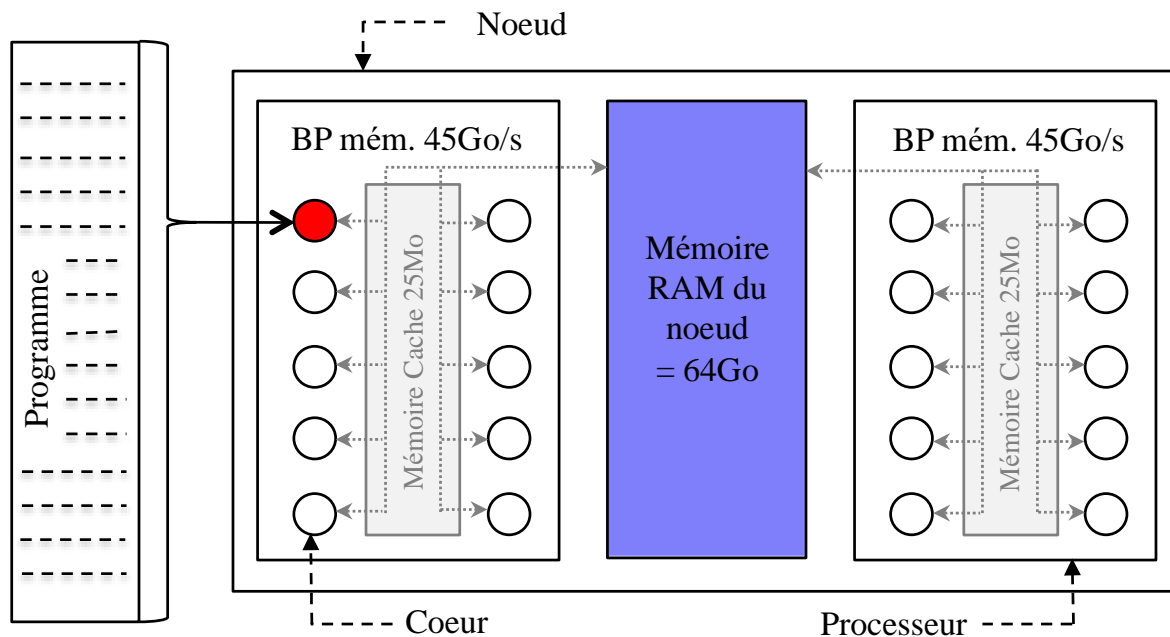


Figure 1-23: Modèle de programmation séquentielle. Le programme dans son intégralité est géré par un seul cœur.

mono-cœur. La mémoire allouée au cœur contient toutes les variables et constantes du programme. Ce programme est exécuté de façon séquentielle, c'est à dire que les tâches sont réalisées les unes après les autres. La Figure 1-23 montre un schéma de principe du modèle de programmation séquentielle.

- Programmation OpenMP (Open Multi-Processing) à mémoire partagée

Au début de son exécution, un programme OpenMP est séquentiel. Comme vu précédemment, il n'y a qu'un seul cœur qui travaille pour résoudre tout le domaine de calcul.

L'OpenMP permet de gérer et de définir des portions du programme à exécuter en parallèle, on parle ici de régions parallèles. Ces régions parallèles représentent notamment les boucles contenues dans un programme. Lorsque le programme arrive sur des régions parallèles (zones vertes du programme informatique sur la Figure 1-24), le cœur génère des threads (ou processus léger) exécutant chacun sa tâche en parallèle avec les autres. De ce fait, le travail est partagé entre les threads (c'est-à-dire entre plusieurs cœurs d'un même nœud). De plus, les threads ont accès à l'espace mémoire RAM initialement allouée au premier cœur, on dit que la mémoire RAM est partagée entre threads ou tout simplement que la mémoire est partagée. Toutefois, on peut définir des variables privées stockées dans la pile (mémoire locale) de chaque thread. Finalement, un programme OpenMP se résume à une succession de tâches séquentielles et parallèles.

La Figure 1-24 montre un exemple d'exécution de tâche en OpenMP avec un déploiement de 4 threads dans les régions parallèles.

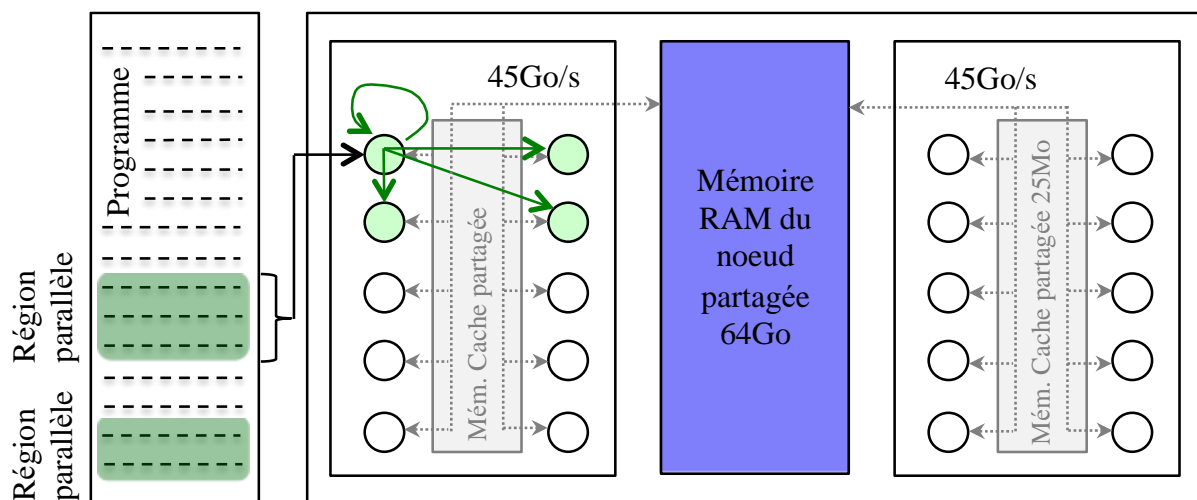


Figure 1-24: Modèle de programmation OpenMP

- Programmation MPI (Message Passing Interface) à mémoire distribuée

Un programme codé en MPI consiste à exécuter le code avec plusieurs cœurs dès le lancement du programme. Le domaine global étudié est distribué en sous-domaines locaux sur plusieurs cœurs. La mémoire RAM est ici distribuée, c'est à dire que toutes les variables d'un sous domaine sont privées et ne se trouvent que dans la mémoire locale allouée à chaque cœur. La notion de parallélisme s'applique du début jusqu'à la fin du programme. Chacun des cœurs travaille sur son sous-domaine qui lui est propre, en parallèle avec les autres. La Figure 1-25 est une schématisation du modèle de programmation MPI avec 2 cœurs. Dans ce cas, la mémoire RAM disponible sur un nœud est scindée en deux, chaque partie étant spécifiquement allouée à un cœur. En aucun cas, un cœur n'a accès aux données calculés par un cœur voisin. Toutefois, les cœurs doivent pouvoir échanger les données aux frontières de leur sous-domaine respectif. Ceci se fait par passage de messages entre cœurs, communément appelé communications. Ces communications sont représentées par une flèche rouge sur la Figure 1-25. Chaque cœurs accède à la mémoire RAM via la mémoire cache (25Mo par processeur) avec le réseau de bande passante mémoire de 45Go/s par processeur. Cette bande passante mémoire (BPM) est également distribuée en fonction du nombre de cœurs utilisés sur le processeur. Ainsi si 2 cœurs d'un même processeur utilisent la mémoire RAM, la BPM par cœur sera de $45/2$ Go/s, ce qui réduit de moitié la vitesse d'échange des données.

De nos jours, des outils permettent à l'utilisateur de déterminer facilement la répartition des cœurs à utiliser sur un nœud (on parle de mappage). Nous pouvons choisir d'exécuter le programme sur moins de cœurs que le nombre maximum de cœurs disponibles sur un nœud pour bénéficier de plus de mémoire RAM et de BPM par cœur. On peut décider de lier spécifiquement 2 cœurs d'un même nœud entre eux, etc.

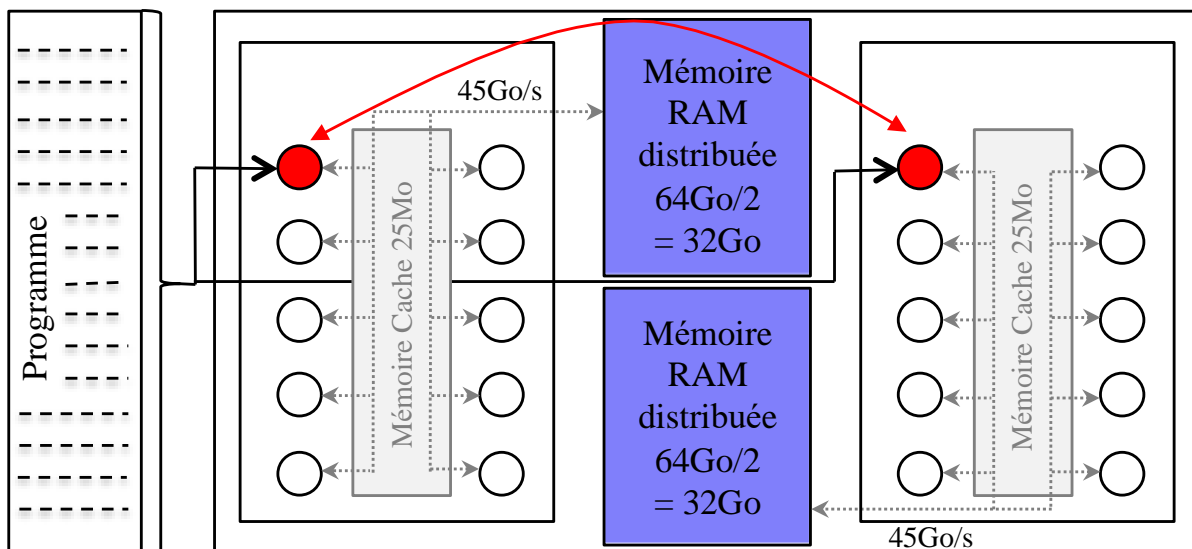


Figure 1-25: Modèle de programmation MPI

Sur EOS, chaque nœud de calcul est conçu avec deux processeurs, chacun d'eux impliquant 10 cœurs indexés de 0 à 9 et 10 à 19 (voir Figure 1-26). Chaque processeur possède sa propre mémoire cache et partage sa BPM (45Go/s) ainsi que la RAM du nœud (64Go). Pendant les calculs, l'utilisateur peut choisir simultanément, par nœuds de calcul, le nombre de cœurs et ceux qui seront utilisés. Par exemple, en «mode compact», les 20 cœurs disponibles de chaque nœud sont sélectionnés et utilisés (Figure 1-26). En mode «Scatter 10», seuls 10 cœurs parmi les 20 disponibles sont utilisés (Figure 1-27) et ainsi de suite. Le mode «Scatter 4 » est montré Figure 1-28 et le mode « Scatter 2 » sur la Figure 1-29.

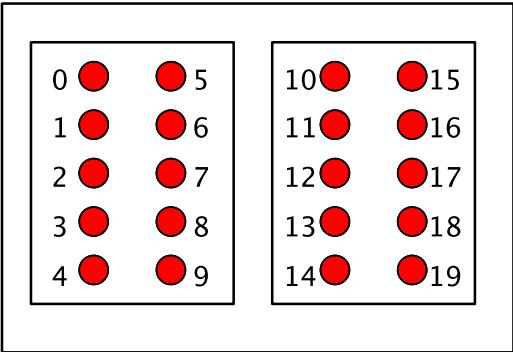


Figure 1-26: Exemple d'un "mode compact" sur un noeud d'EOS

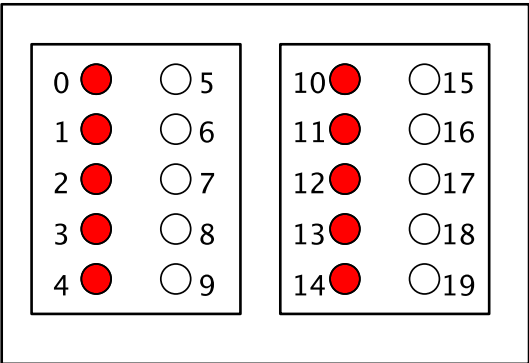


Figure 1-27: Exemple d'un "mode scatter 10" sur un noeud d'EOS

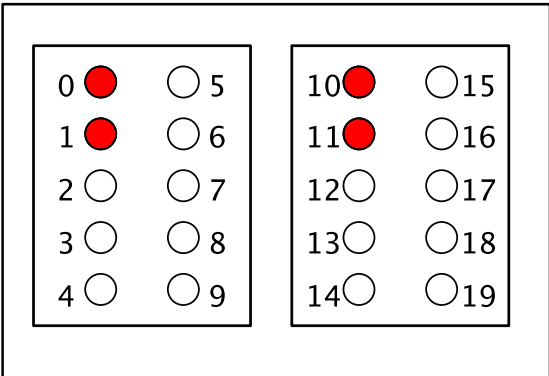


Figure 1-28: Exemple d'un "mode scatter 4" sur un noeud d'EOS

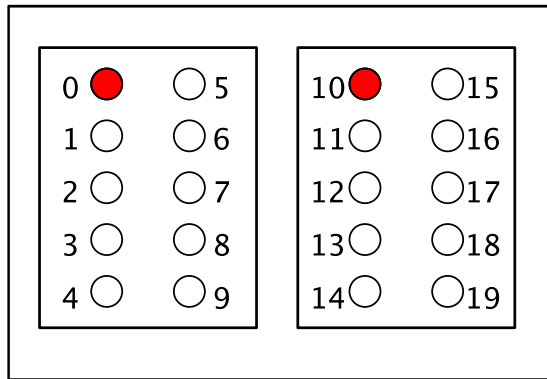


Figure 1-29: Exemple d'un "mode scatter 2" sur un noeud d'EOS

Toutefois, l'utilisateur peut spécifiquement choisir les cœurs qui effectueront le calcul. Sur la Figure 1-27, les cercles rouges indiquent que les cœurs indexés de 0 à 4 sur le premier processeur et ceux indexés de 10 à 14 sur le second processeur sont impliqués dans le calcul. Cette répartition choisie est ensuite appliquée sur tous les nœuds sélectionnés lors du lancement du programme. Des essais préliminaires ont montré qu'une répartition équilibrée des cœurs sélectionnés sur les deux processeurs de chaque nœud augmente le gain en temps de calcul.

- Programmation hybride couplant MPI/OpenMP

La programmation hybride parallèle consiste à mélanger les deux types de parallélisation vus précédemment et de tirer avantage des deux approches. Dans un premier temps, le domaine global est distribué en sous domaines sur plusieurs cœurs, on retrouve ici la notion du MPI. Ensuite, durant le calcul sur certaines régions parallèles, chaque cœur déploie des threads qui travaillent sur le sous domaine local. Le principe de l'OpenMP est mis en évidence ici. La Figure 1-30 est une schématisation du modèle de programmation hybride MPI/OpenMP avec 2 cœurs déployant 2 threads chacun.

Le calcul parallèle permet donc l'exécution simultanée d'instructions indépendantes à travers différents cœurs de calcul. A la vue de l'architecture du super calculateur EOS à mémoire distribuée, les calculs durant cette thèse seront lancés en mode MPI essentiellement. Quelques résultats en mode hybride seront également présentés.

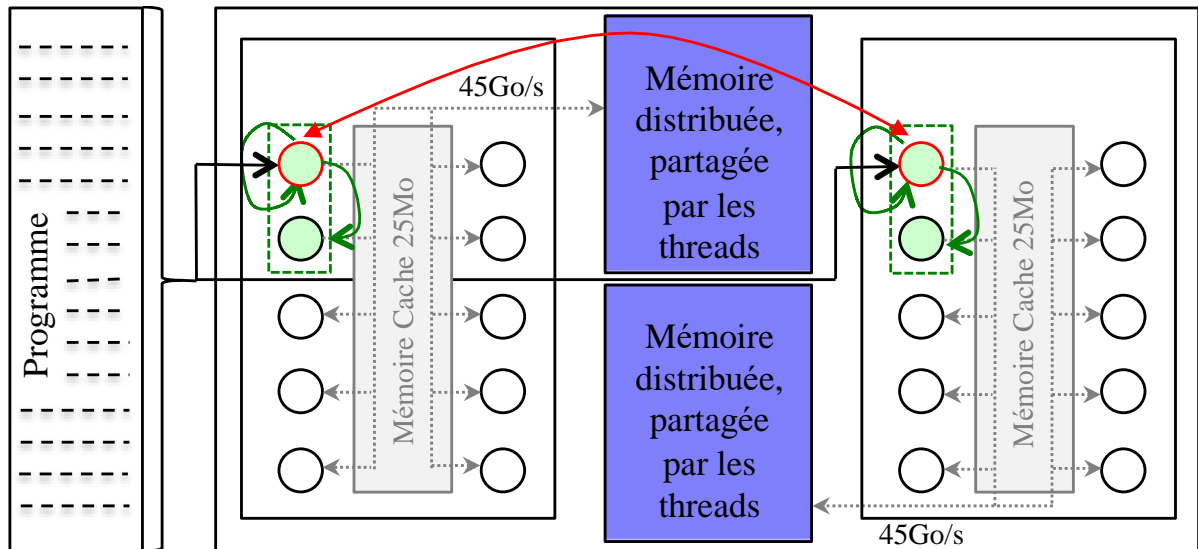


Figure 1-30: Modèle de programmation hybride MPI/OpenMP

1.5 Conclusion

L'état de l'art de la simulation 3D des streamers a montré qu'actuellement seuls les modèles de type fluide sont capables de suivre de façon auto-cohérente le développement et la propagation des streamers ainsi que leur ramification. Plusieurs hypothèses sont capables d'engendrer le branching d'un streamer initial mais la plus utilisée consiste à placer des spots plasmas modélisant l'apport statistique de germes électroniques dans l'espace inter-électrode. On peut également noter que plusieurs stratégies de réduction des temps de calcul ont été employées. Elles concernent la simplification de la prise en compte de la photo-ionisation, la réduction du nombre d'espèces ioniques ou l'utilisation des maillages adaptatifs dans le temps et dans l'espace de façon à raffiner le domaine d'étude uniquement dans les zones de fort champ électrique ou de fort gradient de densité. Cependant, très peu de calculs ont pour le moment utilisé la puissance des supercalculateurs et du développement massivement parallèle. D'une façon générale, l'efficacité du calcul parallèle est d'autant meilleure que les algorithmes de résolution des équations du modèle sont « simples » et peuvent donc se répartir de façon équilibrée entre les cœurs de calcul et au plus près de l'architecture fine de la machine. Ce n'est qu'à cette condition que la résolution d'un domaine 3D sur un nombre conséquent de cœurs (plusieurs milliers) entraîne un gain considérable en termes de temps de calcul.

Dans notre cas, nous avons choisi d'utiliser des maillages non-homogènes spatialement mais invariant dans le temps. Cette stratégie entraîne l'utilisation d'un nombre plus important de points de discrétisation. Cependant, elle évite la complexité d'un maillage adaptatif dans le temps avec la variation du nombre de points de discrétisation en fonction de l'apparition de nouvelles branches de micro-décharges et la difficulté de gérer la répartition équilibrée des

sous-domaines de calcul dont les frontières sont mouvantes. Toutefois, quelle que soit la méthodologie employée, la précision et l'efficacité des algorithmes numériques utilisés pour résoudre le modèle peuvent avoir un impact non négligeable sur les résultats de la simulation de la décharge à cause du fort couplage entre les différentes équations du modèle fluide. Il est donc très important de pouvoir tester leur performance avant leur implémentation. Le chapitre suivant est spécifiquement dédié à l'analyse des méthodes numériques pour résoudre de manière efficace l'équation elliptique de Poisson à l'aide du calcul haute performance massivement parallèle. En effet, de par notre expérience des simulations 2D et comme l'a également révélé l'étude bibliographique 3D, la résolution de l'équation de Poisson peut consommer jusqu'à 98% du temps de calcul global.

Chapitre 2 Comparaison des méthodes de résolution 3D de l'équation de Poisson en calcul haute performance

2.1 Introduction

Durant ces dernières années, l'accroissement permanent de la puissance des ordinateurs a rendu possible la simulation 3D des micro-décharges à l'aide des modèles fluides voire hybrides. La simulation 3D reste cependant très consommatrice en termes de temps de calcul. En effet, dans le modèle de la décharge, des équations hyperboliques de transport et elliptiques doivent être résolues à chaque pas de temps d'évolution du streamer. Une attention particulière doit être portée sur l'efficacité des solveurs d'équations elliptiques (telle que l'équation de Poisson ou de photo-ionisation). En effet, la contribution en termes de temps de calcul de la résolution de ces équations peut dépasser les 95% du temps global du calcul de la décharge. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les travaux de ce chapitre. Plus d'une dizaine de méthodes numériques (itératives et une directe) issues de bibliothèques libres ou développées durant cette thèse ont été testées et comparées, en termes de temps de calcul, de consommation mémoire, de précision de la solution et d'adaptation aux calculs massivement parallèle. Les comparaisons ont été faites sur la résolution 3D de l'équation de Poisson sans et avec la propagation d'une charge d'espace spécifique. Dans ce chapitre, nous avons choisi de ne montrer que les résultats provenant des 3 méthodes numériques les plus performantes. Le premier paragraphe détaille la discrétisation à l'aide de la méthode des volumes finis de l'équation de Poisson dans un domaine cartésien 3D et le système matriciel qui en découle. Le second paragraphe est consacré à la description des méthodes numériques, 2 itératives (BiCGSTAB et SOR R&B) et une directe (MUMPS). Enfin et avant de conclure, la dernière section confronte les résultats obtenus dans deux conditions spécifiques de simulation.

2.2 Discrétisation 3D de l'équation de Poisson

L'équation de Poisson est discrétisée à l'aide de la méthode des volumes finis dans un système de coordonnées cartésiennes représenté sur la Figure 2-1. Le choix de la méthode de discrétisation de l'équation de Poisson est très important pour maintenir la cohérence physique contenue dans les équations du modèle après discrétisation. En effet, comme nous allons le voir, l'équation de Poisson est issue de l'équation de Maxwell-Gauss qui fait apparaître un opérateur divergent. Cet opérateur intervient également dans les équations de conservation de la densité des espèces. Il est donc très important que la méthode de discrétisation s'applique de façon identique pour un même opérateur spatial (ici le divergent) dès lors qu'il apparaît plusieurs fois dans les équations physiques du modèle complet de la décharge.

Considérons l'équation de Poisson (e 2-1) utilisée pour calculer le potentiel $V(x, y, z)$ lorsqu'une densité de charge d'espace $\rho(x, y, z)$ est connue. ϵ_0 représente la permittivité diélectrique du vide.

$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$	e 2-1
---------------------------------------	-------

Dans le cas d'une décharge couronne dans l'air, ρ devient différent de zéro dès qu'il y a un écart local entre la concentration des espèces chargées négatives et positives.

Plus fondamentalement, l'équation de Poisson s'obtient en utilisant l'équation de Gauss Maxwell (e 2-2) couplée à l'équation (e 2-3).

$\text{div } \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$	e 2-2
---	-------

$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}} V$	e 2-3
---	-------

Pour obtenir l'équation de Poisson discrétisée dans le cadre de la méthode des volumes finis et dans une géométrie cartésienne 3D, on applique le théorème de Gauss à l'équation (e 2-2) sur chaque cellule élémentaire de volume $\tau_{i,j,k}$ centré sur le point x_i, y_j, z_k du domaine discrétisé. La Figure 2-1 présente une vue éclatée d'une cellule pavée élémentaire sur laquelle on applique l'intégration.

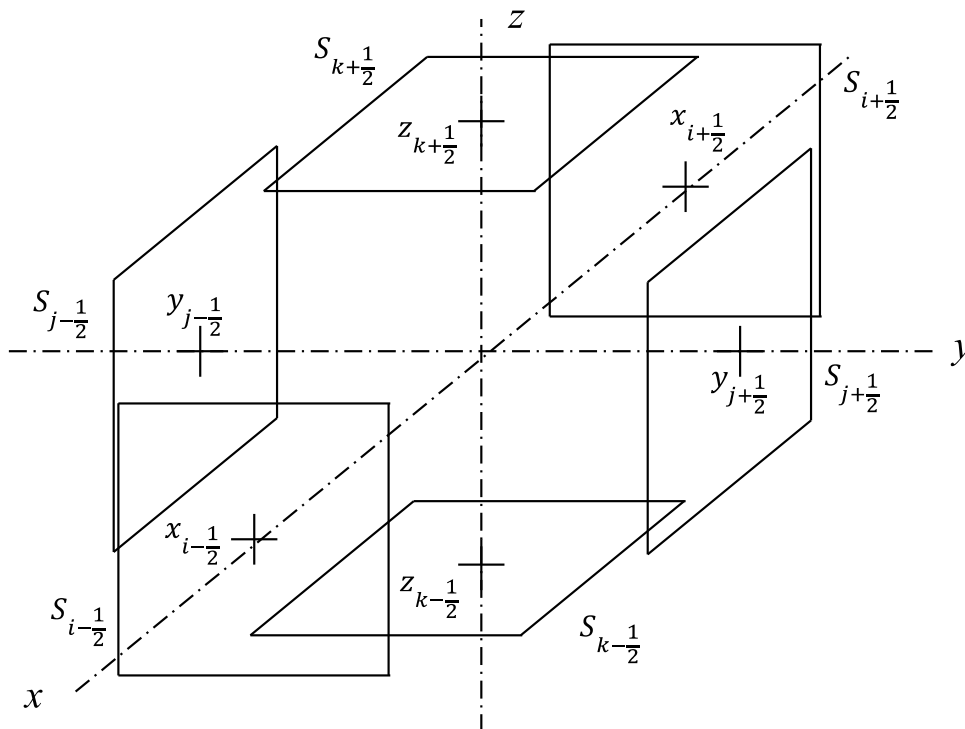


Figure 2-1: Schéma éclaté d'une cellule élémentaire 3D centrée sur le nœud x_i, y_j, z_k et de volume $\tau_{i,j,k}$

En intégrant l'équation (e 2-2), on obtient les équations (e 2-4) et (e 2-5) suivantes :

$\iiint_{\tau} \operatorname{div} \vec{E} \, d\tau = \oiint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{1}{\varepsilon_0} \iiint_{\tau} \rho \, d\tau = \frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0}$	e 2-4
---	-------

$\begin{aligned} \oiint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} &= E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}} S_{i+\frac{1}{2},j,k} - E_{x_{i-\frac{1}{2},j,k}} S_{i-\frac{1}{2},j,k} + E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}} S_{i,j+\frac{1}{2},k} \\ &\quad - E_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}} S_{i,j-\frac{1}{2},k} + E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}} S_{i,j,k+\frac{1}{2}} - E_{z_{i,j,k-\frac{1}{2}}} S_{i,j,k-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0} \end{aligned}$	e 2-5
--	-------

S est la surface fermée qui entoure le volume $\tau_{i,j,k}$ et $\bar{\rho}_{i,j,k}$ la densité de charge moyenne contenue dans le volume élémentaire. Dans l'équation précédente $E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}} S_{i+\frac{1}{2},j,k} = \iint_{S_{i+\frac{1}{2},j,k}} \vec{E} \cdot d\vec{S}$ est le flux du champ électrique à travers la surface plane ouverte qui limite la surface fermée S au point $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (x_{i+1} + x_i)$. Ce flux dépend uniquement de la composante $E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}$ du champ électrique et de la surface $S_{i+\frac{1}{2},j,k}$ perpendiculaire à l'axe x . Le potentiel peut alors être introduit en injectant l'équation (e 2-3) dans l'équation (e 2-5) ce qui conduit à l'équation suivante :

$\begin{aligned} &\left(-\frac{V_{i+1,j,k} - V_{i,j,k}}{x_{i+1} - x_i} \right) S_{i+\frac{1}{2},j,k} - \left(-\frac{V_{i,j,k} - V_{i-1,j,k}}{x_i - x_{i-1}} \right) S_{i-\frac{1}{2},j,k} \\ &\quad + \left(-\frac{V_{i,j+1,k} - V_{i,j,k}}{y_{j+1} - y_j} \right) S_{i,j+\frac{1}{2},k} - \left(-\frac{V_{i,j,k} - V_{i,j-1,k}}{y_j - y_{j-1}} \right) S_{i,j-\frac{1}{2},k} \\ &\quad + \left(-\frac{V_{i,j,k+1} - V_{i,j,k}}{z_{k+1} - z_k} \right) S_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left(-\frac{V_{i,j,k} - V_{i,j,k-1}}{z_k - z_{k-1}} \right) S_{i,j,k-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0} \end{aligned}$	e 2-6
--	-------

D'une façon générale, l'équation (e 2-6) peut se réarranger sous la forme suivante :

$\begin{aligned} &b_{i,j,k} V_{i+1,j,k} + c_{i,j,k} V_{i-1,j,k} + d_{i,j,k} V_{i,j+1,k} + e_{i,j,k} V_{i,j-1,k} + f_{i,j,k} V_{i,j,k+1} \\ &\quad + g_{i,j,k} V_{i,j,k-1} + a_{i,j,k} V_{i,j,k} = \frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0} \end{aligned}$	e 2-7
--	-------

où les coefficients géométriques sont donnés par :

$b_{i,j,k} = -\frac{S_{i+\frac{1}{2},j,k}}{x_{i+1}-x_i} \quad c_{i,j,k} = -\frac{S_{i-\frac{1}{2},j,k}}{x_i-x_{i-1}} \quad d_{i,j,k} = -\frac{S_{i,j+\frac{1}{2},k}}{y_{j+1}-y_j}$ $e_{i,j,k} = -\frac{S_{i,j-\frac{1}{2},k}}{y_j-y_{j-1}} \quad f_{i,j,k} = -\frac{S_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{z_{k+1}-z_k} \quad g_{i,j,k} = -\frac{S_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{z_k-z_{k-1}}$ $a_{i,j,k} = -b_{i,j,k} - c_{i,j,k} - d_{i,j,k} - e_{i,j,k} - f_{i,j,k} - g_{i,j,k}$	e 2-8
--	-------

L'équation (e 2-7) peut se mettre sous la forme d'un système linéaire matriciel:

$A u = \beta$	e 2-9
---------------	-------

En supposant que chaque axe est discrétisé avec $n + 2$ points nodaux (indités de 0 à $n + 1$) et que les limites connues du domaine correspondent aux indices 0 et $n + 1$, A est alors une matrice carrée creuse de dimension $n^3 \times n^3$ composée des coefficients géométriques (e 2-8), u le vecteur potentiel (composé du n^3 inconnues $V_{i,j,k}$) et β le vecteur de densité de charge d'espace incluant les conditions aux limites de potentiel. β est donc principalement composé des termes $\frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0}$, excepté aux bornes du domaine où, par exemple, les termes connus $f_{i,j,n} V_{i,j,n+1}$ sont soustraits dans les termes à droite et à gauche de l'équation (e 2-7).

Techniquement parlant, les solveurs numériques résolvent l'équation elliptique de Poisson en utilisant soit la représentation matricielle (e 2-9) soit l'équation directe (e 2-7). Avant de les mettre en œuvre, le paragraphe suivant décrit dans les grandes lignes le principe des trois méthodes retenues dans le cadre de cette thèse après plusieurs tests préliminaires :

- Deux méthodes itératives, respectivement SOR R&B (Successive Over Relaxation Red & Black) développée dans le cadre de ce travail et BiCGSTAB (BiConjugate Gradient STABILized) extraite de la bibliothèque open source LIS (Library of Iterative Solver)
- Une méthode directe MUMPS (MULTifrontal Massively Parallel Solver) proposée également en open source

2.3 Méthodes numériques de résolution de l'équation de Poisson

2.3.1 Description des méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB

Sur le principe, les méthodes itératives estiment une solution $u^{\ell+1}$ à partir d'une solution u^ℓ estimée à l'itération précédente ℓ . La solution convergée est rigoureusement obtenue pour $\ell \rightarrow \infty$. Dans la pratique, il faut stopper la convergence en utilisant un critère permettant d'avoir une solution approchée à la précision souhaitée. Pour les deux méthodes itératives, le critère de convergence sera défini par :

$\frac{\ r^\ell\ }{\ \beta\ } < \xi$	e 2-10
--------------------------------------	--------

r^ℓ est le vecteur résidu égale à $A u^\ell - \beta$ à l'itération ℓ et la notation $\| \cdot \|$ désigne la norme 2 du vecteur correspondant. ξ est la précision souhaitée de convergence ($\ll 1$). Cette définition étant clarifiée, il sera possible de comparer les vitesses de convergence des deux méthodes itératives à une précision donnée.

2.3.1.1 SOR R&B

La méthode SOR [43] permet de résoudre par itérations successives des systèmes linéaires mis sous la forme matricielle (e 2-9) ou laissés sous leur forme développée (e 2-7). C'est notamment un des avantages de la méthode SOR, car d'un point de vue pratique, il n'est pas nécessaire de construire et de stocker la matrice carré $n^3 \times n^3$ de dimension très élevée pour traiter le système d'équations (e 2-7). En effet, à partir d'un vecteur connu u^ℓ à l'itération ℓ , les nouvelles composantes du vecteur $u^{\ell+1}$ sont calculées directement à partir de l'équation (e 2-11) déduite de l'équation (e 2-7):

$V_{i,j,k}^{\ell+1} = V_{i,j,k}^\ell - \omega \frac{r_{i,j,k}^\ell}{a_{i,j,k}}$	e 2-11
---	--------

$r_{i,j,k}^\ell$ est la composante au point i, j, k du vecteur résidu r^ℓ à l'itération ℓ définie par :

$r_{i,j,k}^\ell = a_{i,j,k} V_{i,j,k}^\ell + b_{i,j,k} V_{i-1,j,k}^\ell + c_{i,j,k} V_{i+1,j,k}^\ell + d_{i,j,k} V_{i,j-1,k}^\ell + e_{i,j,k} V_{i,j+1,k}^\ell + f_{i,j,k} V_{i,j,k-1}^\ell + g_{i,j,k} V_{i,j,k+1}^\ell - \frac{\bar{\rho}_{i,j,k} \tau_{i,j,k}}{\varepsilon_0}$	e 2-12
---	--------

Par rapport à une méthode classique de type Gauss-Seidel, la méthode SOR améliore la vitesse de convergence de la solution en ajoutant un paramètre de sur-relaxation $\omega \in]0,2[$. La partie cruciale de l'algorithme SOR est donc le choix optimal de la valeur ω , cette dernière ne pouvant être calculée analytiquement que dans des cas d'études très spécifiques. D'une façon générale et pour un problème donné, une convergence rapide n'est obtenue que dans une fenêtre assez étroite autour d'une valeur précise de ω . Dans notre cas, le paramètre de sur-relaxation est calculé avec l'algorithme d'accélération de Chebyshev. En commençant avec $\omega^0 = 1$ et $\omega^1 = \frac{1}{1 - \frac{r_s^2}{2}}$, les ω^ℓ successifs prennent de nouvelles valeurs calculées à partir de la relation de récurrence suivante :

$\omega^\ell = \frac{1}{1 - \frac{r_s^2 \omega^{\ell-1}}{4}}$	pour $\ell > 1$	e 2-13
---	-----------------	--------

Conformément à l'équation (e 2-13), la convergence vers la meilleure valeur de $\omega =$
 $\omega^{(\ell \rightarrow \infty)}$ est très sensible à la valeur initiale du rayon spectral r_s . Sa valeur optimale pour un problème et une géométrie donnés est obtenue par des tests préliminaires de vitesse de convergence en utilisant une méthode de dichotomie à partir d'un intervalle initial des valeurs possibles de r_s . Une section spécifique dans la suite du manuscrit est destinée à l'étude de l'influence du choix initial du rayon spectral sur la vitesse de convergence de la solution.

Une autre amélioration de la méthode SOR consiste à utiliser la stratégie Red and Black (R&B). En effet, les n^3 mailles du domaine spatial 3D peuvent être divisés en pavés rouges et noirs comme un damier 3D. Ce fractionnement est pratique car les équations (e 2-11) et (e 2-12) montrent que la mise à jour des valeurs du maillage noir dépend uniquement des valeurs contenues dans les mailles rouges environnantes et vice versa. Il est donc possible d'effectuer un demi-balayage pour mettre à jour les valeurs des mailles noires à partir des valeurs « rouges » et ensuite un demi-balayage pour mettre à jour les valeurs des mailles rouges avec les nouvelles valeurs « noires », etc. Dans ce cas, en utilisant la technique R&B, ω^ℓ doit être modifié à chaque demi-balayage selon la procédure d'accélération de Chebyshev (e 2-13). La méthode dite SOR R&B est en outre très efficace lorsqu'elle est mise en œuvre dans le cadre du calcul parallèle hautes performances [43].

2.3.1.2 BiCGSTAB

L'algorithme BiCGSTAB ([44] [45]) est une méthode itérative faisant partie de la famille des méthodes de Krylov [46]. Cette méthode résout des systèmes linéaires mis sous la forme matricielle (e 2-9) ou un équivalent réécrit sous la forme suivante :

$M^{-1}A v = M^{-1}\beta$	e 2-14
---------------------------	--------

Dans ce cas, M est une matrice préconditionnée choisie afin d'améliorer la vitesse de convergence de la méthode itérative. Par exemple, M pourrait vérifier que $M^{-1}A$ soit proche de la matrice identité ou présente une distribution de valeur propre plus pratique qui accélérera la convergence. A partir de deux vecteurs arbitraires v^0 et \tilde{r}^0 de dimension n^3 , l'algorithme BiCGSTAB crée un nouveau vecteur $p^0 = r^0$ et construit de façon itérative la nouvelle solution en utilisant l'algorithme illustré dans la Table 2-1.

$$\begin{aligned}
p^\ell &\rightarrow \hat{p}^\ell = M^{-1}p^\ell \rightarrow \tilde{p}^\ell = A\hat{p}^\ell \\
\alpha^\ell &= \frac{(r^\ell, \tilde{r}^0)}{(\tilde{p}^\ell, \tilde{r}^0)} \\
s^\ell &= r^\ell - \alpha^\ell \tilde{p}^\ell \rightarrow \hat{s}^\ell = M^{-1}s^\ell \rightarrow \tilde{s}^\ell = A\hat{s}^\ell \\
w^\ell &= \frac{(\tilde{s}^\ell, s^\ell)}{(\tilde{s}^\ell, \tilde{s}^\ell)} \\
v^{\ell+1} &= v^\ell + \alpha^\ell \hat{p}^\ell + w^\ell \hat{s}^\ell \\
r^{\ell+1} &= \hat{s}^\ell - w^\ell \tilde{s}^\ell \\
p^{\ell+1} &= r^{\ell+1} + \frac{(r^{\ell+1}, \tilde{r}^0)\alpha^\ell}{(r^\ell, \tilde{r}^0)w^\ell} (p^\ell - w^\ell \tilde{p}^\ell)
\end{aligned}$$

Table 2-1: Algorithme de la méthode BiCGSTAB où la notation $(,)$ correspond à un produit scalaire

Il convient de noter que l'algorithme BiCGSTAB implique des multiplications avec la matrice creuse A de dimension $n^3 \times n^3$. Afin de réduire les difficultés dues à la mémoire, la matrice A est convertie en format Compressed Sparse Row (CSR) avant sa transmission à la bibliothèque LIS qui implémente l'algorithme BiCGSTAB. Par exemple, le système matriciel (e 2-15) de dimension 8×8 est obtenu lorsque $n = 2$ (correspondant à 2 mailles dans chaque direction x, y, z) et avec des conditions aux limites fixées aux indices 0 and $n + 1 = 3$ dans chaque direction.

$$\begin{bmatrix}
a_{1,1,1} & c_{1,1,1} & e_{1,1,1} & 0 & g_{1,1,1} & 0 & 0 & 0 \\
b_{2,1,1} & a_{2,1,1} & 0 & e_{2,1,1} & 0 & g_{2,1,1} & 0 & 0 \\
d_{1,2,1} & 0 & a_{1,2,1} & c_{1,2,1} & 0 & 0 & g_{1,2,1} & 0 \\
0 & d_{2,2,1} & b_{2,2,1} & a_{2,2,1} & 0 & 0 & 0 & g_{2,2,1} \\
f_{1,1,2} & 0 & 0 & 0 & a_{1,1,2} & c_{1,1,2} & e_{1,1,2} & 0 \\
0 & f_{2,1,2} & 0 & 0 & b_{2,1,2} & a_{2,1,2} & 0 & e_{2,1,2} \\
0 & 0 & f_{1,2,2} & 0 & d_{1,2,2} & 0 & a_{1,2,2} & c_{1,2,2} \\
0 & 0 & 0 & f_{2,2,2} & 0 & d_{2,2,2} & b_{2,2,2} & a_{2,2,2}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
V_{1,1,1} \\
V_{2,1,1} \\
V_{1,2,1} \\
V_{2,2,1} \\
V_{1,1,2} \\
V_{2,1,2} \\
V_{1,2,2} \\
V_{2,2,2}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
f_{1,1,1}V_{1,1,0} + \frac{\rho_{1,1,1}}{\varepsilon_0} \\
f_{2,1,1}V_{2,1,0} + \frac{\rho_{2,1,1}}{\varepsilon_0} \\
f_{1,2,1}V_{1,2,0} + \frac{\rho_{1,2,1}}{\varepsilon_0} \\
f_{2,2,1}V_{2,2,0} + \frac{\rho_{2,2,1}}{\varepsilon_0} \\
g_{1,1,2}V_{1,1,3} + \frac{\rho_{1,1,2}}{\varepsilon_0} \\
g_{2,1,2}V_{2,1,3} + \frac{\rho_{2,1,2}}{\varepsilon_0} \\
g_{1,2,2}V_{1,2,3} + \frac{\rho_{1,2,2}}{\varepsilon_0} \\
g_{2,2,2}V_{2,2,3} + \frac{\rho_{2,2,2}}{\varepsilon_0}
\end{bmatrix}
\quad \text{e 2-15}$$

Après la construction de la matrice A , une fonction de LIS permet d'utiliser le format CSR pour la stocker. Ce format permet de décrire la matrice A sous la forme de trois vecteurs. En format CSR, seules les valeurs non nulles de la matrice creuse sont stockées dans trois vecteurs unidimensionnels: un vecteur contenant les valeurs non nulles de la matrice, un vecteur associé aux indices des colonnes de chaque éléments contenu dans le vecteur des valeurs et un vecteur de pointeur de ligne. Ce troisième vecteur représente l'emplacement des éléments non nuls en tête de ligne de la matrice A dans le vecteur des valeurs. Le vecteur pointeur de ligne a une longueur égale au nombre de lignes de la matrice + 1, avec le dernier élément pointant sur la ligne fictive de la matrice A . Les vecteurs d'indices de colonnes et des valeurs ont la même dimension, égale au nombre de valeurs non nulles. Le format CSR de la matrice A du système linéaire avec $n = 2$ est défini par les vecteurs suivants:

$a_{1,1,1}$	$c_{1,1,1}$	$e_{1,1,1}$	$g_{1,1,1}$	$b_{2,1,1}$	$a_{2,1,1}$	$a_{1,2,2}$	$c_{1,2,2}$	$f_{2,2,2}$	$d_{2,2,2}$	$b_{2,2,2}$	$a_{2,2,2}$
-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------

Table 2-2: Vecteur de valeurs de dimension égale au nombre de valeurs non nulles de la matrice A

0	1	2	4	0	1	6	7	3	5	6	7
---	---	---	---	---	---	-------	---	---	---	---	---	---

Table 2-3: Vecteur des indices des colonnes de dimension égale au nombre de valeurs non nulles de la matrice A

0	4	8	12	16	20	24	28	32
---	---	---	----	----	----	----	----	----

Table 2-4: Vecteur des pointeurs de ligne de dimension égale à 9 (8+1) lignes

Afin de faciliter la compréhension du lecteur, on détaille ici l'obtention des valeurs du vecteur pointeur. La première valeur du vecteur pointeur pointe sur l'élément 0 du vecteur valeur soit $a_{1,1,1}$ qui est en tête de ligne. Ensuite, la deuxième valeur du vecteur pointeur pointe sur le deuxième élément en tête de ligne, c'est-à-dire la valeur $b_{2,1,1}$ située à l'emplacement 4 du vecteur valeur. Et ainsi de suite jusqu'à la dernière ligne.

2.3.2 Principe de la méthode directe MUMPS

MUMPS est un solveur direct de systèmes linéaires matriciels (e 2-9) qui appartient à la famille des solveurs multifrontaux [47] [48]. La matrice A est envoyée à MUMPS au format COOrdinate (COO) en trois vecteurs (valeurs non nulles de la matrice, indice de ligne et indice de colonne) de dimension égale au nombre de coefficients de Poisson non nuls. Le format COO est donc différent du format CSR. Par exemple, dans le cas du système linéaire (e 2-15), le format COO de la matrice A est défini par les vecteurs suivants:

$a_{1,1,1}$	$c_{1,1,1}$	$e_{1,1,1}$	$g_{1,1,1}$	$b_{2,1,1}$	$a_{2,1,1}$...	$a_{1,2,2}$	$c_{1,2,2}$	$f_{2,2,2}$	$d_{2,2,2}$	$b_{2,2,2}$	$a_{2,2,2}$
-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-----	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------

Table 2-5: Tableau de valeurs de dimension égale au nombre de valeurs non nulles de la matrice A

1	2	3	5	1	2	...	7	8	4	6	7	8
---	---	---	---	---	---	-----	---	---	---	---	---	---

Table 2-6: Indices des colonnes de dimension égale au nombre de valeurs non nulles de la matrice A

1	1	1	1	2	2	...	7	7	8	8	8	8
---	---	---	---	---	---	-----	---	---	---	---	---	---

Table 2-7: Indices des lignes de dimension égale au nombre de valeurs non nulles de la matrice A

Le système linéaire est résolu en trois étapes principales:

- Analyse
- Factorisation
- Solution

L'étape d'analyse est une étape de pré-conditionnement nécessaire pour améliorer l'efficacité des prochaines étapes en termes de temps et de mémoire de calcul. Par conséquent, la matrice A est prétraitée de la manière suivante:

$A_p = P D_r A Q_c D_c P^T$	e 2-16
-----------------------------	--------

P est une matrice qui inverse l'ordre des inconnus de la matrice afin de réduire le remplissage de la factorisation. Q_c est une matrice de permutation modifiant l'ordre des colonnes de la matrice A_p . D_r et D_c sont des matrices diagonales pour ajuster respectivement les termes ligne et colonne afin d'améliorer les erreurs dues aux arrondis. De plus, au cours de l'étape d'analyse, un arbre d'élimination est exécuté pour estimer les opérations et la mémoire nécessaires à la factorisation et à la solution.

Dans un second temps, MUMPS procède à la factorisation de la matrice A_p sous la forme:

$A_p = L U$	e 2-17
-------------	--------

où L est la matrice triangulaire basse et U la matrice triangulaire haute.

Par exemple, dans le cas d'une matrice A_p de dimension 3×3 , l'équation (e 2-17) s'écrit:

$\begin{bmatrix} A_{p_{11}} & A_{p_{12}} & A_{p_{13}} \\ A_{p_{21}} & A_{p_{22}} & A_{p_{23}} \\ A_{p_{31}} & A_{p_{32}} & A_{p_{33}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix}$	e 2-18
---	--------

Finalement, la solution est obtenue suivant des étapes de descente et montée :

$L q = \beta_p \quad \rightarrow \quad U u_p = q$	e 2-19
---	--------

β_p est le second membre pré-conditionné du système linéaire (e 2-9) et u_p le vecteur solution résultant. Les composantes du vecteur sont calculées par les procédures suivantes de descente et de montée:

$q_i = \frac{\beta_{pi}}{L_{ii}} \quad i = 1$	e 2-20
$q_i = \frac{\beta_{pi}}{L_{ii}} - \left(\sum_{j=1}^{j=i-1} \frac{L_{ij} \beta_{pj}}{L_{ii}} \right) \quad i = 2, 3, \dots, N$	

$v_{p_i} = \frac{q_i}{U_{ii}} \quad i = N$	e 2-21
$u_{p_i} = \frac{q_i}{U_{ii}} - \left(\sum_{j=i+1}^{j=N} \frac{U_{ij} v_{p_j}}{U_{ii}} \right) \quad i = N - 1, N - 2, \dots, 1$	

Le vecteur solution pré-conditionné u_p est ensuite post-traité afin d'obtenir le vecteur solution u du système linéaire défini par l'équation (e 2-9). Pour plus de précision, nous invitons les lecteurs à consulter les références [49] [50] [51] [52] [53] [54] concernant les techniques associées à la méthode directe MUMPS.

2.4 Etudes comparatives de l'efficacité des méthodes numériques dans le cadre du calcul haute performance

Les méthodes numériques décrites précédemment sont testées dans deux conditions de simulation. La première annule le second membre de l'équation de Poisson (qui devient l'équation de Laplace) et permet dans un cas simplifié de mener plusieurs études paramétriques pour améliorer les performances des calculs. La seconde propage une charge d'espace analytique représentative de celle transportée par un streamer et permet de confronter les méthodes dans une situation instationnaire proche du modèle complet.

Sauf lorsque cela est explicitement précisé, tous les calculs ont été effectués avec la librairie MPI pour répartir les calculs sur plusieurs cœurs.

2.4.1 Etudes préliminaires dans le cadre de la résolution de l'équation de Laplace

2.4.1.1 Conditions de simulation

Pour ces études paramétriques, un cube de côté égal à 1 millimètre est divisé en n^3 points de discrétisation équidistants ou non, n étant égal à 100, 200, 400 ou 800. Les conditions aux limites de Dirichlet sont appliquées sur les électrodes inférieure et supérieure (0kV et 6kV respectivement), tandis que les conditions de Neumann à dérivées nulles sont appliquées sur les autres surfaces latérales du domaine. Tous les points à l'intérieur du domaine 3D sont initialisés à la valeur moyenne du potentiel entre les deux électrodes c'est-à-dire 3000V. La résolution de l'équation de Laplace donne le potentiel et le champ électrique géométrique (c'est-à-dire uniquement dû à la présence des électrodes sans charge d'espace accumulée). Le vecteur champ électrique est vertical dirigé vers le bas. Les solutions analytiques du problème sont simplement :

$V_a(z) = 6000 \times z \text{ V}$	e 2-22
------------------------------------	--------

$\vec{E}_a(z) = -6.10^6 \vec{e}_z \text{ V.m}^{-1}$	e 2-23
---	--------

Le profil 3D du potentiel résolu est montré à l'aide du logiciel Paraview sur la Figure 2-2. La géométrie plane des électrodes conduit à des surfaces équipotentielles planes et parallèles aux électrodes (cf. Figure 2-3).

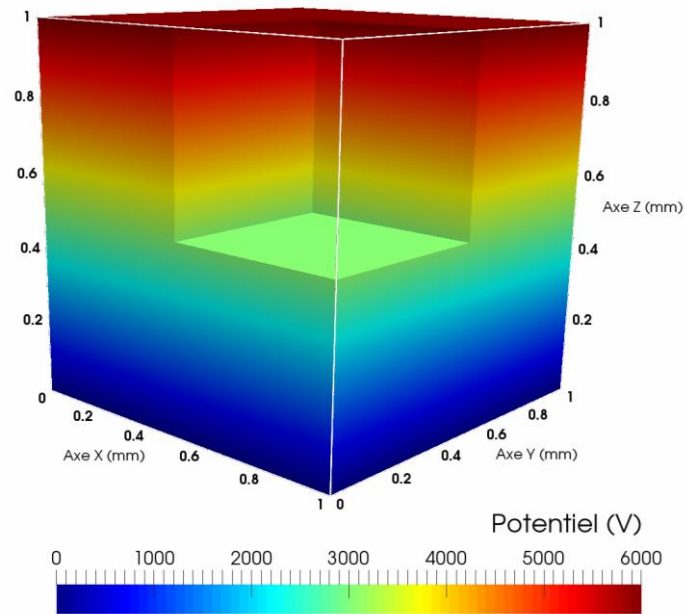


Figure 2-2: Profil 3D du potentiel entre deux électrodes planes

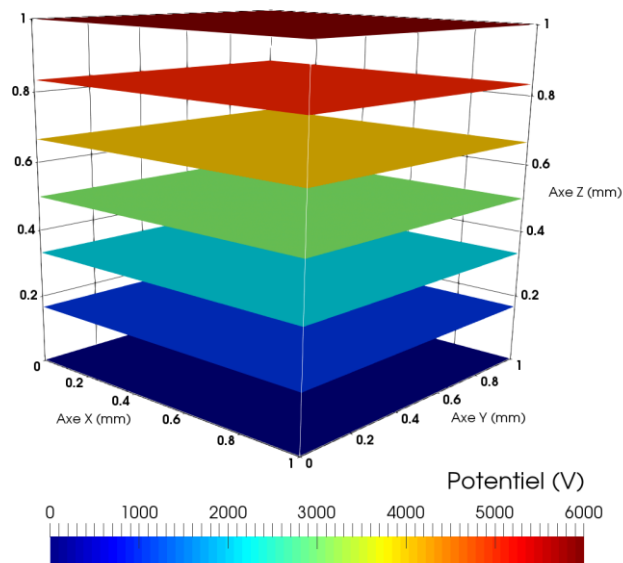


Figure 2-3: Surfaces équipotentiellles entre deux électrodes planes

2.4.1.2 Sensibilité de la méthode SOR R&B aux valeurs du rayon spectral

Dans la méthode SOR R&B, l'accélération de la convergence induite par l'algorithme de Chebyshev est très sensible à la valeur du rayon spectral τ_s [55]. La valeur optimale du rayon spectral induit la convergence la plus rapide pour une précision de convergence donnée, ce qui signifie également un temps de calcul minimum. Afin d'optimiser la vitesse de convergence, on compare le nombre d'itérations nécessaires pour que SOR R&B converge en

fonction de la valeur du rayon spectral pour une précision de convergence ξ et un nombre de points de discrétisation n^3 fixés.

La Figure 2-4, la Figure 2-5, la Figure 2-6 et la Figure 2-7 montrent les résultats obtenus avec des maillages homogènes à pas constant pour $n = 100, 200, 400$ et 800 , une précision $\xi = 10^{-6}, 10^{-7}$ et 10^{-8} et plusieurs valeurs de r_s très proches de 1.

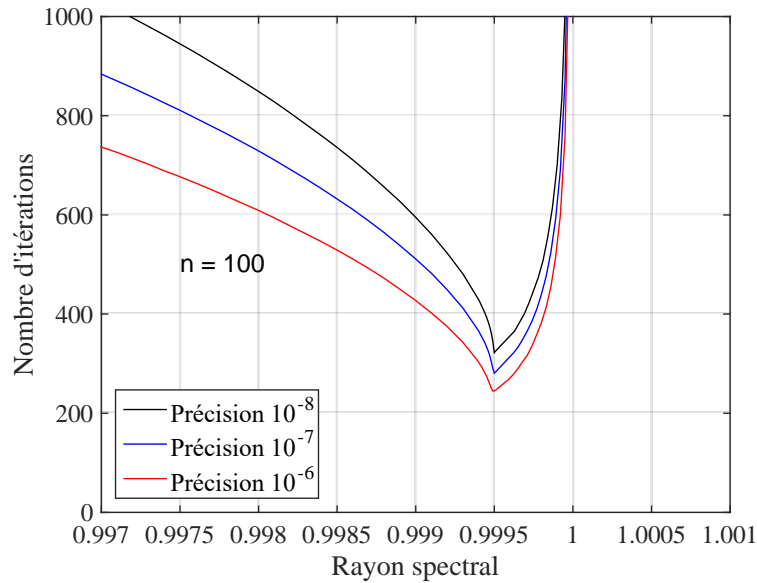


Figure 2-4: Nombre d'itérations pour converger vers la solution en fonction de la précision souhaitée et des valeurs du rayon spectral ($n = 100$, maillage homogène à pas constant)

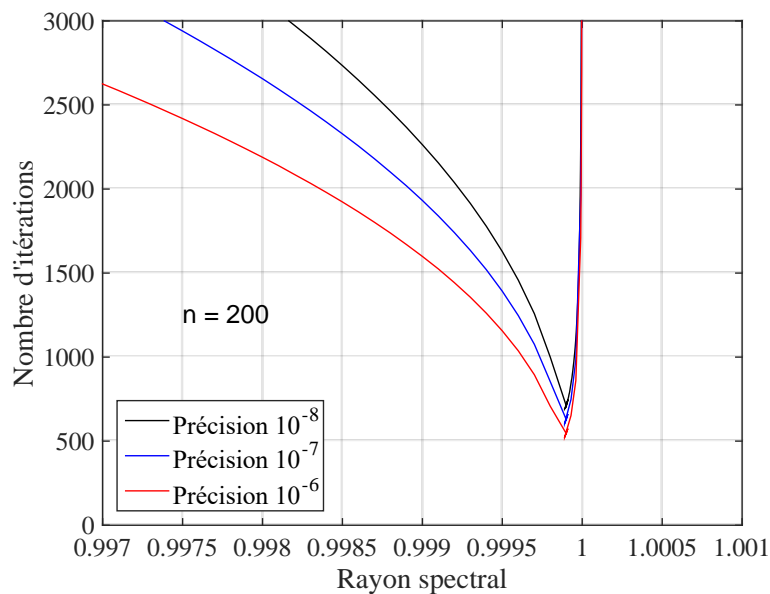


Figure 2-5: Nombre d'itérations pour converger vers la solution en fonction de la précision souhaitée et des valeurs du rayon spectral ($n = 200$, maillage homogène à pas constant)

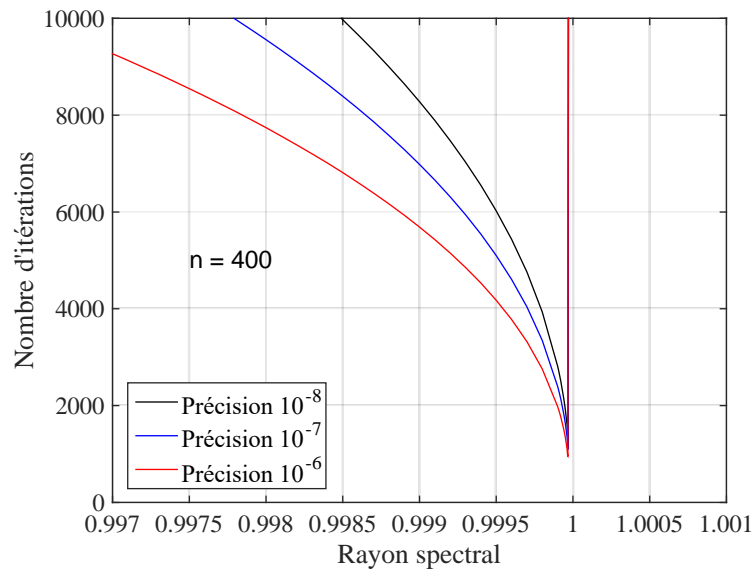


Figure 2-6: Nombre d'itérations pour converger vers la solution en fonction de la précision souhaitée et des valeurs du rayon spectral ($n = 400$, maillage homogène à pas constant)

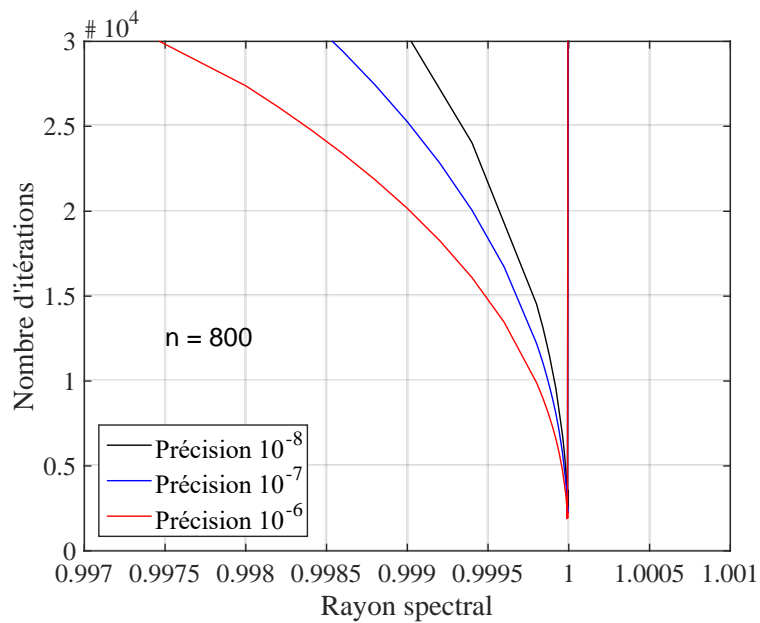


Figure 2-7: Nombre d'itérations pour converger vers la solution en fonction de la précision souhaitée et des valeurs du rayon spectral ($n = 800$, maillage homogène à pas constant)

Suivant ces essais préliminaires, les valeurs optimales de r_s obtenues dans nos conditions de simulation sont listées dans la Table 2-8.

Nombre de points n	Précision de convergence ξ	Maillage homogène		Maillage non homogène	
		Nombre minimum d'itérations	Rayon spectral optimum r_s	Nombre minimum d'itération	Rayon spectral optimum r_s
100	10^{-6}	245	0.99949999	423	0.99977243
	10^{-7}	281		–	–
	10^{-8}	322		–	–
200	10^{-6}	522	0.99988909	981	0.99996870
	10^{-7}	603		–	–
	10^{-8}	691		–	–
400	10^{-6}	951	0.99996650	1587	0.99998921
	10^{-7}	1100		–	–
	10^{-8}	1247		–	–
800	10^{-6}	1893	0.99999146	3181	0.99999700
	10^{-7}	2194		–	–
	10^{-8}	2526		–	–

Table 2-8: Rayon spectral optimum pour une précision de convergence et un nombre de maille de discrétisation donnés

Pour toutes les combinaisons étudiées en termes de nombre de points de discrétisation et de précision, les résultats montrent que la vitesse de convergence est très sensible à la valeur du rayon spectral injecté. Dans nos conditions de simulation, l'accélération de la convergence augmente considérablement lorsque le rayon spectral tend vers 1. Cependant, le nombre d'itérations nécessaires pour converger augmente brutalement dès que le rayon spectral dépasse la valeur optimale donnée dans la Table 2-8. On peut aussi constater que, comme prévu dans les exemples rapportés dans [56], plus le nombre de points de discrétisation est élevé, plus la valeur optimale du rayon spectral est proche de 1. Les résultats reportés dans la Table 2-8 montrent également que la valeur optimale de r_s ne dépend pas de la précision choisie. Pour approfondir l'étude, les mêmes tests sont à nouveau effectués avec un maillage non-homogène dans l'espace inter-électrode et seulement avec une précision de convergence $\xi = 10^{-6}$. Le maillage non-homogène permet d'obtenir une précision spatiale plus élevée dans certaines zones du domaine et dégradée dans d'autres. Selon l'axe z , le maillage est resserré sur l'électrode du haut et se distend en s'approchant de la cathode. De la même façon, le maillage est resserré autour de l'axe central du domaine et s'élargit selon les directions x et y vers les faces latérales verticales. Les valeurs optimales de r_s obtenues dans ces conditions de simulation sont listées dans les deux dernières colonnes de la Table 2-8. Les mêmes tendances sont observées qu'avec le maillage homogène. Lorsque le nombre de points de discrétisation augmente, le r_s optimum se rapproche de 1. Toutefois, pour atteindre la convergence, le

nombre d'itérations nécessaires est en moyenne 1,74 fois plus grand que dans le cas homogène.

Ces tests préliminaires indiquent clairement, que pour exploiter l'algorithme SOR R&B dans les meilleures conditions, un diagnostic préliminaire et minutieux doit être entrepris afin de déterminer la valeur optimale de r_s pour une configuration donnée. Néanmoins, une fois que les conditions de simulation sont fixées (c'est-à-dire la répartition du maillage spatial, le nombre de points de discrétisation et les conditions aux limites), la valeur prédéterminée de r_s reste très souvent optimale quelles que soient les valeurs du vecteur β , second membre de l'équation (e 2-9). Ceci est important car, dans le cas des simulations de streamer, le vecteur β est modifié à chaque pas de temps en tenant compte de l'évolution de la charge d'espace. Dans le cas d'un maillage inhomogène et en fonction des conditions de simulation, il peut être nécessaire de réévaluer le paramètre r_s lorsque le nombre d'itérations de convergence devient supérieur à un seuil préfixé.

2.4.1.3 Sensibilité des méthodes au mode découpage du domaine

Dans le cadre du calcul haute performance, les solveurs utilisent la bibliothèque MPI afin de distribuer des éléments du domaine global sur plusieurs cœurs. Par conséquent, chaque cœur réalise ses calculs sur une partie locale du domaine appelé sous-domaine qui lui est propre. Le domaine cubique étudié est divisé entre les cœurs en tranches ou en cubes de même taille (respectivement $n \times n \times nz_{local}$ pour un découpage en tranche et $nx_{local} \times ny_{local} \times nz_{local}$ pour un découpage en cube). Un exemple de distribution du domaine global en sous-domaines locaux (type pavés empilés ou cubes contigus) avec 8 cœurs est illustré sur la Figure 2-8. Un cœur résout uniquement les valeurs locales du domaine alloué et doit communiquer les valeurs aux frontières de son sous-domaine aux cœurs voisins.

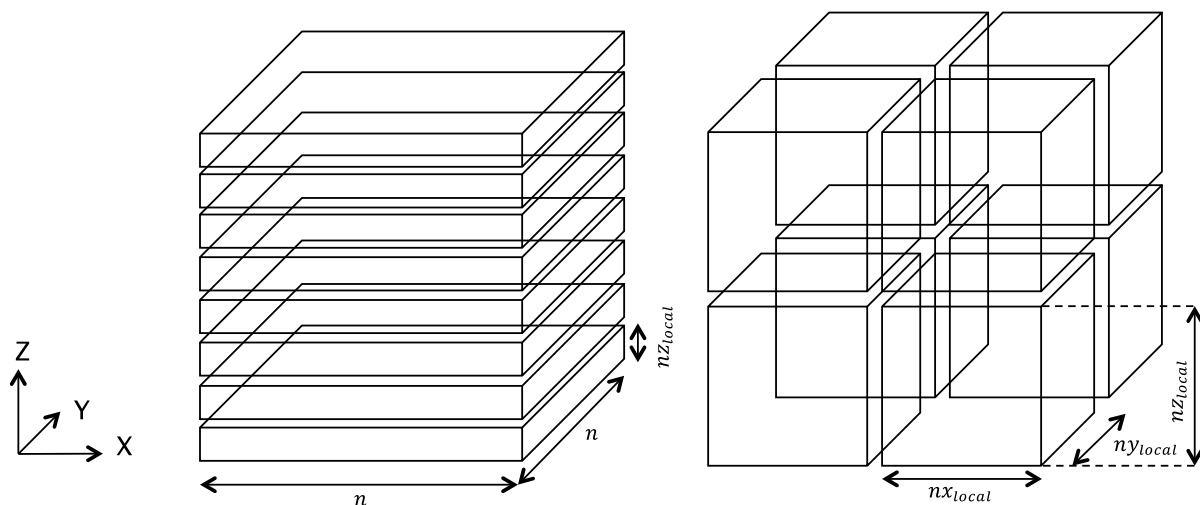


Figure 2-8: Distribution du domaine global en tranche (à gauche) et en cube (à droite) sur 8 cœurs de calcul

La configuration en tranche est la plus limitante en termes d'utilisation des cœurs de calcul. Par exemple, dans le cas $n = 200$, le domaine peut être au maximum distribué en 200 tranches de taille de $200^2 \times 1$. Chacune des tranches étant gérée par un cœur, on peut au maximum répartir le calcul sur 200 cœurs. A l'inverse, la taille minimale d'un cuboïde étant de 1 maille, le calcul peut être théoriquement distribué sur 200^3 cœurs. Le découpage en cube laisse donc plus de souplesse dans la répartition des sous-domaines. Cependant, sur le super ordinateur EOS, l'utilisateur peut au maximum lancer un calcul sur 1800 cœurs. De ce fait, tous les tests réalisés seront lancés au maximum avec 1800 cœurs ce qui contraint la dimension minimale des sous-domaines lors d'un découpage en cubes. La Figure 2-9 et la Figure 2-10 comparent les temps de résolution de l'équation de Laplace pour $n = 200$ avec les méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB pour un découpage du domaine en tranche et en cube. Le critère de convergence est fixé à $\xi = 10^{-6}$ (voir équation (e 2-10)).

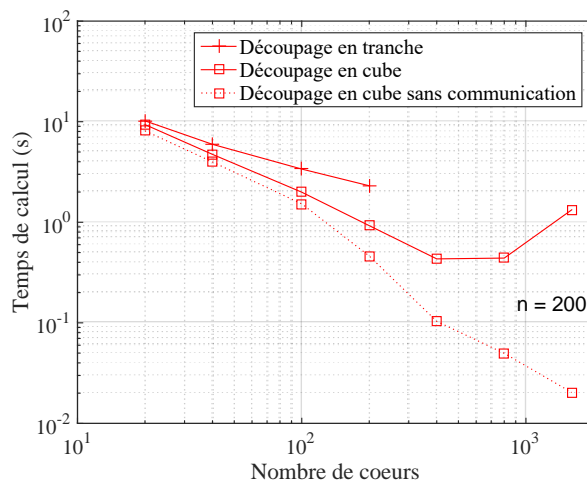


Figure 2-9: Temps de résolution de l'équation de Laplace avec SOR R&B en fonction du nombre de cœurs et du mode de découpage

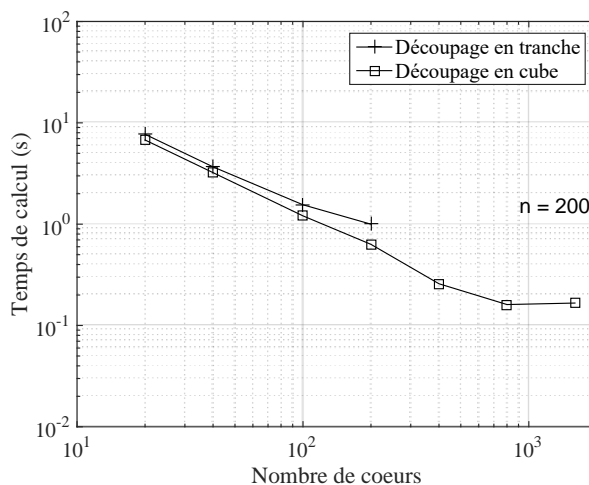


Figure 2-10: Temps de résolution de l'équation de Laplace avec BiCGSTAB en fonction du nombre de cœurs et du mode de découpage

Dans les deux cas et jusqu'à 200 cœurs (nombre maximum de cœurs utilisables en mode tranche pour $n = 200$), le temps de calcul diminue lorsque le nombre de cœurs augmente et la convergence est toujours plus rapide avec un découpage en cube. De plus, l'écart de performance entre un découpage en tranche et en cube augmente avec l'augmentation du nombre de cœurs. Par exemple, le programme SOR R&B exécuté avec 20 cœurs nécessite 10,2 secondes avec un découpage en tranche et 9,3 secondes avec un découpage en cube soit un écart relatif d'environ -9% . Pour 200 cœurs, l'écart atteint ~61% (0,9s en cube au lieu de 2,3s en tranches). Cette différence de temps s'explique par le temps d'échange des valeurs du potentiel électrique entre les cœurs aux limites des sous-domaines. Avec une distribution en tranche, deux communications sont nécessaires (nord et sud) pour chaque cœur et six avec une distribution en cube (nord, sud, est, ouest, avant, arrière). Par exemple, avec 200 cœurs et un découpage en tranche, chaque cœur communique deux fois 200^2 valeurs, soit un total de 80000 valeurs, alors qu'avec un découpage en cube il y aura six communications mais avec seulement 7200 valeurs par communication (soit 43200 valeurs au total).

Pour un nombre de cœurs identique, la distribution du domaine global en cube est plus efficace car il y a moins de valeurs échangées entre sous-domaines ce qui réduit les temps de communications. L'autre avantage du découpage en cube est qu'il permet d'utiliser un nombre plus important de cœurs (théoriquement n^3 pour 1 maille par cœur au lieu de n dans le cas d'un découpage en tranche). Cependant, le fait d'augmenter le nombre de cœur augmente naturellement le poids des communications dans le temps de calcul total.

Pour SOR R&B et avec 1600 cœurs par exemple, le programme nécessite 1,3s pour converger dont 98% est consommé par les communications. En effet, la courbe en pointillés de la Figure 2-9 qui montre le temps de calcul hors communications, indique que seulement 0,02 secondes sont consacrées à la résolution du potentiel électrique par chaque cœur. L'accélération de la vitesse de convergence en fonction de l'augmentation du nombre de cœurs est ici limitée par les temps de communication entre cœurs. On constate la même tendance sur la Figure 2-10 avec la méthode itérative BiCGSTAB. Le temps de calcul le plus bas est obtenu avec 800 cœurs (0,1610s), alors qu'avec 1600 cœurs ce même calcul prend légèrement plus de temps (0,1668s).

La Figure 2-11 montre un résultat obtenu avec la méthode directe MUMPS. Seulement des calculs exécutés avec le découpage en cube sont possibles et avec un nombre de cœurs supérieur ou égal à 400. En effet, chaque sous-domaine associé à un cœur voit sa taille diminuer lorsqu'on augmente le nombre de cœurs. Ce n'est qu'à partir de 400 cœurs que l'espace disponible est suffisant pour que le calcul converge. Toutefois, on constate sur la Figure 2-11 que les temps de communication prédominent car on n'observe pas de décroissance des temps de calcul avec l'augmentation du nombre de cœurs. La méthode MUMPS apparaît dans notre cas en 3D moins efficace en termes d'exécution et d'efficacité. Avec 400 cœurs le temps de résolution nécessaire à MUMPS est de 3,15s alors que

BiCGSTAB et SOR R&B demandent uniquement respectivement 0,25s et 0,43s. MUMPS est dans ce cas 12 fois moins rapide que BiCGSTAB et 7 fois moins rapide que SOR R&B.

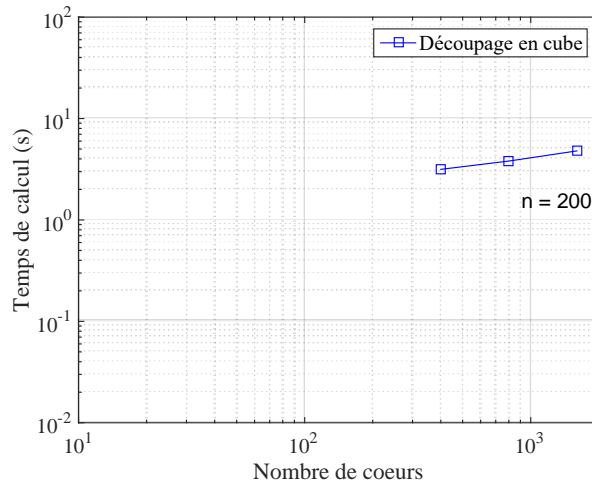


Figure 2-11: Temps de résolution de l'équation de Laplace avec MUMPS

L'ensemble des résultats obtenus montre clairement que la distribution du domaine global en cube sur les cœurs de calcul est plus efficace et plus souple en termes d'utilisation. L'accélération de la convergence peut cependant être limitée par les temps de communication si le nombre de cœurs devient trop important. Ces premiers tests montrent également l'efficacité des méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB sur la méthode directe MUMPS. Tous les autres tests paramétriques présentés dans la suite du manuscrit sont réalisés avec un découpage du domaine d'étude en cubes.

2.4.1.4 Sensibilité des méthodes à la répartition des cœurs sur les nœuds de calcul

Sur EOS, les utilisateurs peuvent choisir comment répartir les cœurs de calcul sur les nœuds (cf. Chapitre 1). Chaque nœud contient 2 processeurs impliquant 10 cœurs indexés de 0 à 9 et de 10 à 19 (voir pour rappel la Figure 1-26 du Chapitre 1). Chaque processeur a sa propre mémoire cache de 25Mo et partage la RAM du nœud qui est de 64Go. Un nœud de calcul contient donc 20 cœurs et on peut choisir de les utiliser tous, la moitié ou seulement 2 par exemple. Les dénominations de ces trois exemples sont respectivement : mode compact, mode scatter10 et mode scatter2. De plus, l'utilisateur peut spécifiquement choisir les cœurs qui effectueront le calcul. A titre d'exemple, le mode scatter 10 (0-4,10-14) est représenté sur la Figure 2-12 où les cercles rouges indiquent les 10 cœurs impliqués dans le calcul indexés de 0 à 4 sur le premier processeur et ceux indexés de 10 à 14 sur le second processeur. Cette répartition choisie est ensuite appliquée sur tous les nœuds sélectionnés.

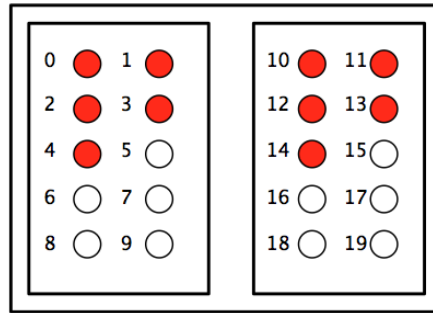


Figure 2-12: Exemple d'une possibilité de scatter10 sur un nœud de EOS

Des essais préliminaires ont montré qu'une répartition équilibrée des cœurs sélectionnés sur les deux processeurs de chaque nœud augmente le gain en temps de calcul. Ce résultat est montré sur la Figure 2-13 qui évalue le temps de calcul pour résoudre l'équation de Laplace en utilisant la méthode SOR R&B pour deux différents modes de répartition des cœurs sur les nœuds avec une tolérance de convergence fixée à $\xi = 10^{-6}$ (voir équation (e 2-10)).

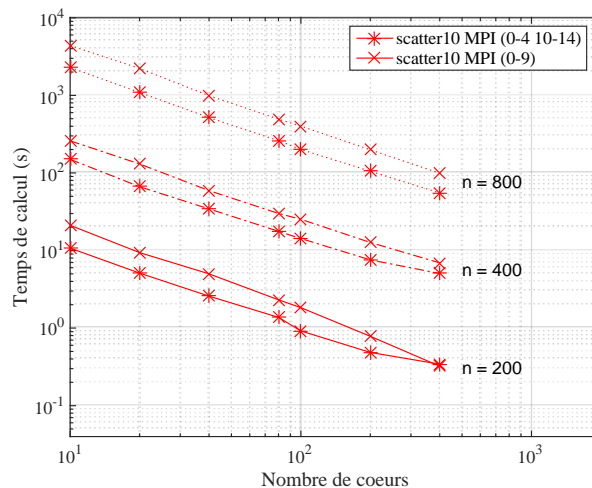


Figure 2-13: Temps de calcul avec deux modes de scatter10 différents pour $n = 200, 400$ et 800 . Le mode scatter10 équilibré (0-4 et 10-14) est représenté avec des étoiles. Le mode scatter10 non équilibré (0-9) est représenté par des croix.

Quel que soit le nombre n^3 de mailles, le temps de calcul le plus rapide est obtenu lorsque 10 processus MPI utilisent 10 cœurs physiques répartis équitablement les 2 processeurs. D'une façon assez générale, les durées de calcul sont environ 2 fois plus lentes lorsque 10 cœurs d'un seul processeur sur les deux disponibles sont chargés (mode scatter 10 (0-9) en comparaison de la répartition équilibrée du mode scatter10 (0-4, 10-14)). En effet, dans ce dernier cas, tous les cœurs MPI sont uniformément répartis entre les deux processeurs de chaque nœud. Par conséquent, les 25Mo de mémoire cache sont utilisés par 5 cœurs MPI ce qui fait 5Mo de cache disponible par cœur alors qu'en mode scatter10 (0-9) chaque cœur ne dispose que de 2,5Mo (25Mo / 10). De plus, les cœurs accèdent 2 fois plus vite à la mémoire RAM en mode scatter10 (0-4, 10-14) qu'en mode scatter10 (0-9). En effet, la BPM disponible

sur chaque processeur (45Go/s) est partagée par les cœurs utilisés. De ce fait, les cœurs en mode scatter10 (0-4, 10-14) ont une BPM de 9Go/s (45Go/s / 5 sur le premier processeur du nœud, idem pour le second) alors qu'en mode scatter10 (0-9) ils ne disposent que de 4,5Go/s (45Go/s / 10).

Des tendances similaires ont été observées avec d'autres modes de répartition jusqu'au mode scatter2. Par conséquent, dans les résultats suivants, tous les calculs sont effectués en mode compact ou en modes scatter10 et 2 avec une répartition équilibrée entre les deux processeurs de chaque nœud. Avec le mode scatter2, un seul cœur par processeur est sélectionné en tenant compte du fait que chaque nœud implique deux processeurs. On peut remarquer que pour un nombre fixé de cœurs MPI (500 par exemple), le mode scatter10 va utiliser 50 nœuds du calculateur EOS et le mode scatter2 250 c'est-à-dire 5 fois plus.

La Figure 2-14, la Figure 2-15 et la Figure 2-16 montrent les temps de calcul nécessaire aux trois méthodes pour résoudre l'équation de Laplace en fonction du mode scatter choisi et avec une tolérance $\xi = 10^{-6}$. Les résultats pour chaque mode de répartition des cœurs sont identifiés avec des symboles (symbole carré pour le mode compact, symbole étoile pour le mode scatter10 et symbole diamant pour le mode scatter2). De plus, ces résultats obtenus en fonction du nombre de mailles n sont représentés à l'aide de plusieurs types de ligne (ligne continue pour $n = 200$, ligne semi-pointillée pour $n = 400$ et ligne pointillée pour $n = 800$). Avec les deux méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB, et comme attendu, le temps de calcul diminue avec l'augmentation du nombre de cœurs quel que soit n . Pour un nombre important de cœurs, une saturation est observée avec $n = 200$ qui s'explique par le poids non négligeable des temps de communication. Avec la méthode directe MUMPS, certaines configurations de calcul ne peuvent être exécutées car la mémoire RAM disponible par cœurs n'est pas assez grande. Par exemple, sur la Figure 2-16, le mode compact ne peut être lancé qu'à partir de 400 cœurs et le mode scatter10 qu'à partir de 100 cœurs. Cette forte consommation mémoire de la méthode MUMPS est l'un de ses points faibles. Cette même tendance est observée avec BiCGSTAB avec $n = 800$ en mode compact et scatter10. Le calcul ne peut pas être exécuté avec un petit nombre de cœurs car la mémoire distribuée entre ces derniers n'est pas suffisante.

Avec une répartition équilibrée des cœurs sur les nœuds, pour un nombre donné de cœurs, la répartition en mode scatter2 est plus rapide quelle que soit la méthode utilisée. Ce gain en temps s'explique par l'impact de la mémoire RAM et de la BPM disponibles par cœur en fonction des différents modes de répartition. Par exemple, les temps de calcul pour 100 cœurs en mode compact et scatter2 sont respectivement égaux à 2s et 0,59s pour SOR R&B, 1,5s et 0,5s pour BiCGSTAB. En effet, pour un nœud, la mémoire RAM (64Go) et la BPM en mode équilibré ($45\text{Go/s} \times 2 = 90\text{Go/s}$) sont partagées entre les cœurs durant le calcul. Ainsi lorsque tous les cœurs sur un nœud sont utilisés, chacun dispose de 3,2Go de RAM (64Go / 20 cœurs) et de 4,5Go/s de BPM (90Go/s / 20 cœurs), en mode scatter10 équilibré chaque cœur dispose de 6,4Go de RAM (64Go / 10 cœurs) et de 9Go/s de BPM (90Go/s / 10 cœurs) et en mode

scatter2 équilibré de 32Go de RAM (64Go / 2 cœurs) et de 45Go/s de BPM (90Go/s / 2 cœurs).

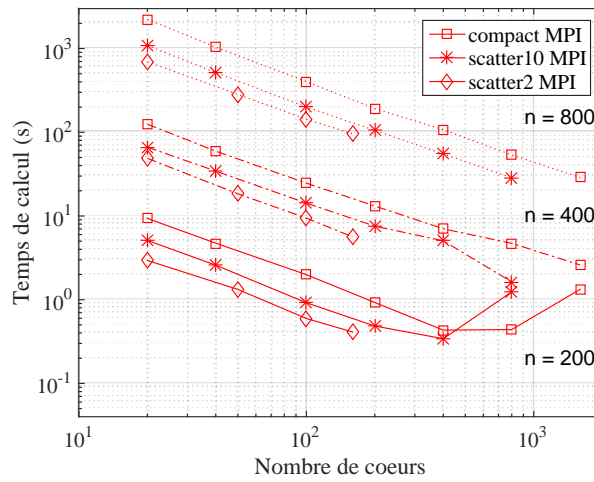


Figure 2-14: Temps de calcul avec SOR R&B pour résoudre l'équation de Laplace en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

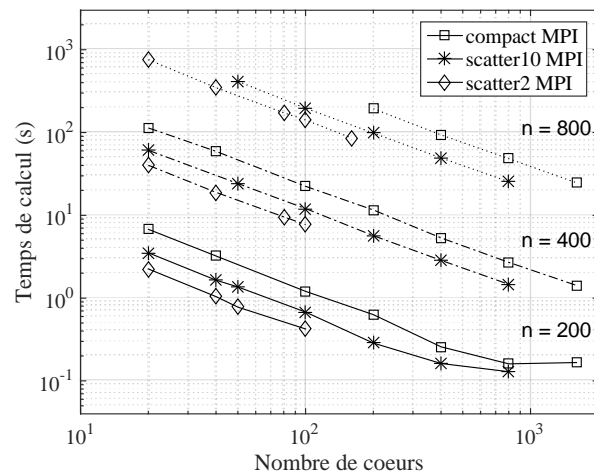


Figure 2-15: Temps de calcul avec BiCGSTAB pour résoudre l'équation de Laplace en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

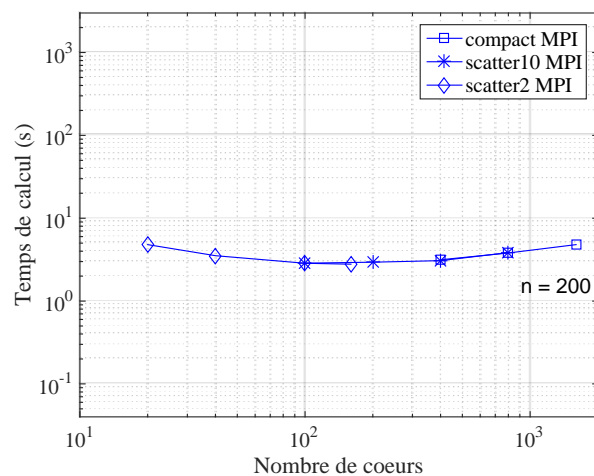


Figure 2-16: Temps de calcul avec MUMPS pour résoudre l'équation de Laplace en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

Outre l'effet de la mémoire RAM et de la BPM, il y a également l'effet de la mémoire cache. On rappelle que chacun des deux processeurs contenus sur le nœud possède 25Mo de mémoire cache chacun. De ce fait, en suivant le même raisonnement, un cœur en mode scatter2 disposera de la totalité de la mémoire cache du processeur auquel il est associé. La mémoire cache est un espace mémoire rapide servant à stocker temporairement des informations. Elle sert notamment de tampon entre le processeur et la mémoire RAM. Le processeur accède plus rapidement aux données contenues dans la mémoire cache ce qui procure une augmentation de la vitesse de traitement des informations. A titre de comparaison, la vitesse d'exécution de la mémoire cache est environ 10 fois plus rapide que celle de la mémoire RAM.

Dans une utilisation courante du super calculateur EOS, 80 nœuds peuvent être réservés sans contraintes particulières. Cela donne accès à un maximum de 1600 cœurs en mode compact, 800 en mode scatter10 et seulement 160 en mode scatter2. Pour obtenir 1600 cœurs en mode scatter2 il faudrait pouvoir bénéficier de 800 nœuds ce qui n'est pas possible. Ce dernier mode atteint donc très rapidement ses limites d'utilisation dans le cadre du calcul 3D.

Comme on pouvait s'y attendre, le temps de calcul requis pour converger augmente lorsque le nombre n^3 de mailles augmente. Par exemple avec 400 cœurs en mode compact, SOR R&B résout le calcul en 0,4s avec $n = 200$, 7s avec $n = 400$ et 107s avec $n=800$. BiCGSTAB met 0,26s avec $n = 200$, 5,3s avec $n = 400$ et 94s avec $n = 800$. La Figure 2-14 et la Figure 2-15 montrent que les tendances générales de BiCGSTAB et SOR R&B sont très similaires, mais BiCGSTAB converge légèrement plus rapidement. MUMPS est le solveur le plus lent et la mémoire disponible sur les nœuds ne permet pas d'exécuter des calculs avec $n = 400$ et 800.

Pour confronter la performance des méthodes, il est intéressant de tracer des courbes d'accélération ou autrement dit le « speed up ». Le speed up permet de rendre compte du gain de temps de calcul en fonction de l'augmentation du nombre de cœurs. En théorie, lorsqu'on augmente le nombre de cœur par un facteur X, un gain en temps de calcul de X devrait être observé. Toutefois, en pratique, les temps de communications ne permettent pas une accélération parfaite. La Figure 2-17, la Figure 2-18 et la Figure 2-19 montrent des courbes de speed up uniquement pour SOR R&B et BiCGSTAB avec un découpage en cube, pour plusieurs répartitions de cœurs et de points de discrétisation. La méthode directe MUMPS n'est pas compétitive face aux méthodes itératives et n'est donc pas présentée dans ces résultats. Ces figures comparent le gain en temps de calcul en fonction de l'accroissement du nombre de cœurs avec différents modes de répartition des cœurs sur les nœuds (mode compact sur la Figure 2-17, mode scatter10 sur la Figure 2-18 et mode scatter2 sur la Figure 2-19).

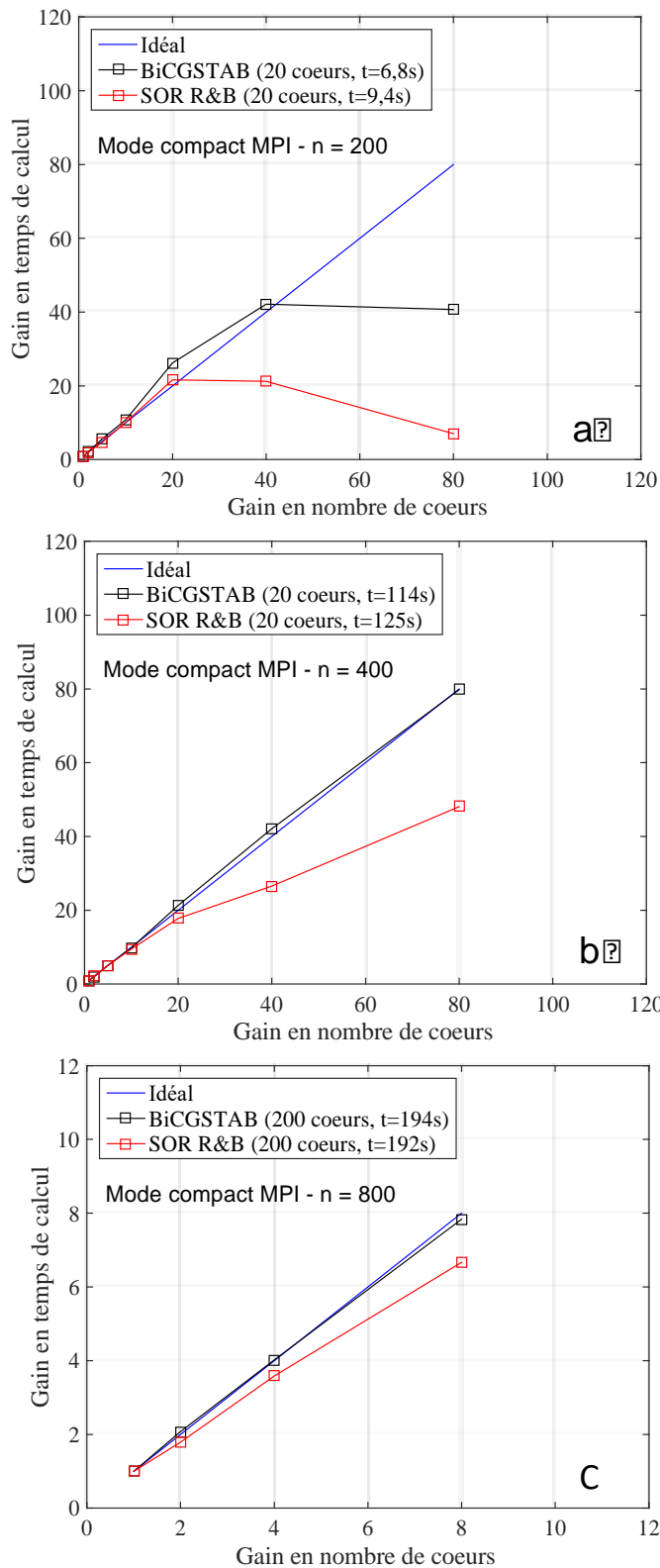


Figure 2-17: Mode compact. Gain de temps de calcul en fonction de l'accroissement du nombre de cœurs : a) $n = 200$, b) $n = 400$, c) $n = 800$. Les valeurs entre parenthèses sur la figure correspondent aux valeurs de référence associée à la première coordonnée (1,1) sur la courbe (voir le texte pour un complément d'explications).

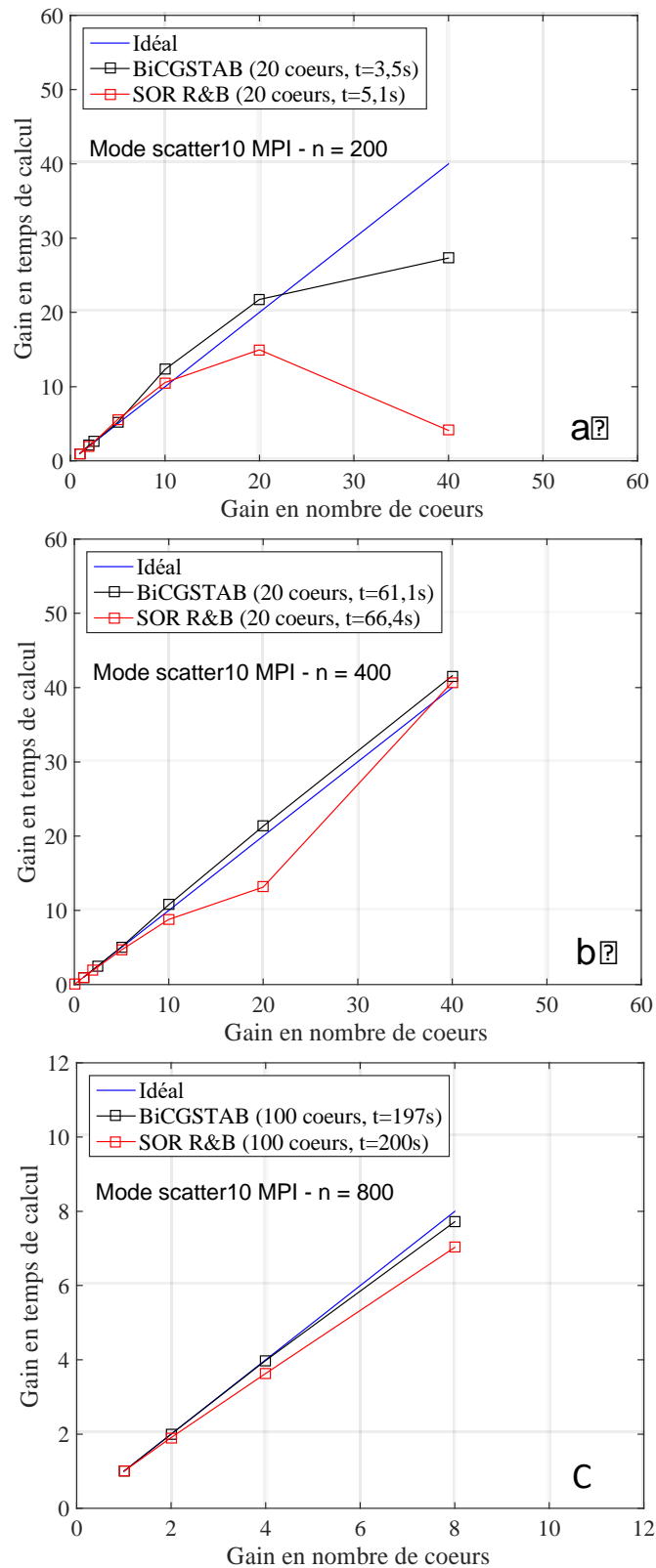


Figure 2-18: Mode scatter10. Gain de temps de calcul en fonction de l'accroissement du nombre de cœurs : a) $n = 200$, b) $n = 400$, c) $n = 800$. Les valeurs entre parenthèses sur la figure correspondent aux valeurs de référence associée à la première coordonnée (1,1) sur la courbe (voir le texte pour un complément d'explications).

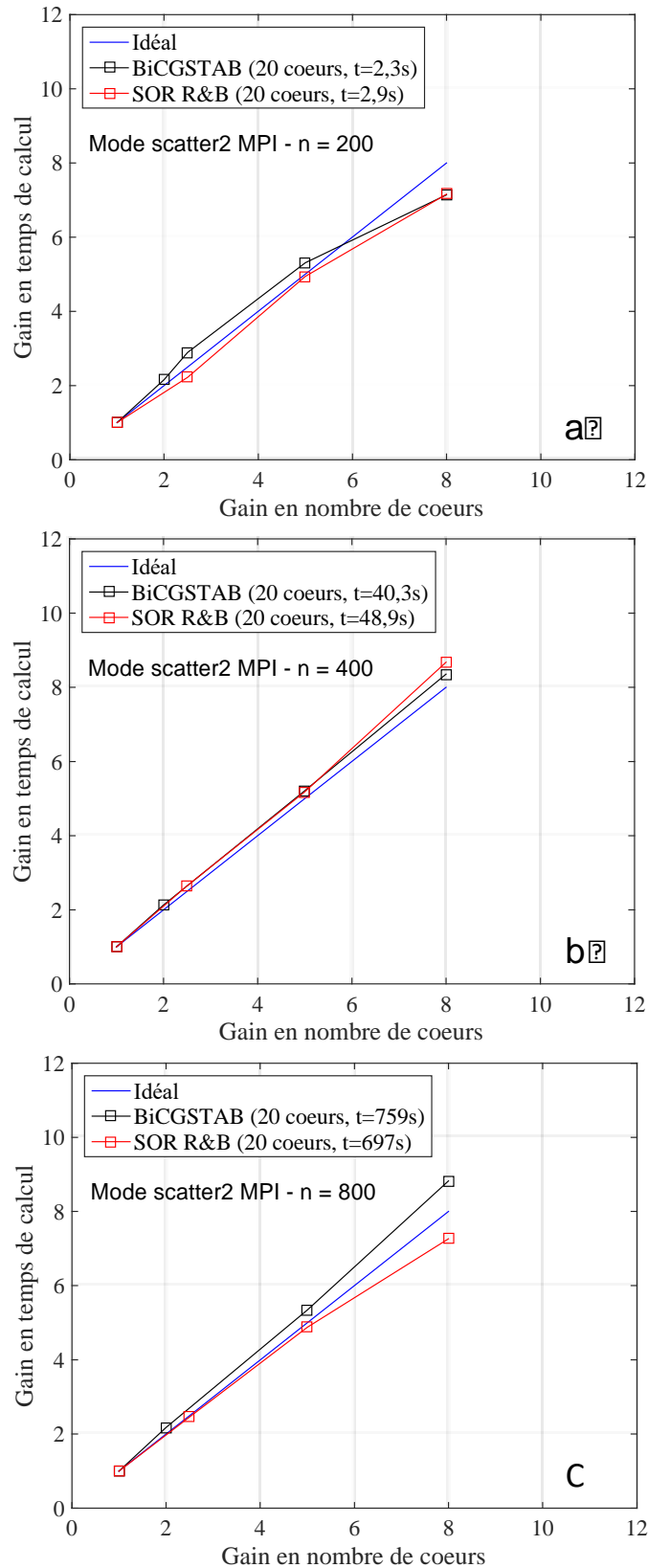


Figure 2-19: Mode scatter2. Gain de temps de calcul en fonction de l'accroissement du nombre de cœurs : a) $n = 200$, b) $n = 400$, c) $n = 800$. Les valeurs entre parenthèses sur la figure correspondent aux valeurs de référence associée à la première coordonnée (1,1) sur la courbe (voir le texte pour un complément d'explications).

Pour chaque figure, les références a, b, c correspondent respectivement à $n = 200$, 400 et 800. Le speed up théorique est représenté par la courbe bleue. Toutes les courbes de speed up sont tracées à partir d'un nombre minimum cœurs choisi comme nombre de référence auquel est associé un temps de référence. Les temps indiqués entre parenthèses dans la légende des figures correspondent à ce temps de référence pour le point de coordonnées (1,1). Par exemple, sur la Figure 16a, la durée de calcul avec 20 cœurs choisi comme nombre de référence est de 6,8s. Le point de coordonnées (1,1) correspond donc à 20 cœurs et 6,8s. De ce fait, lorsqu'on lance un calcul avec 100 cœurs, soit 5 fois plus que la référence de 20 cœurs, un gain de temps de calcul d'un facteur 5 devrait être observé dans un cas idéal. Pour $n = 200$ et $n = 400$, le nombre de cœurs de référence est 20. Il est de 100 ou 200 pour $n = 800$ en fonction des solveurs. En effet, BiCGSTAB avec $n = 800$ en mode compact et scatter10 ne peut pas être exécuté avec un nombre de cœurs trop petit car la mémoire distribuée entre ces derniers n'est pas suffisante. Les résultats sur la Figure 2-17a, la Figure 2-17b et la Figure 2-17c montrent le speed up en mode compact pour n variant de 200 à 800.

Pour $n = 200$, sur la Figure 2-17a, on constate une saturation du gain de temps lorsque le nombre de cœurs est multiplié par 40 pour BiCGSTAB et par 20 pour SOR R&B. En effet, pour un faible nombre de mailles ($n^3=8$ millions) réparties sur grand nombre de cœurs, le temps de résolution par sous-domaine devient rapidement petit par rapport au temps de communication. Sur la Figure 2-17b, avec un nombre de maille 8 fois plus grand ($n^3 = 64$ millions) ce phénomène est complètement atténué pour BiCGSTAB et partiellement pour SOR R&B. Ces tendances sont également observées avec le mode scatter10 sur la Figure 2-18a et b. De plus, pour un même nombre de mailles, lorsque l'on dépeuple les nœuds de calcul en passant d'un mode compact, à un mode scatter10 puis scatter2, on constate une amélioration du speed up (comparer par exemple les courbes sur la Figure 2-17a, la Figure 2-18a et la Figure 2-19a pour $n = 200$). Le mode scatter2 présente dans tous les cas le meilleur speed-up.

2.4.1.5 Etude de la précision des solutions numériques

La précision d'une solution numérique est obtenue grâce à l'erreur relative qui peut être calculée uniquement si la solution analytique est connue. Dans le cas d'une configuration plane d'électrodes la solution analytique V_a est donnée par l'équation (e 2-22). Si l'on obtient une solution numérique approchée notée \tilde{V} , l'erreur relative en chaque point du maillage est calculée suivant l'équation (e 2-24).

$Err_{relative} = \frac{1}{n} \sum_n \frac{ \tilde{V} - V_a }{ V_a }$	e 2-24
---	--------

La Figure 2-20 montre l'erreur relative le long de l'axe z en $x = y = 0,5\text{mm}$ (axe central du domaine de la Figure 2-2). Dans ce cas, la solution numérique approchée \tilde{V} correspond à un critère de convergence numérique ξ fixé à 10^{-6} (voir équation (e 2-10)). Les calculs ont été effectués avec 800 cœurs. Tout d'abord, on constate que la méthode directe MUMPS est la plus précise avec une erreur relative moyenne d'environ 10^{-12} (courbe bleue) lorsque $n = 200$. L'erreur relative des méthodes itératives BiCGSTAB et SOR R&B est représentée respectivement par les courbes noires et rouges. Les courbes en trait plein correspondent à $n = 200$, en semi pointillés à $n = 400$ et en pointillés à $n = 800$. Il apparaît clairement, que la méthode SOR R&B est plus précise que la méthode BiCGSTAB quel que soit n . On remarque également pour les deux méthodes itératives une erreur relative plus faible à $z = 0,5\text{mm}$ et à $z = 1\text{mm}$. Ces minimums s'expliquent par les conditions initiales et limites dans le domaine étudié. En effet, tous les points à l'intérieur de l'espace inter-électrode sont initialisés à la valeur moyenne des potentiels entre les deux électrodes soit 3000V . De ce fait, la valeur initialisée en $z = 0,5\text{mm}$ correspond à la valeur analytique exacte (voir l'équation (e 2-22)) avant la résolution numérique. Ce même phénomène est reproduit au niveau de l'anode où la valeur du potentiel est connue par les conditions aux limites. On n'observe pas ce phénomène au niveau de la cathode car la valeur numérique doit tendre vers une valeur analytique nulle.

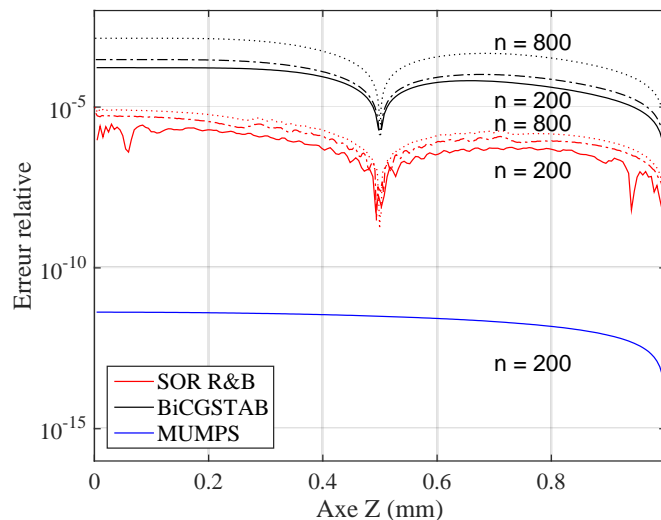


Figure 2-20: Erreur relative le long de l'axe z (pour $x = y = 0,5\text{mm}$) pour les trois méthodes en fonction de n .

2.4.1.6 Comparaison des processus de parallélisation

Les tests précédents utilisaient le procédé de parallélisation MPI. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre 1, il est possible de combiner les processus MPI et OpenMP. Ce mode hybride utilise MPI pour distribuer le domaine global en sous-domaine sur plusieurs cœurs et OpenMP (basé sur la mémoire partagée) pour réaliser sur plusieurs threads les parties du

programme référencées parallèle. Dans cette section sont repris les résultats obtenus en mode scatter2 MPI auquel on associe un déploiement de threads. Un nœud de calcul contient 20 cœurs, le mode scatter2 utilise 2/20^{ème} des cœurs disponibles sur chaque nœud réservé. Dans un but de rentabilité, on décide donc dans les résultats suivants, de déployer 10 threads OpenMP par cœur MPI. Les conditions de lancement du calcul en mode hybride se font avec 2 cœurs MPI \times 10 cœurs OpenMP par nœud. Par conséquent, le nœud est pleinement exploité. La Figure 2-21 et la Figure 2-22 montrent les temps de calcul (respectivement avec BiCGSTAB et MUMPS) en mode scatter2 et en mode hybride disponible par défaut dans les bibliothèques.

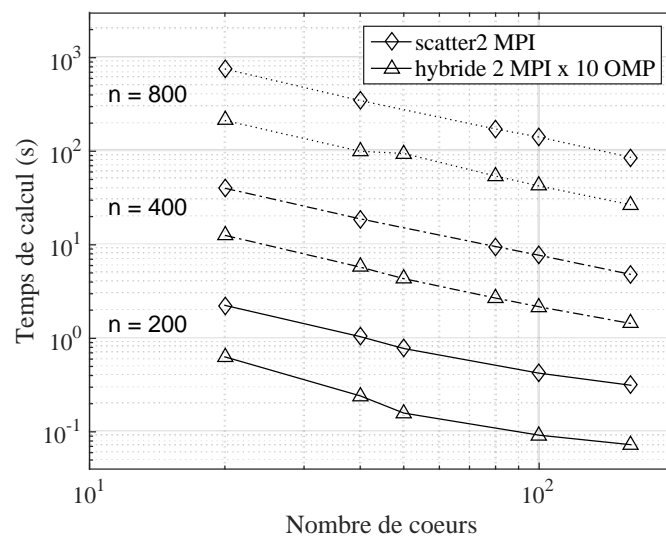


Figure 2-21: Temps de calcul avec BiCGSTAB en mode scatter2 MPI et en mode hybride (2 MPI \times 10 OMP) pour $n = 200, 400$ et 800 points

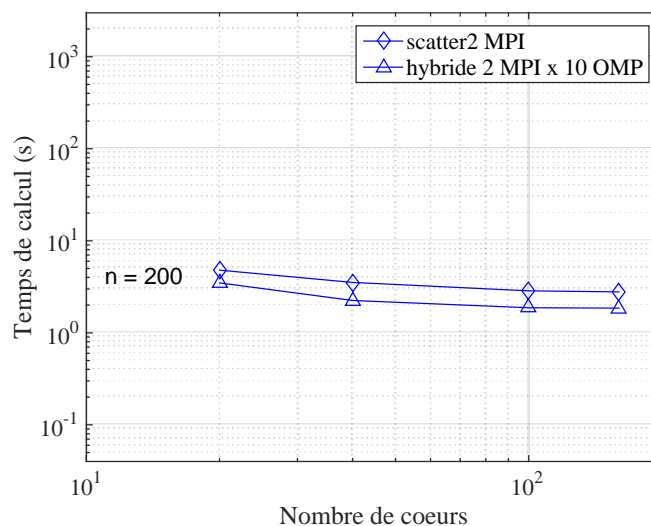


Figure 2-22: Temps de calcul avec MUMPS en mode scatter2 MPI et en mode hybride (2 MPI \times 10 OMP) pour $n = 200$ points

Le programme développé tout au long de cette thèse et implémentant SOR R&B est codé pour le moment uniquement en MPI. De ce fait, aucun résultat n'est présenté dans cette section avec la méthode SOR R&B. Sur la Figure 2-21, on observe un gain en temps de calcul en moyenne égal à 3,7 entre un calcul en mode MPI et hybride quelle que soit la configuration de discrétisation ($n = 200, 400$ et 800). Par exemple, sur la Figure 2-21 avec BiCGSTAB, en mode scatter2 MPI avec 20 cœurs et $n = 800$, le temps de calcul est égal à 758s alors que seulement 213s sont nécessaires en mode hybride ce qui correspond à un gain de 3,55 en termes de temps de calcul. MUMPS a également été testé en mode hybride. Les résultats sont présentés sur la Figure 2-22 et montrent que le gain de temps n'est pas aussi important que pour les méthodes itératives. Toutefois, ces résultats indiquent que le mode hybride est une bonne alternative pour réduire le temps de calcul et augmenter l'efficacité au sein d'un nœud.

2.4.2 Résolution de l'équation de Poisson en régime instationnaire

Dans cette section, nous poursuivons la comparaison des performances des trois méthodes précédentes (SOR R&B, BiCGSTAB et MUMPS) en résolvant l'équation de Poisson dans un cas test de référence 3D et instationnaire qui reproduit la physique de la propagation des streamers. L'idée est d'analyser le comportement des méthodes dans une situation proche du modèle complet de la décharge sans avoir toutefois à résoudre les équations de conservation.

2.4.2.1 Conditions de simulation

Le domaine cubique de 1mm^3 est celui de la Figure 2-2. Comme précédemment, il est divisé en n^3 mailles uniformes, n étant égal à 200, 400 ou 800. Des conditions aux limites de Dirichlet sont appliquées sur les électrodes planes inférieure et supérieure (0kV et 6kV respectivement) alors que les conditions aux limites de Neumann sont appliquées sur les autres surfaces latérales (c'est-à-dire que la dérivée du potentiel est fixée à zéro sur la direction perpendiculaire à chaque surface latérale). Dans l'espace inter-électrode, une densité de charge d'espace spécifique se propage verticalement du haut vers le bas. La forme et la vitesse de la charge d'espace sont choisies afin de reproduire le comportement typique d'une charge d'espace transportée par la tête du streamer dans une décharge couronne mono-filamentaire à la pression atmosphérique [38]. La Figure 2-23 montre le domaine géométrique cubique et la forme de la charge d'espace positive choisie à l'instant $t = 0\text{s}$. Son profil suit une forme gaussienne avec une largeur à mi-hauteur δ égale à $50\mu\text{m}$ et est délimité par un hémisphère de rayon $R = 100\mu\text{m}$. Son profil est donné par les équations suivantes:

<p>lorsque</p> $\rho(x, y, z, t) = G e^{-\left(\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0(t))^2}{\delta^2}\right)}$ <p>et</p> $(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - (z_0(t) + R))^2 \leq R^2$ <p>avec $G = 8 \text{ C.m}^{-3}$</p> <p>$\rho(x, y, z, t) = 0$ ailleurs</p>	e 2-25
---	--------

$z_0(t)$ est la position du maximum de la gaussienne le long de l'axe vertical de symétrie défini par $x_0 = y_0 = 0,5\text{mm}$. La coordonnée $z_0(t)$ traverse l'intervalle inter-électrode de $z = 0,8\text{mm}$ à $z = 0,2\text{mm}$ à une vitesse v_{str} égale à 10^6 m.s^{-1} caractéristique de la vitesse d'un streamer.

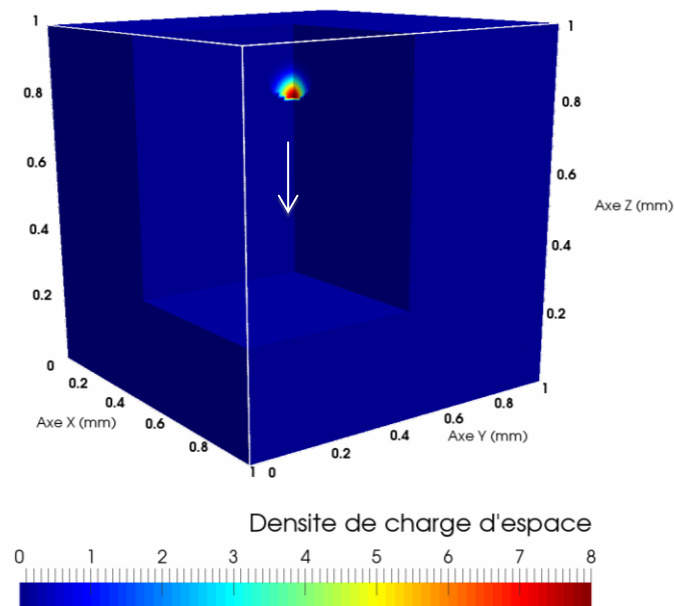


Figure 2-23: Profil 3D de la densité de charge d'espace exprimée en C.m^{-3} . La flèche blanche indique la direction de propagation le long de l'axe vertical de symétrie

Pour les solveurs itératifs (BiCGSTAB et SOR R&B), le potentiel initial est uniforme et fixé à 3kV. Lors de la propagation de la charge d'espace, la solution convergée du potentiel à l'instant t est utilisée pour initialiser les itérations de convergence vers la solution du potentiel à l'instant suivant $t + \Delta t$. L'intervalle de temps d'évolution Δt est calculé en utilisant la condition classique de CFL [57]:

$\Delta t = 0.1 \times \frac{d/n}{v_{str}}$	e 2-26
---	--------

d est la distance inter-électrodes, v_{str} la vitesse de la charge d'espace et n le nombre de mailles le long de l'axe z .

Enfin, les calculs utilisent le processus de parallélisation MPI avec le domaine global distribué en cube sur les cœurs de calcul. Les cœurs sont répartis sur les nœuds en mode compact, scatter10 et scatter2.

2.4.2.2 Solution à $t = 0s$

Pour mieux comprendre l'influence de la charge d'espace sur les solutions du potentiel et du champ électrique, les courbes noires de la Figure 2-24 et de la Figure 2-25 montrent le potentiel et le champ électrique réduit (c'est-à-dire le rapport $\frac{E}{n_g}$, où E est la norme du champ électrique et n_g la densité du gaz à la pression atmosphérique) le long de l'axe vertical de symétrie entre $z = 0,5$ à 1mm au temps $t = 0s$. Dans les deux figures, les flèches indiquent la direction de propagation de la densité de charge d'espace selon l'axe z . Les solutions sont données pour $n = 200$ et sont identiques, quelles que soient les méthodes utilisées (SOR R&B, BiCGSTAB ou MUMPS). A titre de comparaison, la solution de l'équation de Laplace montrant la variation linéaire du potentiel et constante du champ électrique sont également tracés. On peut constater que le profil du champ électrique et son amplitude sont typiques de ceux rencontrés lors de la propagation d'un streamer [58]. Le potentiel à $t = 0s$ obtenu à partir de la solution de l'équation de Poisson le long de l'axe z montre clairement l'influence de la densité de charge d'espace positive initiale. Une petite bosse apparaît autour de $z = 0,8\text{mm}$ où la densité maximale de charge d'espace est initialement positionnée ($z_0(t = 0) = 0,8\text{mm}$ comme on peut le voir sur la Figure 2-23).

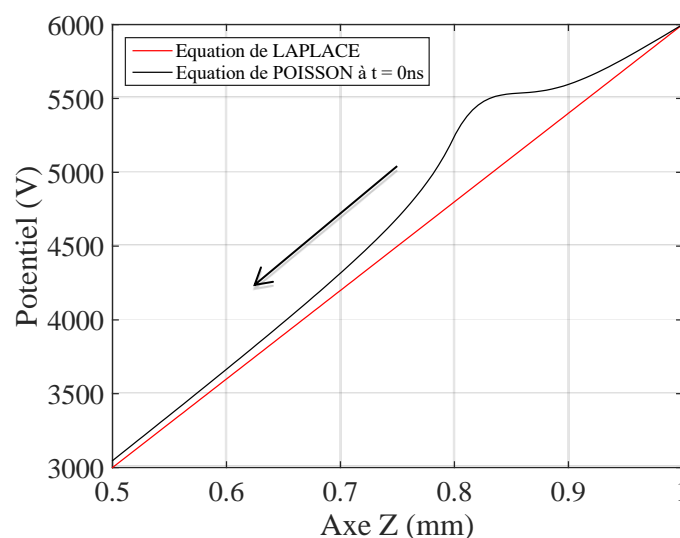


Figure 2-24: Potentiel initial le long de l'axe de symétrie vertical

Pour comparer les résultats 3D, on peut se rappeler que le potentiel géométrique (obtenu sans la présence de la charge d'espace) présente des surfaces équipotentielles planes parallèles aux électrodes tandis que le vecteur de champ électrique est uniforme et dirigé vers le bas.

La solution du potentiel électrique avec la présence de la charge d'espace initiale est représentée en 3D sur la Figure 2-26 et montre que les surfaces équipotentielles près du maximum de la densité de charge d'espace sont déformées. Lors de la propagation de la charge d'espace, la déformation du potentiel se déplace de proche en proche conduisant au déplacement du champ électrique à la même vitesse que la charge d'espace.

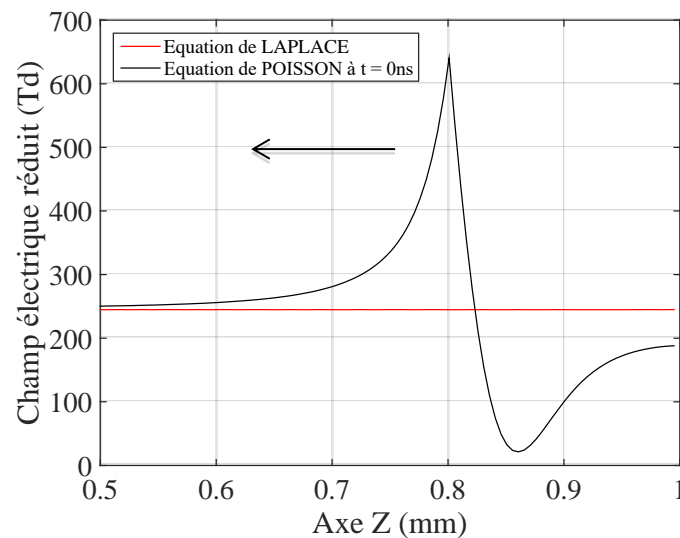


Figure 2-25: Champ réduit initial le long de l'axe de symétrie vertical

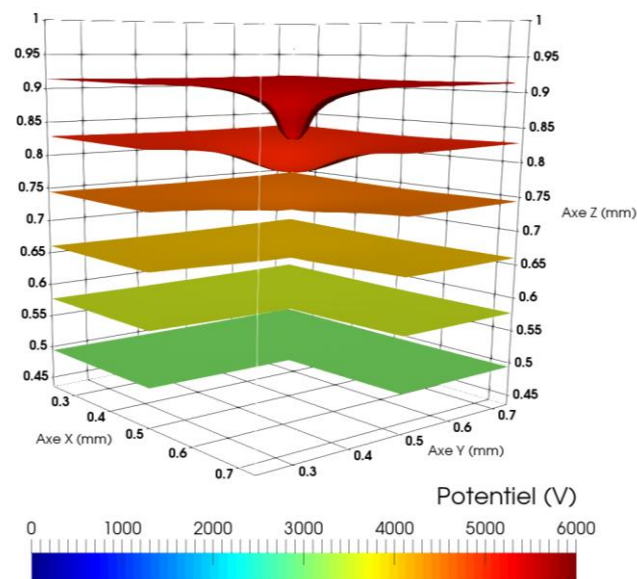


Figure 2-26: Potentiel électrique en 3D à $t = 0\text{ns}$ obtenu lorsque la densité de charge d'espace montrée sur la Figure 2-23 est introduite dans l'espace inter-électrode

2.4.2.3 Comparaison des performances des trois méthodes

Le but de cette section est de comparer l'efficacité des trois méthodes retenues (SOR R&B, BiCGTAB et MUMPS) à résoudre l'équation de Poisson dans le cadre des conditions de simulation décrites précédemment. L'efficacité est évaluée en comparant la durée moyenne de calcul nécessaire aux méthodes pour obtenir la solution du potentiel à 10^{-6} près (au sens de l'équation (e 2-10)) à un instant donné. Pour ce faire, la durée de calcul consommée pour déplacer la densité de charge d'espace de $z = 0,8\text{mm}$ à $z = 0,2\text{mm}$ (la solution du potentiel $V(t)$ étant calculée à chaque pas de temps) est simplement divisée par le nombre de pas de temps Δt nécessaire pour effectuer ce déplacement. La valeur obtenue est donc la durée moyenne de calcul consommée pour trouver la solution $V(t)$ (à 10^{-6} près) de l'équation de Poisson à chaque pas de temps de propagation de la charge d'espace. Pour plus de commodité, nous appellerons cette durée moyenne "le temps de calcul". Les valeurs obtenues du temps de calcul sont reportées sur l'axe des ordonnées de la Figure 2-27 à la Figure 2-29, tandis que l'axe des abscisses donne le nombre de cœurs utilisés pour effectuer le calcul en mode MPI. Il convient de noter que le temps de calcul n'intègre pas les temps de prétraitement, c'est-à-dire les temps nécessaires à la détermination du rayon spectral optimal pour l'algorithme SOR R&B, le pré-conditionnement de la matrice BiCGSTAB ou la pré-composition et la décomposition LU initiale réalisée par la méthode MUMPS. Il convient également de souligner que, comme dans le cas instationnaire, le temps de calcul comprend à la fois la durée de calcul consommée par chaque cœur pour réaliser les tâches qui leur sont affectées et les durées de communication nécessaires pour échanger les données entre cœurs avec la procédure MPI.

Les tests suivants ont été effectués pour trois nombres différents de mailles (c'est-à-dire 200^3 , 400^3 et 800^3) et pour trois modes de répartition des cœurs sur les nœuds (c'est-à-dire le mode compact et les modes scatter10 et 2, comme décrit précédemment). Sur la Figure 2-27, la Figure 2-28 et la Figure 2-29 les résultats obtenus pour chaque mode de répartition des cœurs sont identifiés avec des symboles (symbole carré pour le mode compact, symbole étoile pour le mode scatter10 et symbole diamant pour le mode scatter2).

Comme pour la résolution de l'équation de Laplace, les résultats obtenus à partir de la méthode MUMPS ne sont représentés que pour le plus petit nombre de mailles soit 200^3 sur la Figure 2-29. Cette limitation provient de la mémoire importante requise par la méthode MUMPS pour effectuer la décomposition LU . Même avec $n = 200$, cette limitation est présente. En effet, les modes de répartition des cœurs sur les nœuds (compact, scatter10 et 2) ne peuvent être utilisés qu'en fonction du nombre de cœurs choisis pour le calcul. Par exemple, avec $n = 200$ et l'utilisation de 200 cœurs, MUMPS a besoin de 630Go pour effectuer la décomposition LU , c'est-à-dire 3,15Go par cœurs. En mode compact (c'est-à-dire en utilisant les 20 cœurs disponibles sur chaque nœud), la consommation de mémoire pour chaque nœud est de 63Go ($20 \times 3,15\text{Go}$).

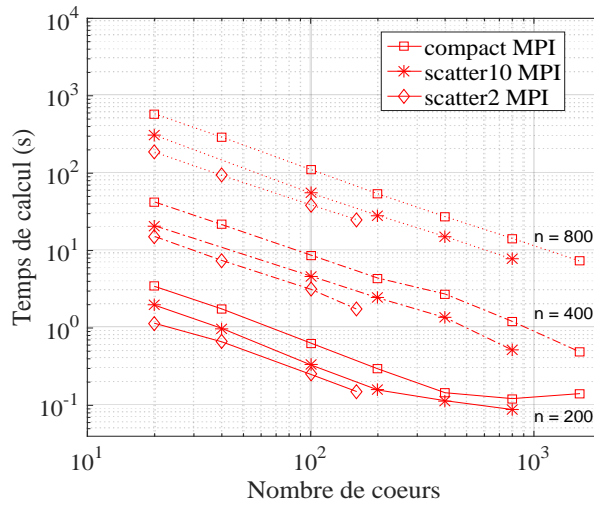


Figure 2-27: Temps de calcul avec SOR R&B pour résoudre l'équation de Poisson en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

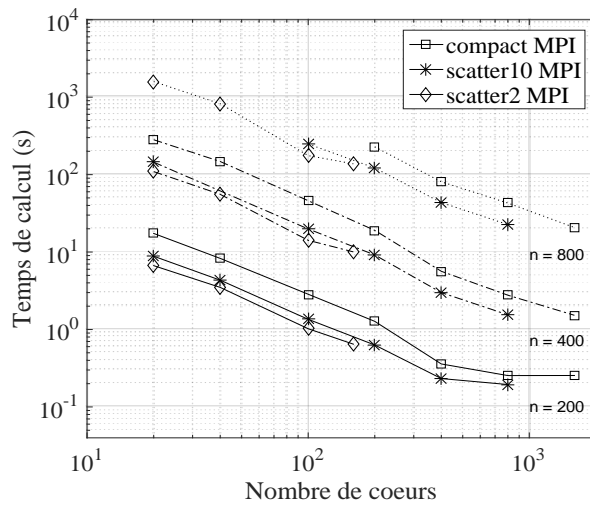


Figure 2-28: Temps de calcul avec BiCGSTAB pour résoudre l'équation de Poisson en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

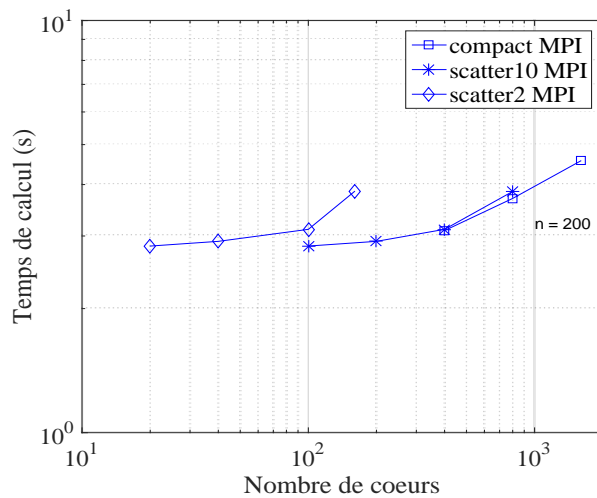


Figure 2-29: Temps de calcul avec MUMPS pour résoudre l'équation de Poisson en mode compact, scatter10, scatter2 avec $n = 200, 400$ et 800

Compte tenu du fait que les 20 cœurs de chaque nœud partagent 64Go, le calcul échoue parce que la mémoire requise pour la décomposition LU ajoutée à la mémoire requise pour la gestion des nœuds dépasse les 64Go disponibles. Cela explique pourquoi aucun résultat n'est affiché pour 200 cœurs en mode compact sur la Figure 2-29. Cependant, en augmentant le nombre de cœurs jusqu'à 400 par exemple, MUMPS requiert 874Go pour effectuer la décomposition LU . En mode compact, les 400 cœurs sont positionnés sur 20 nœuds disposant de 64Go de mémoire chacun soit un total de 1280Go. Ce calcul peut donc s'exécuter. Plus généralement, la mémoire RAM disponible par cœurs augmente lorsque le nombre de cœurs utilisés par nœud diminue. Les résultats obtenus avec la méthode MUMPS montrent que la capacité de mémoire nécessaire pour réaliser un calcul est un critère important pour estimer la performance et l'efficacité d'une méthode dans une condition de simulation donnée. La même limitation est observée avec la méthode BiCGSTAB avec les modes compact et scatter10 pour $n = 800$. Par exemple, en mode compact, aucun calcul ne peut être effectué avec moins de 200 cœurs. Cela signifie que la mémoire disponible par cœur est trop faible pour démarrer le calcul. Le nombre minimum de cœurs avec lequel le calcul s'effectue diminue à 100 avec le mode scatter10. En effet, la mémoire disponible par cœur a doublé par rapport au mode compact (6,4Go par cœur en mode scatter10 au lieu de 3,2Go par cœur en mode compact).

Un autre critère pour confronter la performance des méthodes, concerne leur capacité à réduire le temps de calcul global lorsque le nombre de cœurs augmente. En effet, comme nous l'avons déjà vu avec la procédure MPI, la diminution attendue du temps de calcul avec l'augmentation du nombre de cœurs peut être compensée par l'augmentation du temps de communication résultant de l'échange de données partagées entre chaque cœur. Ainsi, il peut paraître surprenant d'observer sur la Figure 2-29 que, dans le cas de la méthode MUMPS, le temps de calcul augmente avec le nombre de cœurs indépendamment des modes de répartition des cœurs sur les nœuds. Cela signifie que le temps de communication domine même avec le plus petit nombre de mailles de discrétisation ($n = 200^3$). Cette spécificité est observée avec l'algorithme MUMPS car les équations (e 2-20) et (e 2-21) indiquent que l'élimination descendante et la substitution ascendante utilisent tous les coefficients des matrices inférieure (L) et supérieure (U). Ces coefficients étant répartis sur plusieurs cœurs, les processus sont en permanence en communication pour échanger leurs données.

Pour les deux méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB, la Figure 2-27 et la Figure 2-28 montrent que, indépendamment des modes de répartition et du nombre de mailles, le temps de calcul diminue lorsque le nombre de cœurs augmente. Cependant, une saturation est également observée pour $n = 200$ lorsque plus de 400 cœurs sont utilisés. Ce phénomène de saturation dû aux communications est identique à celui observé lors de la résolution de l'équation de Laplace.

Quantitativement, lorsque le domaine cubique est discrétisé avec 200^3 mailles et lorsque 20 cœurs sont utilisés en mode compact, la méthode SOR R&B nécessite 3,4s pour résoudre l'équation de Poisson à chaque pas de temps d'évolution de la charge d'espace (voir Figure

2-27). Avec 200 cœurs, ce temps est réduit à 0,3s, c'est-à-dire un gain de 11,3 sur le temps de calcul. En résumé, en augmentant d'un facteur 10 le nombre de cœurs, le temps de calcul est diminué du même facteur. Doubler le nombre de cœurs de 200 à 400 réduira également le temps de calcul de moitié (0,146s au lieu de 0,3s). Cependant, à partir de 400 cœurs et en doublant leur nombre successivement jusqu'à 1600, on observe d'abord une diminution du temps de calcul d'un facteur 1,2 (on passe de 0,146s à 0,12s) suivie d'une augmentation (on passe de 0,12s à 0,1242s). Comme cela a déjà été souligné, cela signifie que les temps de communication ne peuvent plus être négligés. La même tendance est observée avec la méthode BiCGSTAB et $n^3 = 200^3$.

Les Figure 2-27 et Figure 2-28 montrent également que pour un nombre fixe de cœurs, le calcul effectué avec le mode scatter2 est toujours plus rapide que le mode scatter10 ou compact comme cela a été déjà observé pour la résolution de l'équation de Laplace. Par exemple, avec $n^3 = 200^3$ et 40 cœurs, la méthode SOR R&B a besoin de 1,76s pour converger en mode compact, 1s en mode scatter10 et 0,7s en mode scatter2, ce qui signifie une accélération totale d'un facteur de plus de 2,5. Le même ordre de grandeur est observé pour presque toutes les configurations testées indépendamment du nombre de mailles et de cœurs. On retrouve ici l'effet de la mémoire disponible par cœur discuté précédemment lors de la résolution de l'équation de Laplace. Pour rappel, chaque cœur peut utiliser 3,2Go en mode compact (ce qui correspond aux 64Go disponibles sur un nœud divisé entre les 20 cœurs de travail), 6,4Go en mode scatter10 et 32Go en mode scatter2, c'est-à-dire dix fois plus qu'en mode compact. Néanmoins, le mode scatter2 ne permet pas d'utiliser toute la capacité des nœuds du supercalculateur EOS. En effet, les utilisateurs peuvent réserver 80 nœuds simultanément par exécution sur EOS. Par conséquent, dans le mode scatter2, seuls 160 cœurs peuvent travailler ensemble. Cette limitation apparaît clairement sur les Figure 2-27 et Figure 2-28 où les derniers points du mode scatter2 sont affichés pour 160 cœurs quel que soit n . À partir de cette limitation, la diminution du temps de calcul ne peut être obtenue qu'en augmentant le nombre de cœurs utilisés par nœud. Dans le mode scatter10, le nombre total de cœurs disponibles augmente jusqu'à 800 et 1600 en mode compact. Cependant, comme on le voit sur la Figure 2-27 et la Figure 2-28, les temps de calcul pour 800 cœurs (c'est-à-dire 80 nœuds en mode scatter10) sont du même ordre de grandeur que ceux obtenus avec 1600 cœurs (c'est-à-dire 80 nœuds en mode compact) indépendamment des deux méthodes itératives et pour n égal à 400 ou 800. Avec $n^3 = 200^3$, le temps de calcul avec 1600 cœurs peut être plus lent qu'avec 800 cœurs (voir Figure 2-27).

Pour synthétiser les résultats, la Figure 2-30a, Figure 2-30b et Figure 2-30c comparent les temps de calcul entre SOR R&B et BiCGSTAB en fonction du nombre de mailles, du nombre de cœurs et des modes compact, scatter10 et scatter2. MUMPS n'est pas représenté car la méthode n'est pas compétitive. Il est clairement démontré que la méthode SOR R&B est plus rapide que BiCGSTAB dans toutes les configurations testées.

De façon à avoir une information plus quantitative, la Table 2-9 compare les écarts relatifs moyens du temps de calcul. Comme cela vient d'être vu sur la Figure 2-30, la méthode SOR R&B est toujours plus rapide que les deux autres méthodes testées (BiCGSTAB et MUMPS). De ce fait, quel que soit le jeu de paramètres, son temps de calcul est pris comme référence. Pour un couple fixé de paramètres (nombre de mailles et mode de répartition), la valeur affichée est un écart relatif moyen obtenu en faisant la moyenne des écarts relatifs calculés pour chaque nombre de cœurs. Ainsi, en mode compact et pour $n^3 = 200^3$, la méthode BiCSTAB est en moyenne 3,4 fois plus lente que la méthode SOR R&B quel que soit le nombre de cœurs de calcul utilisé. Dans nos conditions de simulation et de tests, la méthode BiCGSTAB est toujours au moins 3,2 fois plus lente que la méthode SOR R&B. La méthode MUMPS est au maximum 25 fois plus lente que SOR R&B dans les situations où le calcul peut être lancé.

n^3	Mode compact			Mode scatter 10			Mode scatter 2		
	200^3	400^3	800^3	200^3	400^3	800^3	200^3	400^3	800^3
SOR R&B	1	1	1	1	1	1	1	1	1
BiCGSTAB	3,40	4,20	3,24	3,52	4,01	3,64	4,86	6,20	7,26
MUMPS	25,74	/	/	2,37	/	/	9,91	/	/

Table 2-9 : Rapport moyen entre les temps de calcul lorsque la méthode SOR R&B est choisi comme référence

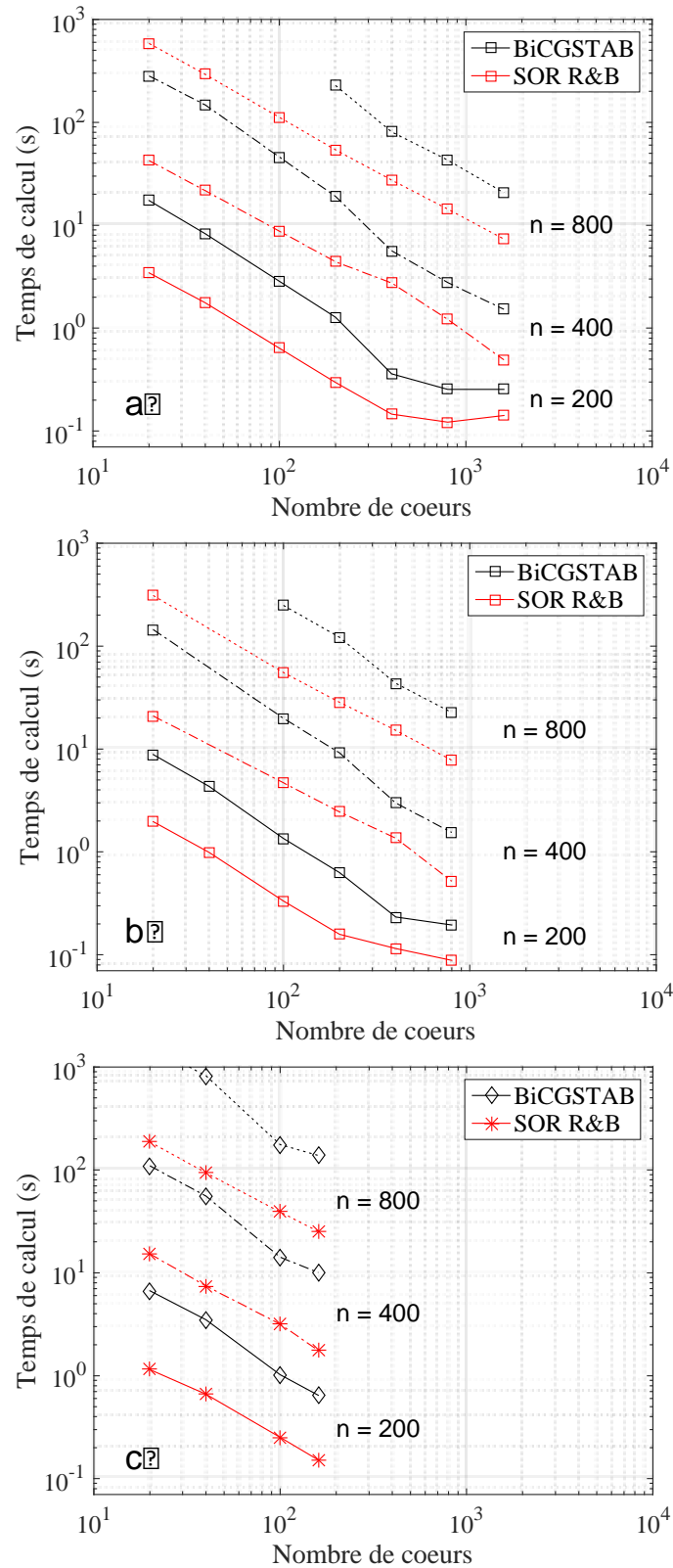


Figure 2-30: Comparaison des deux méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB pour $n = 200, 400$ et 800 , en mode compact (a), scatter10 (b) et scatter2 (c)

2.5 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à la comparaison de l'efficacité de trois méthodes numériques, deux méthodes itératives (SOR R&B et BiCGSTAB) et une méthode directe (MUMPS) pour résoudre l'équation de Poisson dans des tests de référence 3D stationnaire et instationnaire. Ce dernier reproduit la propagation et la forme typique d'une charge d'espace transportée par un streamer mono-filamentaire. L'équation de Poisson a été discrétisée à l'aide de la méthode des volumes finis et les calculs ont été effectués sur le super ordinateur EOS en mode parallèle à l'aide de la bibliothèque MPI. Dans nos conditions de simulation, avec un nombre de cœurs variant de 200 à 1600 et un nombre de points de discrétisation allant de 200^3 à 800^3 , la méthode SOR R&B reste plus rapide que les méthodes BiCGSTAB et MUMPS. Cependant, afin d'avoir des temps de calcul convenables avec la méthode SOR R&B un calcul préalable de la valeur optimale du rayon spectral est nécessaire. La méthode MUMPS est limitée en raison de sa consommation de mémoire et des temps de communication qui dominent rapidement le temps de calcul total. Les deux méthodes itératives SOR R&B et BiCGSTAB ont un comportement assez similaire. Dans tous les tests instationnaires effectués, la méthode SOR R&B est environ quatre fois plus rapide que BiCGSTAB et consomme moins de mémoire. On peut également noter que le mode hybride pré-implanté dans BiCGSTAB a permis un gain de temps de calcul de l'ordre d'un facteur 4 par rapport à son utilisation en mode MPI uniquement. La version de SOR R&B, développée dans le cadre de cette thèse, n'utilise pour le moment que le mode MPI. L'ensemble du code étant développé en mode MPI, nous choisirons dans la suite de ce travail d'exploiter les performances de la méthode SOR R&B.

Chapitre 3 Traitement 3D des équations de transport et validation du code de simulation

3.1 Introduction

Le chapitre précédent nous a permis de choisir deux méthodes itératives performantes pour résoudre les équations elliptiques du modèle fluide d'ordre 1 de la décharge. Ces équations regroupent l'équation de Poisson (qui a été utilisée pour tester les performances des solveurs) et en fonction des hypothèses choisies, les équations simplifiées du transport radiatif (pour la prise en compte de la photo-ionisation).

Le modèle physique complet de la décharge tel que décrit dans le Chapitre 1 couple l'équation de Poisson avec les équations de transport des espèces chargées dans l'approximation de dérive-diffusion. Ces équations de transport font parties de la famille des équations hyperboliques. Leur résolution demande également l'utilisation d'une méthode numérique performante et robuste car les streamers propagent de très forts gradients de densité qu'il convient de transporter sans introduire d'oscillations parasites ou de diffusion numérique.

Dans ce cadre, la première section de ce chapitre décrit la méthode numérique choisie de correction de flux MUSCL (pour Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws) et la seconde section teste ses performances dans plusieurs conditions 3D de simulation dont la solution analytique est connue.

La troisième section est consacrée à la validation du code 3D parallèle de résolution du modèle complet de la décharge. La validation est effectuée en comparant les solutions de deux simulations d'un streamer mono-filamentaire se propageant selon l'axe de symétrie d'une configuration d'électrode pointe-plan. La première simulation résout le modèle dans une configuration 2D cylindrique (à l'aide d'un code 2D développé dans le cadre de la thèse d'Olivier Ducasse) et la seconde utilise le code 3D développé dans le cadre de cette thèse.

3.2 Traitement du transport des forts gradients de densité

3.2.1 Problématique

Chaque équation de conservation de la densité (voir l'équation (e 1-5) du Chapitre 1) est discrétisée selon la méthode des volumes finis. Pour conserver la cohérence physique des équations du modèle, la méthode de discrétisation est totalement identique à celle décrite dans le Chapitre 2 appliquée cette fois aux opérateurs divergents ($div n_{esp} \vec{v}_{esp}$) des équations de conservation. Après discrétisation, la densité moyenne $\bar{n}_{i,j,k}^{t_1}$ au point i, j, k à l'instant $t_1 = t_0 + \Delta t$ est donnée par l'équation (e 3-1).

$\begin{aligned} \bar{n}_{i,j,k}^{t_1} = & \bar{n}_{i,j,k}^{t_0} + (nv_x)_{i-\frac{1}{2},j,k}^{t_0} \frac{S_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\tau} \Delta t - (nv_x)_{i+\frac{1}{2},j,k}^{t_0} \frac{S_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\tau} \Delta t \\ & + (nv_y)_{i,j-\frac{1}{2},k}^{t_0} \frac{S_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\tau} \Delta t - (nv_y)_{i,j+\frac{1}{2},k}^{t_0} \frac{S_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\tau} \Delta t \\ & + (nv_z)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{t_0} \frac{S_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\tau} \Delta t - (nv_z)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{t_0} \frac{S_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\tau} \Delta t + \bar{S}_{i,j,k}^{t_0} \Delta t \end{aligned}$	e 3-1
--	-------

L'équation obtenue est dite explicite car elle permet de calculer $\bar{n}_{i,j,k}^{t_1}$ uniquement à l'aide des grandeurs connues à l'instant précédent t_0^1 . Ces dernières sont supposées constantes durant l'intervalle de temps Δt . Ainsi, les flux d'échanges (nv_x , nv_y et nv_z) entre volumes contigus sont exprimés aux frontières de chaque volume en fonction des densités et des vitesses à l'instant t_0 . Par exemple dans la direction x , on posera $(nv_x)_{i\pm\frac{1}{2},j,k}^{t_0} = n_{i\pm\frac{1}{2},j,k}^{t_0} v_x^{t_0}$. Les vitesses v_x aux frontières $i \pm \frac{1}{2}$ sont calculées en fonction du champ réduit par l'approximation de dérive diffusion. Cette démarche est effectuée pour les deux autres directions. La difficulté ici réside dans l'estimation des densités aux frontières $n_{i\pm\frac{1}{2},j,k}$, $n_{i,j\pm\frac{1}{2},k}$, $n_{i,j,k\pm\frac{1}{2}}$. En effet, l'équation (e 3-1) ne donne que la valeur moyenne de la densité dans une maille élémentaire centrée sur le point i, j, k . Le calcul du flux quant à lui utilise la densité locale aux bords de la maille. Il faut donc trouver une approximation qui lie la densité locale aux densités moyennes. Une première approximation consiste à simplement faire une moyenne centrée décrite par l'équation (e 3-2).

$n_{i+\frac{1}{2}}^{t_0} = \frac{\bar{n}_{i+1}^{t_0} + \bar{n}_i^{t_0}}{2}$	e 3-2
---	-------

Cependant, les résultats obtenus avec ce schéma sont très dispersifs (présence de fortes oscillations dans la solution), non conservatifs (la quantité totale d'espèce fluctue au cours du temps) et n'assurent pas la positivité de la solution (des valeurs négatives de densité sont possibles).

Une seconde approximation consiste à supposer que la distribution de la densité dans chaque cellule est constante (comme illustré sur la Figure 3-1 selon l'axe x). Cela introduit une discontinuité de densité aux frontières de chaque cellule.

¹ S'orienter vers un schéma totalement implicite en calculant les flux avec les densités à l'instant $t + \Delta t$ ne serait pas judicieux. En effet, ce type de schéma revient à résoudre un système matriciel dont les inconnues sont les valeurs $\bar{n}_{i,j,k}$ à l'instant $t + \Delta t$. Il faudrait donc utiliser des méthodes de résolution matricielle (comme celles étudiées pour résoudre les équations elliptiques) qui prennent beaucoup de temps, notamment en 3D et lorsque les dynamiques d'évolutions sont très fortes ce qui est le cas des streamers.

Le choix de la densité à chaque frontière se fait en tenant compte du sens de déplacement des espèces selon la méthode UPWIND (dans le sens du vent). L'algorithme est donné par les équations (e 3-3).

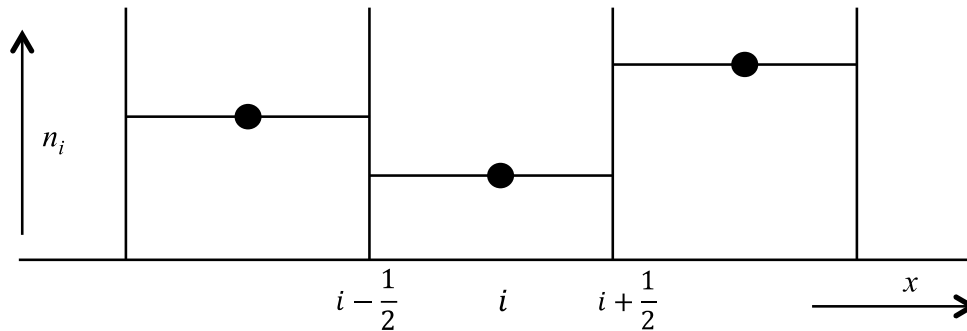


Figure 3-1: Discretisation de l'espace selon l'axe x avec distribution continue de la densité pour chaque cellule

$(nv_x)_{i+\frac{1}{2}}^{t_0} = \bar{n}_i^{t_0} v_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{t_0} \text{ si } v_{x_{i+\frac{1}{2}}} > 0$	e 3-3
$(nv_x)_{i+\frac{1}{2}}^{t_0} = \bar{n}_{i+1}^{t_0} v_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{t_0} \text{ si } v_{x_{i+\frac{1}{2}}} < 0$	

Ainsi, à la frontière $i + \frac{1}{2}$ de la cellule i , la méthode UPWIND transporte une partie de la densité moyenne de la cellule i vers la cellule $i + 1$ si la vitesse à la frontière est positive. A l'inverse, si la vitesse à la frontière $i + \frac{1}{2}$ est négative, la méthode transporte une partie la densité moyenne de la cellule $i + 1$ vers la cellule i . La Figure 3-2 illustre le transport UPWIND à densité constante dans chaque cellule et pour une vitesse de transport positive.

Cette approximation permet de supprimer tous les défauts du calcul par différence centrée. Cependant, les résultats obtenus avec ce schéma (densité constante + méthode UPWIND) présentent une très forte diffusion numérique. De ce fait, les forts gradients s'estompent avec le temps.

Au travers de ces deux exemples, on peut définir qu'un algorithme est supposé fiable s'il respecte un certain nombre de critères. Il ne doit pas introduire d'oscillations artificielles dans la solution (non dispersif) et de diffusion numérique (non diffusif). De plus, il doit être conservatif (c'est-à-dire ne pas introduire artificiellement des termes sources de perte ou de création de densité) et maintenir la positivité de la solution (pour être en accord avec la physique). Ces critères sont à respecter quelles que soient les conditions et notamment lors de la propagation de forts gradients de densité dans des champs de vitesse non-stationnaires et inhomogènes.

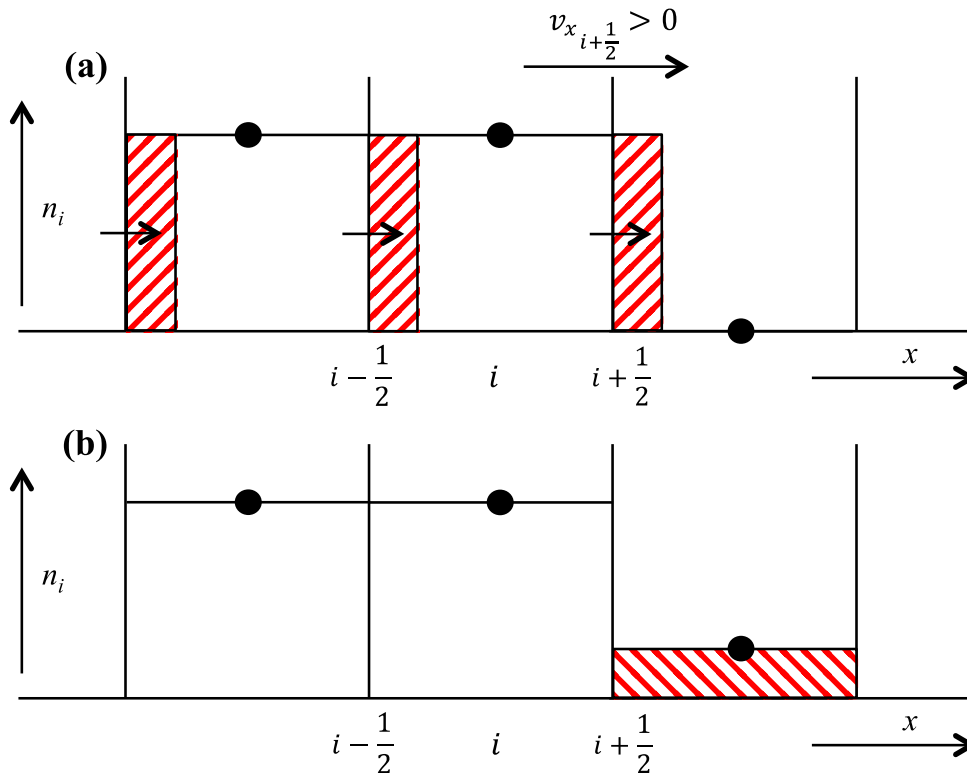


Figure 3-2: Schéma UPWIND selon l'axe x pour une vitesse positive

Pour respecter l'ensemble de ces critères, nous avons choisi d'utiliser dans cette thèse l'algorithme MUSCL (Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws) qui considère une distribution linéaire de la densité dans chaque cellule. Cet algorithme a été initié par Van Leer [59] en 1979. Dans la littérature, la méthode MUSCL a été notamment utilisée pour la modélisation 3D de micro-décharges dans des microcavités [60] et en 2D pour modéliser la propagation de streamer [38]. Contrairement à d'autres méthodes, de type FCT par exemple, il a été montré que la méthode MUSCL n'a pas besoin d'utiliser le time splitting (découpage des évolutions dans chaque direction les unes après les autres) contraignant en termes de temps dans une simulation 3D [61]. La section suivante décrit dans les grandes lignes la méthode.

3.2.2 L'algorithme MUSCL

Dans chaque élément de volume, la variation de densité est considérée par MUSCL comme linéaire. La Figure 3-3 montre un exemple de discrétisation selon la direction x avec une distribution linéaire par morceaux de la densité. Les droites vérifient que la valeur de la densité au centre des cellules est égale à la valeur moyenne de la densité.

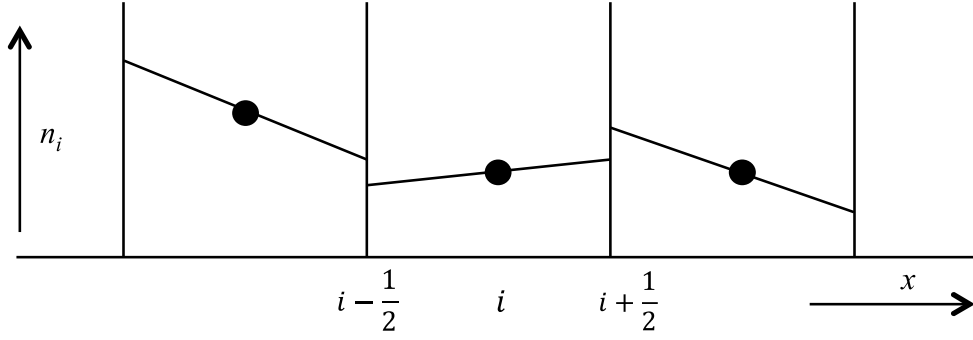


Figure 3-3: Discretisation de l'espace avec une distribution linéaire de la densité dans chaque cellule

Ainsi, la densité est estimée dans l'espace 3D par l'équation (e 3-4). Cette formulation assure que la valeur moyenne de $n_{ijk}(x, y, z)$ sur tout le volume d'une cellule ijk vaut \bar{n}_{ijk} et que $n_{ijk}(x_i, y_j, z_k) = \bar{n}_{ijk}$.

$n_{ijk}(x, y, z) = \bar{n}_{ijk} + (x - x_i) p_i + (y - y_j) p_j + (z - z_k) p_k$	e 3-4
--	-------

Aux frontières de chaque cellule, les densités sont calculées selon les relations e 3-5.

$n_{i\pm\frac{1}{2},jk} = n_{ijk}(x_{i\pm\frac{1}{2}}, y_j, z_k) = \bar{n}_{ijk} + (x_{i\pm\frac{1}{2}} - x_i) p_i$ $n_{i,j\pm\frac{1}{2},k} = n_{ijk}(x_i, y_{j\pm\frac{1}{2}}, z_k) = \bar{n}_{ijk} + (y_{j\pm\frac{1}{2}} - y_j) p_j$ $n_{i,j,k\pm\frac{1}{2}} = n_{ijk}(x_i, y_j, z_{k\pm\frac{1}{2}}) = \bar{n}_{ijk} + (z_{k\pm\frac{1}{2}} - z_k) p_k$	e 3-5
---	-------

Les pentes p_i , p_j et p_k sont déterminées avec les équations (e 3-6) (données selon l'axe x ici) et (e 3-7).

$\hat{a}_i = \frac{\bar{n}_{i+1,j,k} - \bar{n}_{i,j,k}}{x_{i+1} - x_i} \text{ et } \hat{b}_i = \frac{\bar{n}_{i,j,k} - \bar{n}_{i-1,j,k}}{x_i - x_{i-1}}$ <p>Si $\hat{a}_i \times \hat{b}_i > 1$</p> $p_i = \text{signe}(\hat{a}_i) \text{ maximum } [\text{minmod}(CM \times \hat{a}_i, \hat{b}_i), \text{minmod}(\hat{a}_i, CM \times \hat{b}_i)]$ <p>Si $\hat{a}_i \times \hat{b}_i < 1$</p> $p_i = 0$	e 3-6
---	-------

$\minmod(g, h) = \begin{cases} g \text{ si } g \leq h \text{ pour } g \times h > 0 \\ h \text{ si } g > h \text{ pour } g \times h > 0 \\ 0 \text{ si } g \times h \leq 0 \end{cases}$	e 3-7
--	-------

C'est la partie cruciale de l'algorithme. La formule doit permettre de maintenir au mieux les gradients de densité dans chaque cellule sans introduire d'oscillations tout en limitant la diffusion numérique. Le coefficient multiplicateur CM est choisi de telle sorte à obtenir le meilleur compromis.

Les densités étant linéaire par morceaux dans chaque cellule, il existe une discontinuité de densité aux frontières (voir Figure 3-3). Par exemple, selon la direction x et à la frontière $x_{i+\frac{1}{2}}$, deux valeurs de densité sont possibles pour le calcul des flux :

$$n_{ijk} \left(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k \right) = \bar{n}_{ijk} + \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x_i \right) p_i$$

et

$$n_{i+1,jk} \left(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k \right) = \bar{n}_{i+1,jk} + \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x_i \right) p_{i+1}$$

Le choix de l'une ou l'autre valeur se fait selon la méthode UPWIND déjà décrite dans la section 3.2.1.

L'algorithme étant défini, il convient avant de l'implémenter dans le code de décharge, de tester ses performances notamment en 3D et en calcul parallèle. C'est l'objet de la prochaine section de ce chapitre.

3.3 Tests 3D préliminaires dans le cas de la résolution de l'équation de continuité sans termes sources.

3.3.1 Description des tests

Le but de ce paragraphe est de résoudre l'équation de continuité dans des conditions mathématiques tests et en calculant les flux d'échanges entre mailles contiguës avec l'algorithme MUSCL précédemment décrit. Pour ce faire, un cube de 1 mm^3 de coté est discrétisé en n^3 mailles (n variant de 100 à 800). Afin de tester MUSCL dans des conditions de transport de particules chargées à fort gradient de densité, la distribution de la densité initiale est un cube de densité 10 (en unité arbitraire) décrit par l'équation (e 3-8). Dans ce cas, les fronts de densité sont très élevés car ils varient brutalement de 10 à 0 aux bords du cube sur une épaisseur de maille.

$\begin{cases} n(x, y, z, t = 0) = 10 \text{ si } 0,05 \leq x, y, z \leq 0,25 \\ \text{sinon } n(x, y, z, t = 0) = 0 \end{cases}$	e 3-8
---	-------

Cette densité est transportée le long de l'un des axes du domaine d'étude (x ou y ou z) par un champ de vitesse stationnaire qui est soit homogène dans l'espace (voir l'équation (e 3-9) pour une propagation selon l'axe x) soit inhomogène et périodique (voir l'équation (e 3-10) pour une propagation selon l'axe x). Cette dernière expression reproduit les variations typiques du champ de vitesse présent dans la tête des streamers en aval du front de densité. Le maximum de vitesse (10m/s) est atteint ici pour $x = 0,5\text{mm}$.

$v(x) = 10^6 \text{ m/s}$	e 3-9
---------------------------	-------

$v(x) = 1 + 9 \left(\sin \left(\frac{\pi \cdot x}{10^{-3}} \right) \right)^8 \text{ m/s}$	e 3-10
---	--------

Dans ces deux cas tests, des conditions aux limites périodiques sont imposées aux frontières du domaine. Ainsi, pour une propagation dans la direction x par exemple, le signal cubique retrouve sa forme et sa position initiale au bout d'une période T de propagation. De ce fait, on peut comparer qualitativement et quantitativement la différence des densités calculées numériquement par rapport aux densités initiales en fonction du nombre de période.

Enfin, un dernier test est effectué avec un champ de vitesse stationnaire et homogène dirigé le long de l'une des diagonales principales du domaine, chaque composante de la vitesse ayant une valeur de 10^6m/s .

On peut noter que dans le cadre d'une discrétisation explicite de l'équation de conservation, les pas de temps d'évolution Δt doivent respecter la condition de Courant-Friedrichs-Levy [57] données par la relation (e 3-11). Le nombre de Courant-Friedrichs-Levy, noté CFL dans l'équation, varie dans nos tests de 0,1 à 0,01. Dans tous les cas, le CFL doit être inférieur à 0,16 pour assurer une solution stable en 3D [61].

$\Delta t = CFL \times \frac{\Delta x}{v_{xmax}}$	e 3-11
---	--------

Le coefficient multiplicateur (CM) de l'équation e 3-6 est choisi entre 1 et 2 (En 1985, Sweby a démontré que la méthode MUSCL était dans ce cas d'ordre 2 [62]).

La validité de l'algorithme MUSCL est estimée à l'aide de critères qualitatif et quantitatif. Le premier consiste à regarder les résultats pour détecter dans la solution numérique de la dispersion ou de la diffusion de signal. Le second, consiste à calculer, l'erreur relative (ER) en tous points du domaine entre la densité initiale n_a et la solution numérique au bout de 1 ou plusieurs périodes.

Si l'on obtient une solution numérique approchée notée $\tilde{n}_{i,j,k}$, l'erreur relative en chaque point du maillage est calculée suivant l'équation (e 2-24).

$Err_{relative} = \frac{1}{n} \sum_n \frac{ \tilde{n}_{i,j,k} - n_{a_{i,j,k}} }{ n_{a_{i,j,k}} }$	e 3-12
---	--------

On peut enfin noter que tous les tests ont été effectués en mode parallèle à l'aide de la bibliothèque MPI et que le domaine total est distribué en sous domaine sur plusieurs cœurs avec un découpage en cube.

3.3.2 Transport de la densité avec une vitesse constante selon un des axes du domaine

Dans ce paragraphe, on étudie l'algorithme MUSCL en imposant une densité cubique en accord avec l'équation (e 3-8). Cette densité se déplace à une vitesse constante imposée par l'équation (e 3-9) et dirigée selon soit l'axe x ou y ou z . Les tests ayant donné les mêmes résultats quelques soient les directions, nous ne présenterons ici que ceux avec une vitesse dirigée selon l'axe x . Le CM et le CFL varient respectivement de 1 à 2 et de 0,1 à 0,01. On s'intéresse à une coupe 1D selon l'axe x pour $y = z = 0,15\text{mm}$. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 3-4, la Figure 3-5, la Figure 3-6 et la Figure 3-7 avec respectivement $n = 100, 200, 400$ et 800 . On suit l'évolution de la densité jusqu'à un maximum de 30 périodes sauf dans le cas $n = 800$ où seulement la densité après une période est étudiée. En effet, avec un tel nombre de points le temps de calcul devient plus important et il serait nécessaire de faire des demandes d'allocation de temps de calcul trop important sur EOS à ce stade de l'étude.

La Figure 3-4 montre l'influence du CM et du CFL pour $n = 100$. La Figure 3-4a et la Figure 3-4b montrent les résultats avec un CFL fixe égal à 0,1 et un CM qui varie de 1 à 2 respectivement. De la même manière, avec un CFL égal à 0,01, la Figure 3-4c et la Figure 3-4d comparent les résultats obtenus lorsque $CM = 1$ ou 2.

Analysons tout d'abord, à CFL constant, l'effet de CM sur la diffusion numérique du signal. Pour un CFL fixé, lorsque $CM = 1$ et dès la première période, le signal de densité initialement carré prend une forme gaussienne (voir les courbes bleues sur la Figure 3-4a et la Figure 3-4c). La solution est nettement améliorée avec $CM = 2$ quel que soit le nombre de périodes (voir la Figure 3-4b et la Figure 3-4d). Pour $CM = 1$, le phénomène de diffusion s'accroît avec le nombre de périodes conduisant à l'élargissement du signal et à la baisse de sa valeur maximum. Par exemple sur la Figure 3-4a, le maximum de densité au bout d'une période est égal à 9,8 et descend jusqu'à 6,4 au bout de 30 périodes. Toutefois, le calcul montre que la quantité globale de particules est conservée et que l'algorithme assure la positivité de la solution. Lorsque $CM = 2$ (Figure 3-4b et Figure 3-4d), le maximum de la densité est toujours égal à 10 quel que soit le nombre de périodes et le plateau de densité est maintenu sur

quasiment toute sa longueur initiale. Il est intéressant de constater que la faible diffusion qui apparaît sur les bords du signal carré est stabilisée et ne s'accroît pas avec le nombre de périodes. On constate ici un premier effet du CM qui atténue le phénomène de diffusion et conserve les forts gradients lorsque sa valeur vaut 2. Nos résultats sont en accord avec la littérature. En effet, Roe et Baines ont constaté également que de meilleurs résultats sont obtenus avec $CM = 2$ et ont baptisé cette méthode « MUSCL Superbee » [63].

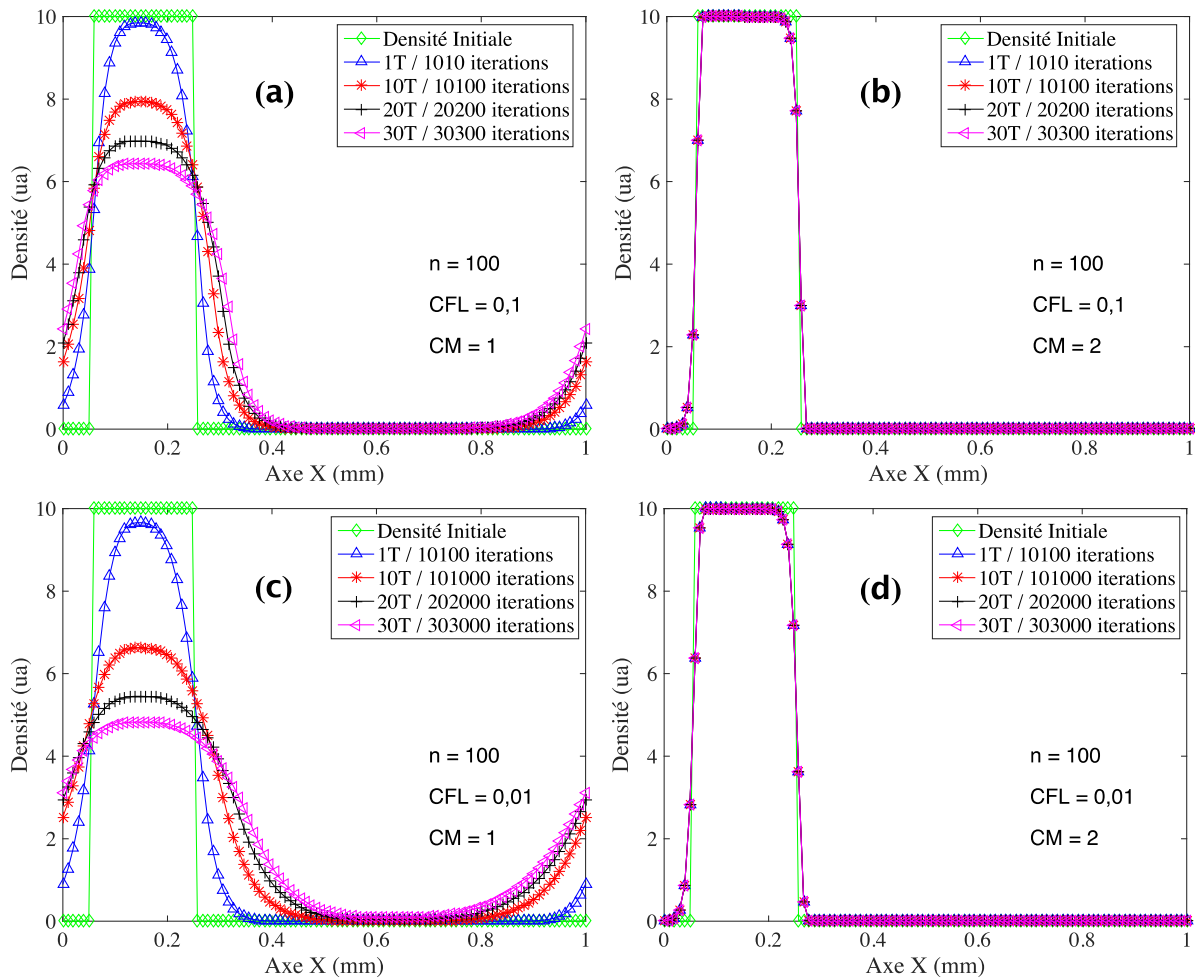


Figure 3-4: Transport d'un cube de densité selon l'axe x à vitesse constante: forme du signal au bout de 1 et plusieurs périodes avec $n = 100$. (a) $CFL = 0,1$ et $CM = 1$, (b) $CFL = 0,1$ et $CM = 2$, (c) $CFL = 0,01$ et $CM = 1$, (d) $CFL = 0,01$ et $CM = 2$.

Pour un même CM , analysons maintenant l'influence du CFL sur le transport de densité pour $n = 100$. En diminuant le CFL d'un facteur 10 et en accord avec l'équation e 3-11, le pas de temps Δt diminue d'un facteur 10 également. Ainsi, pour un même temps d'évolution, il est nécessaire d'effectuer 10 fois plus d'itérations temporelles pour amener le signal au même endroit. Ceci est vérifié par le nombre d'itérations qui augmente d'un facteur 10 entre un CFL égal à 0,1 (cf. Figure 3-4a et Figure 3-4b) et 0,01 (cf. Figure 3-4c et Figure 3-4d). Sur la Figure 3-4a, 1010 itérations sont nécessaires pour effectuer une période, tandis que 10100

sont nécessaires avec un CFL de 0,01 sur la Figure 3-4c. On remarque que la diffusion numérique est plus importante lorsque le CFL diminue. Cela est flagrant pour $CM = 1$ (en comparant la Figure 3-4a avec la Figure 3-4c) et s'observe également pour $CM = 2$ en comparant les bords du plateau de densité sur la Figure 3-4b et la Figure 3-4d. Ainsi, avec $CM = 1$, le maximum de la densité selon x avec un CFL de 0,01 est plus petit qu'avec un CFL de 0,1. Par exemple et au bout de 30 périodes, le maximum de densité avec un $CFL = 0,01$ est 1,32 fois plus petit par rapport aux conditions avec un CFL égal à 0,1.

Les mêmes tendances décrites précédemment sont observées en augmentant le nombre de points de discrétisation (cf. Figure 3-5, Figure 3-6 et Figure 3-7 avec respectivement $n = 200$, 400 et 800).

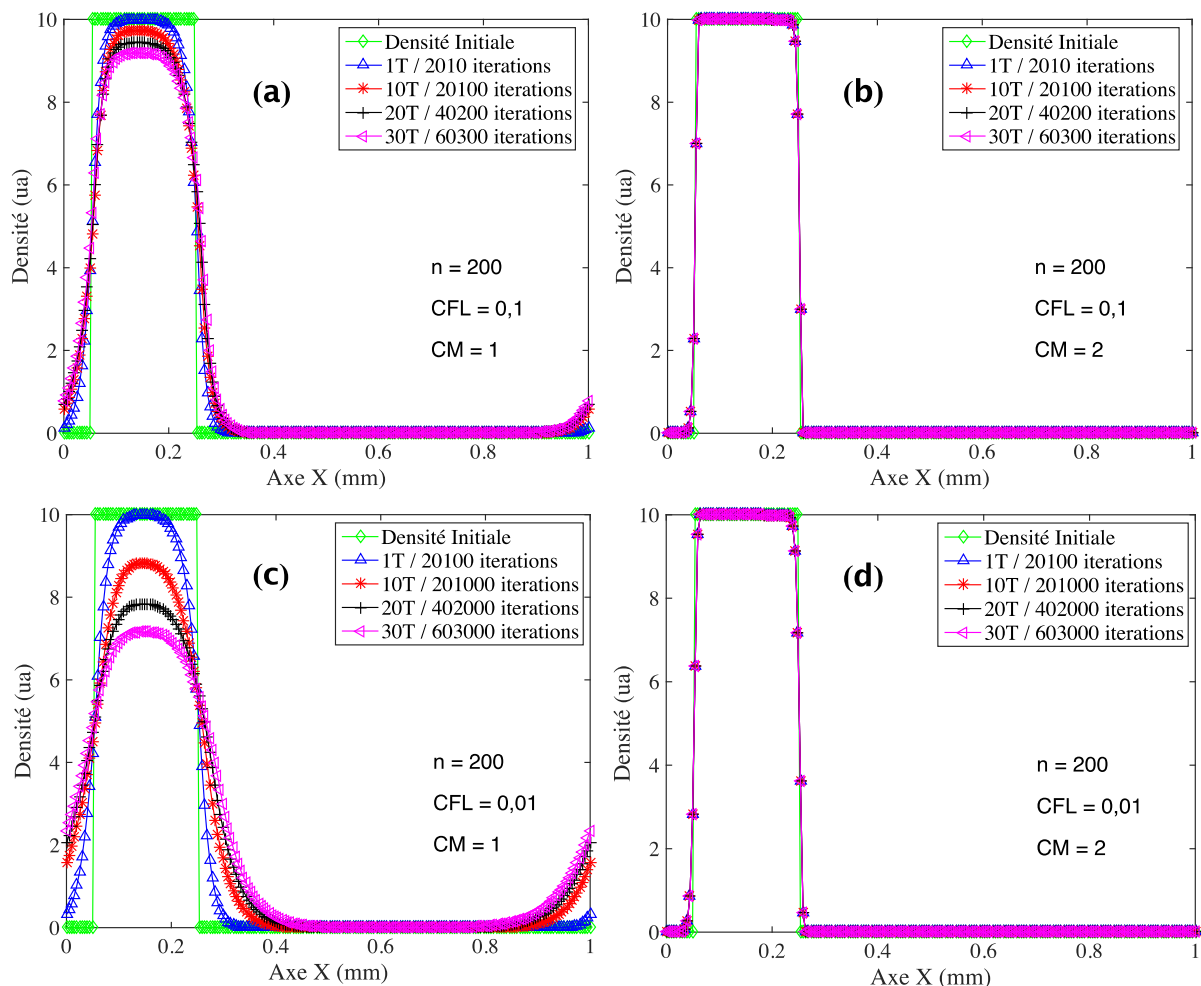


Figure 3-5: Transport d'un cube de densité selon l'axe x à vitesse constante: forme du signal au bout de 1 et plusieurs périodes avec $n = 200$. (a) $CFL = 0,1$ et $CM = 1$, (b) $CFL = 0,1$ et $CM = 2$, (c) $CFL = 0,01$ et $CM = 1$, (d) $CFL = 0,01$ et $CM = 2$.

Cependant, et comme on pouvait s'y attendre, lorsqu'on augmente la précision du maillage, c'est à dire que le paramètre n augmente, la précision de la solution est améliorée. En effet, pour une même condition de CFL et de CM , lorsque n augmente le phénomène de diffusion diminue. Par exemple au bout de 30 périodes, pour un $CFL = 0,01$ et un $CM = 1$, le maximum de la densité dans le cas $n = 100$ vaut 4,83 (cf. Figure 3-4c), 7,16 pour $n = 200$ (cf. Figure 3-5c) et 9,2 pour $n = 400$ (cf. Figure 3-6c). En effet, en densifiant le nombre de mailles, les gradients entre mailles contiguës diminuent et sont mieux gérés par la méthode MUSCL. Toutefois, avec un $CM = 1$, la diffusion numérique est toujours présente et s'accroît avec le nombre de périodes. Au vue de ces résultats, seules les simulations avec $CM = 2$ (quelles que soient les valeurs de CFL) permettent un transport de la densité avec une diffusion quasi inexistante (voir les Figure 3-6b, d Figure 3-7b, d).

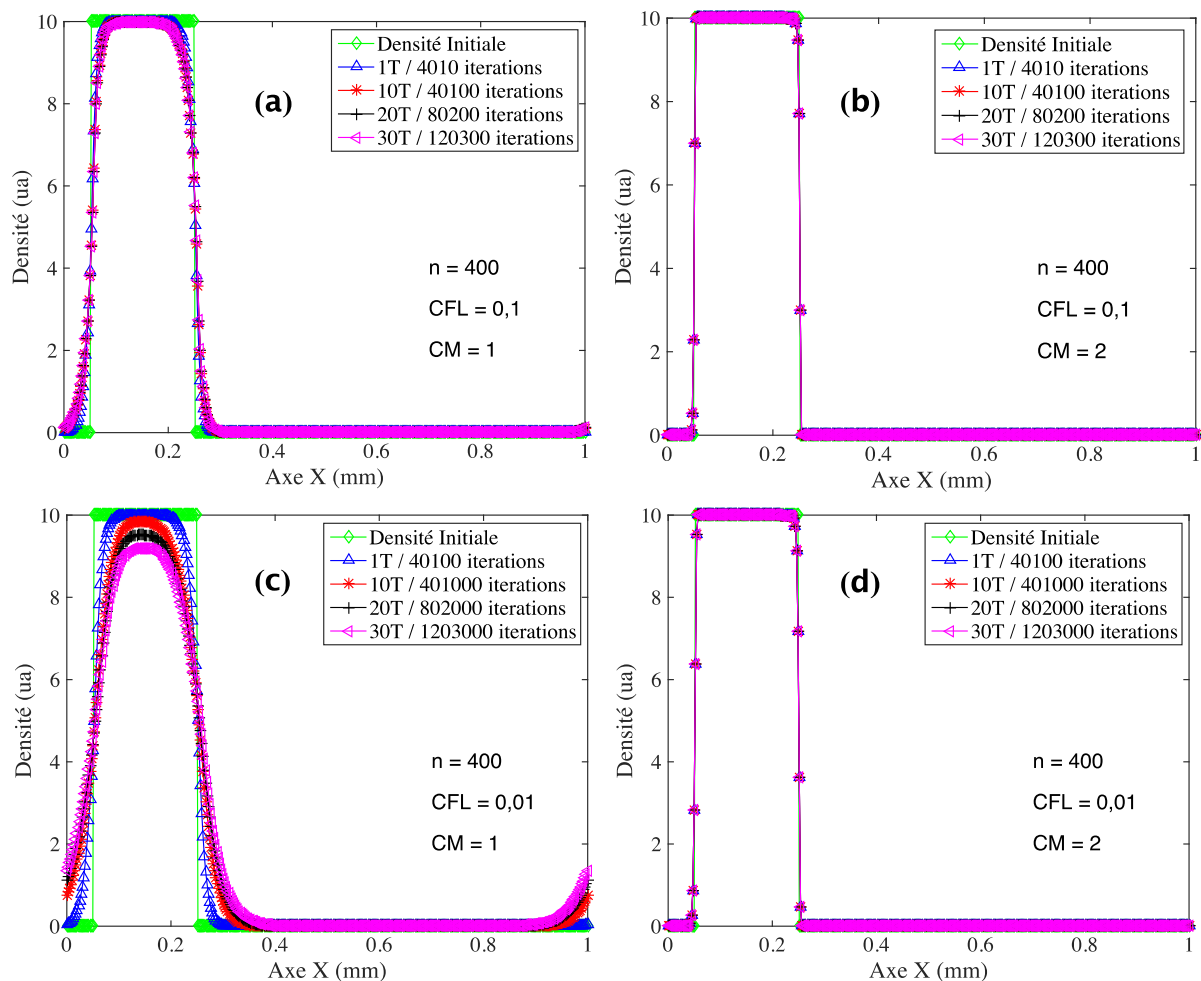


Figure 3-6: Transport d'un cube de densité selon l'axe x à vitesse constante: forme du signal au bout de 1 et plusieurs périodes avec $n = 400$. (a) $CFL = 0,1$ et $CM = 1$, (b) $CFL = 0,1$ et $CM = 2$, (c) $CFL = 0,01$ et $CM = 1$, (d) $CFL = 0,01$ et $CM = 2$.

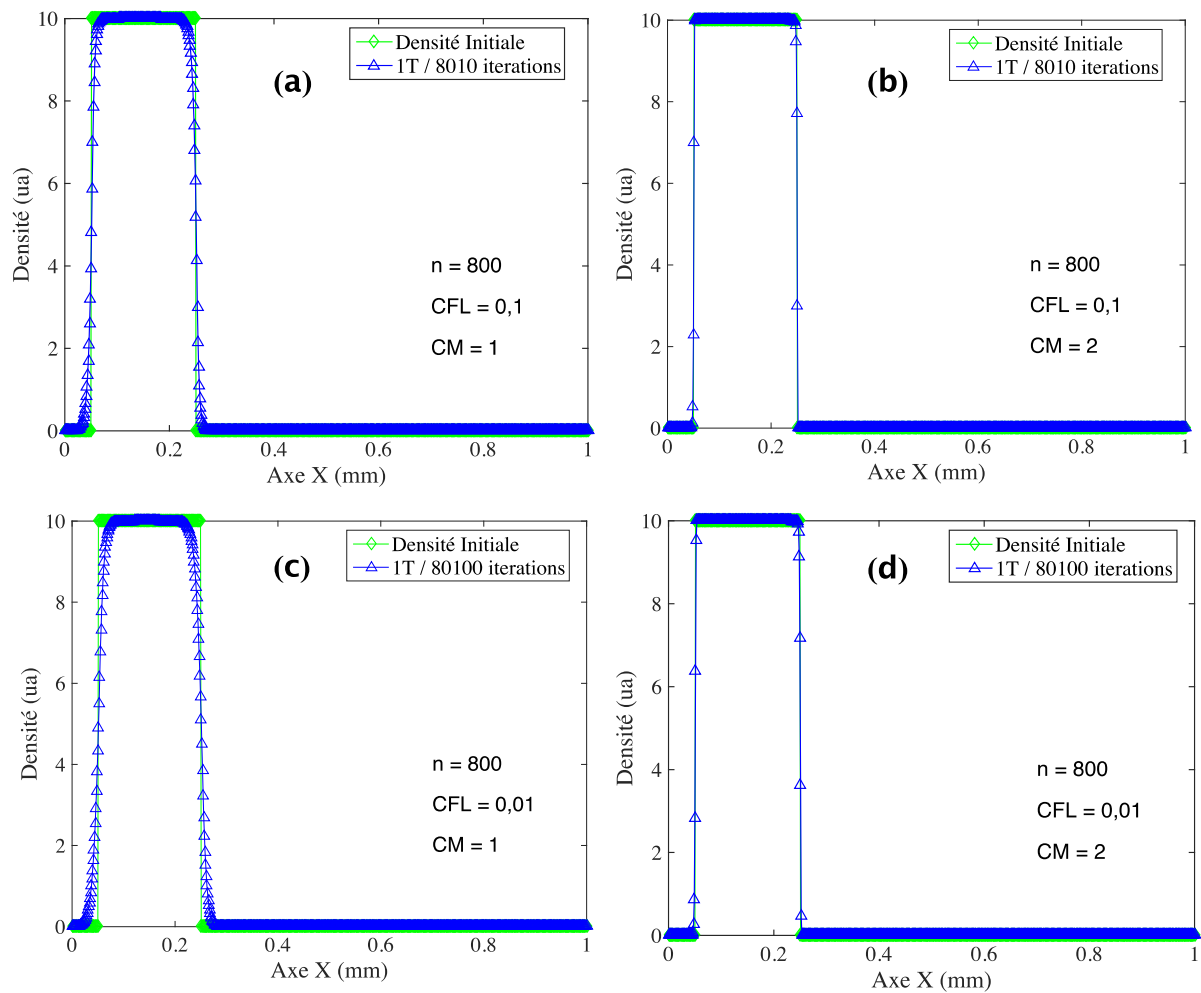


Figure 3-7: Transport d'un cube de densité selon l'axe x à vitesse constante: forme du signal au bout de 1 et plusieurs périodes avec $n = 800$. (a) $CFL = 0,1$ et $CM = 1$, (b) $CFL = 0,1$ et $CM = 2$, (c) $CFL = 0,01$ et $CM = 1$, (d) $CFL = 0,01$ et $CM = 2$.

Après cette première analyse qualitative, on s'intéresse à l'erreur relative entre la solution numérique et la densité initiale au bout d'un certain nombre de périodes. La Figure 3-8 montre l'erreur relative pour toutes les conditions de CFL et de CM testées avec $n = 100, 200, 400$ et 800 (respectivement Figure 3-8a, Figure 3-8b, Figure 3-8c et Figure 3-8d). Ces figures montrent que quelles que soient les valeurs de n et de CM , l'erreur relative est meilleure pour un $CFL = 0,1$ que pour un $CFL = 0,01$. Pour un CM égal à 1, l'erreur relative augmente avec le nombre de périodes. En effet, la forte diffusion dans ces conditions engendre une dégradation de la solution lorsque la densité est transportée. Lorsque $CM = 2$, on constate que l'erreur relative est constante avec le nombre de périodes. Il n'y a pas de perte d'informations. De plus, avec $CM = 2$, on constate que l'erreur relative décroît proportionnellement avec l'augmentation du nombre de maille et ceci indépendamment de la valeur du CFL . Par exemple, pour un $CFL = 0,1$, l'erreur relative est d'environ 0,032% pour $n = 100$, décroît à 0,016% pour $n = 200$ puis à 0,008% et 0,004% respectivement lorsque n passe de 400 à 800. Ainsi, pour $CM = 2$, lorsque le nombre de points de discrétisation augmente d'un facteur deux l'erreur relative diminue d'un facteur deux.

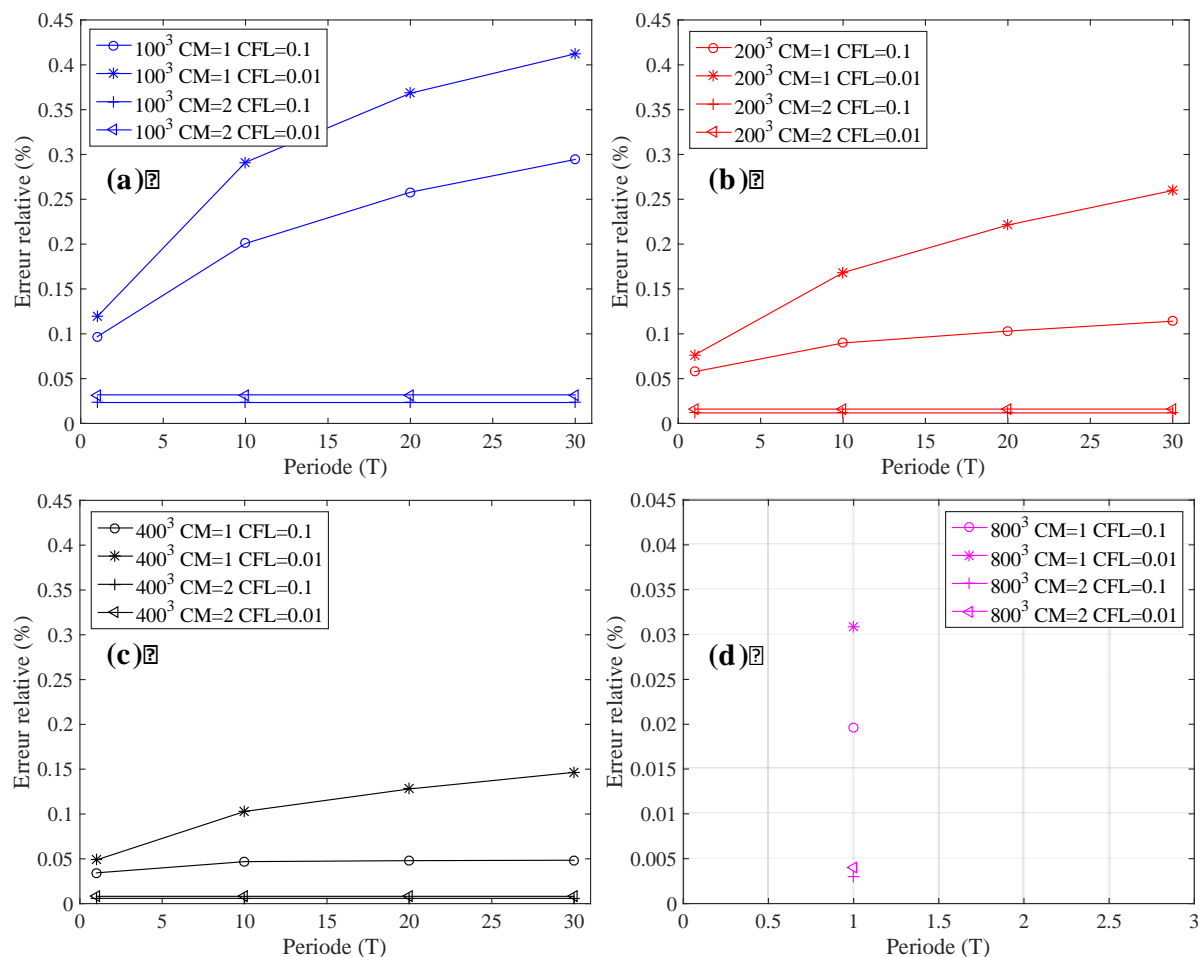


Figure 3-8: Erreur relative en fonction du nombre de période et du CFL pour : (a) $n = 100$, (b) $n = 200$, (c) $n = 400$ et (d) $n = 800$.

La Figure 3-9 montre un exemple d'une visualisation 3D du transport selon l'axe x d'un cube initial de densité pour $n = 200$. Les paramètres pour le transport sont 0,01 pour le CFL et 1 ou 2 pour le CM (correspondant respectivement à la Figure 3-9a et la Figure 3-9b). La densité est visualisée à l'intérieur du domaine d'étude via un iso volume de densité compris entre 9 et 10. Ainsi, les volumes rouges sur la Figure 3-9, délimitent les zones de l'espace dans lesquels la densité est au moins supérieure ou égale à 9. Le premier cube à gauche représente la densité initiale. Pour $CM = 1$, on constate que le cube dans sa propagation vers la droite, se transforme progressivement en un pavé avec un rétrécissement selon la direction x . Ce rétrécissement, seulement présent dans la direction du transport, s'explique par la diffusion de la densité de part et d'autre du cube initiale. En effet, puisque que la conservation de la densité totale est assurée et qu'elle se répartit sur un volume plus grand à cause de la diffusion, la zone de l'espace où la densité est au moins supérieure à 9 occupe un volume plus petit. La diffusion expliquée précédemment est flagrante sur la Figure 3-9a avec un $CM = 1$ alors qu'elle est quasi inexistante sur la Figure 3-9b avec un $CM = 2$.

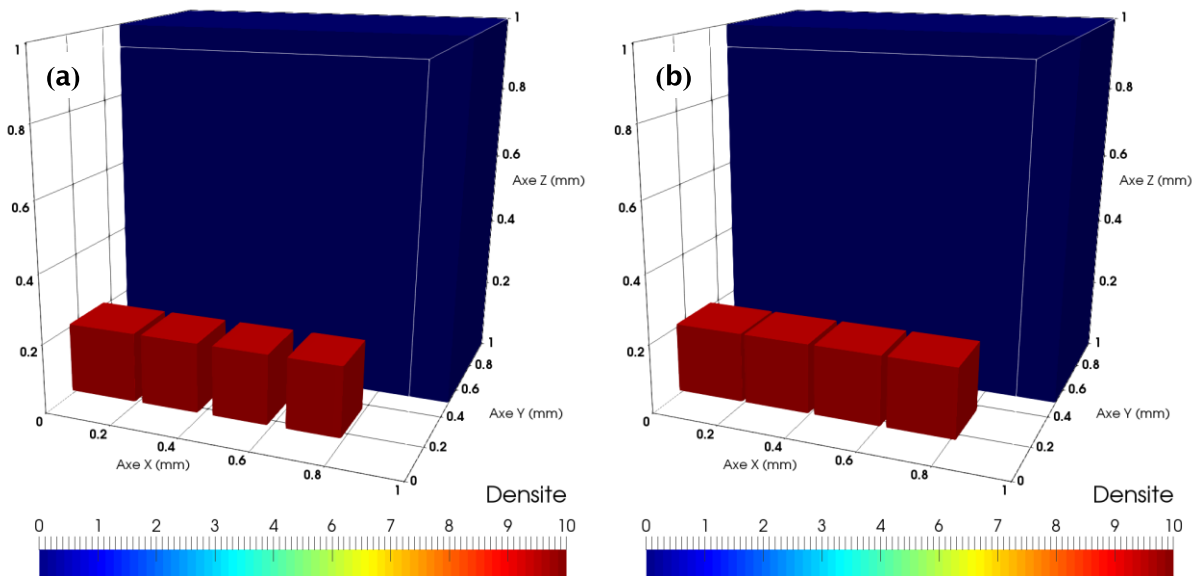


Figure 3-9: Visualisation du transport de la densité en 3D avec $n = 200$ à $t = 0T, 0.2T, 0.4T$ et $0.6T$ pour une valeur d'iso volume compris entre 9 et 10. (a) $CM = 1$ et $CFL = 0,01$.
(b) $CM = 2$ et $CFL = 0,01$

La section suivante est destinée à analyser le comportement de la méthode MUSCL pour un champ constant dans le temps et inhomogène dans l'espace.

3.3.3 Transport de la densité avec vitesse oscillante et périodique

Cette section est dédiée à l'étude du comportement de l'algorithme MUSCL lors du transport d'une densité cubique représentée par l'équation e 3-8 sous un champ de vitesse oscillant et périodique tel que décrit par l'équation e 3-10 et représenté sur la Figure 3-10d. L'étude est

menée ici en fonction du nombre n de mailles (pour $n = 100, 200$ et 400) avec $CM = 2$ et $CFL = 0,01$ (l'explication du choix du CFL sera donnée plus loin). Les résultats sont tracés à $0,2T, 0,4T$ et $1T$ selon la direction x sur la Figure 3-10 pour $n = 100, 200$ et 400 (respectivement Figure 3-10a, Figure 3-10b et Figure 3-10c). La vitesse imposée engendre dans un premier temps une accélération des particules jusqu'à $0,5\text{mm}$ puis un ralentissement. On observe donc une dilatation de la densité nettement visible sur la courbe bleue foncée à $0,2T$ sur la Figure 3-10a, la Figure 3-10b et la Figure 3-10c. Après le passage du maximum de vitesse, les particules ralentissent et s'accumulent. On a donc un phénomène de compression qui s'observe bien à $0,4T$ (courbe noire) quel que soit le nombre n . Au bout de $1T$, l'algorithme MUSCL présente un peu de diffusion et de dispersion. Comme dans l'étude précédente, la diffusion diminue avec l'augmentation de définition spatiale. La dispersion qui se traduit par quelques oscillations autour du plateau de densité reste présente même pour $n = 400$.

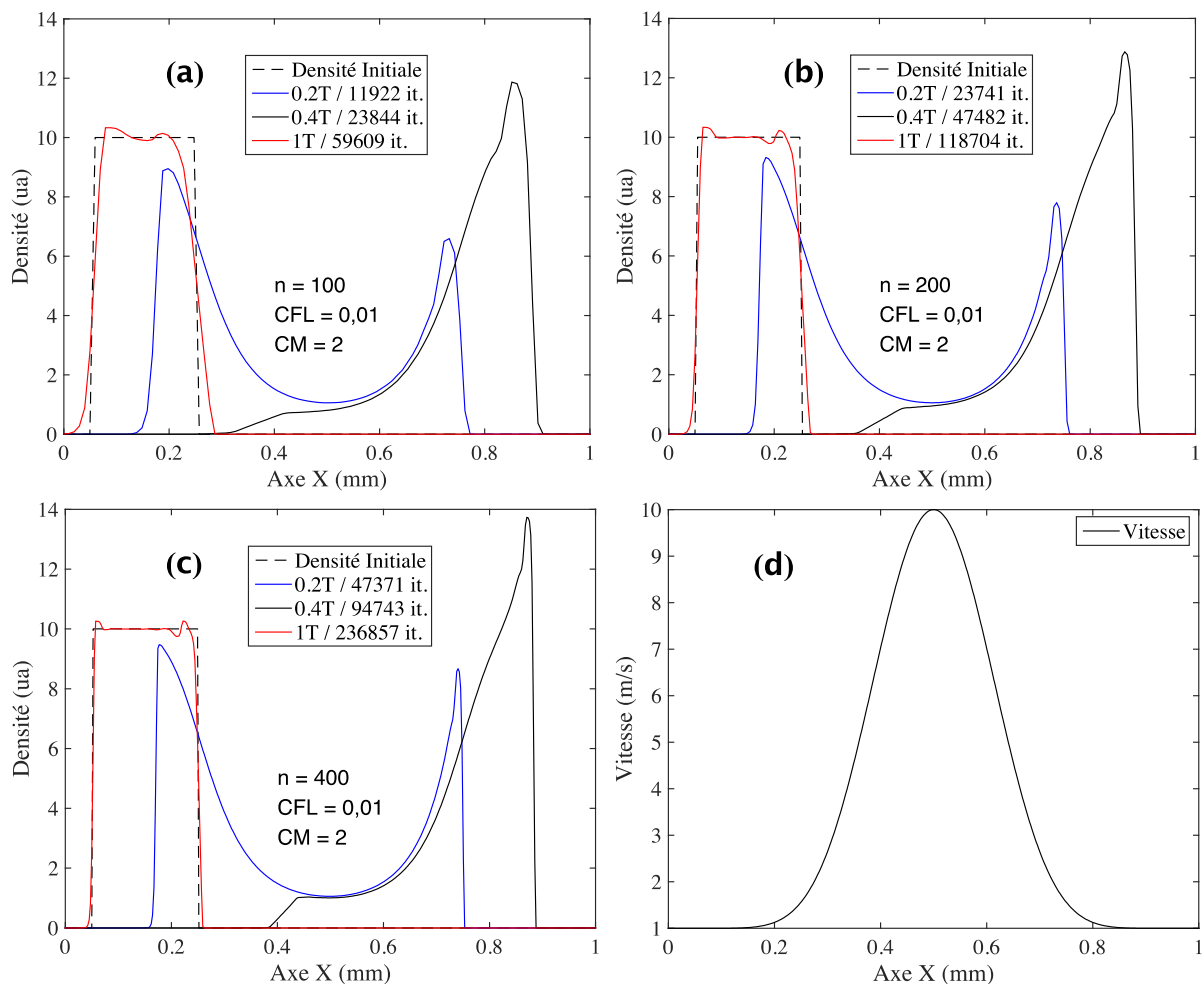


Figure 3-10: Transport d'un cube de densité selon l'axe x à vitesse oscillante, avec $n = 100$ (a), 200 (b) et 400 (c) pour un $CFL = 0,01$ et $CM = 2$. Vitesse oscillante et périodique imposée en (d).

La Figure 3-11 montre l'erreur relative (voir équation e 2-24) après plusieurs périodes par rapport à la densité initiale. L'ER au bout d'une période T est égale à 0,059% pour $n = 100$, à 0,033% pour $n = 200$ et à 0,017% pour $n = 400$. L'apparition d'oscillations au cours des périodes successives augmente l'ER. La solution se dégrade. En effet, pour $n = 100$, l'ER passe de 0,059% à 0,124% en 10 périodes et de 0,033% à 0,09% en 10 périodes avec $n = 200$. On remarque également la sensibilité du CFL sur la Figure 3-11. Pour $n = 100$, au bout de 10 périodes, l'ER est plus petite avec un CFL égal à 0,01 qu'avec un CFL égal à 0,1 (respectivement 0,124% et 0,147%). La même tendance est observée avec $n = 200$. A la 10^{ème} période, l'ER est de 0,103% avec un CFL de 0,1 et de 0,09% avec un CFL de 0,01. Ce résultat est intéressant pour de futures simulations de décharge couronne. Lorsqu'un champ de vitesse oscillant est appliqué à des particules chargées, on montre clairement ici que le transport le plus précis sera effectué avec un $CM = 2$ et un $CFL = 0,01$.

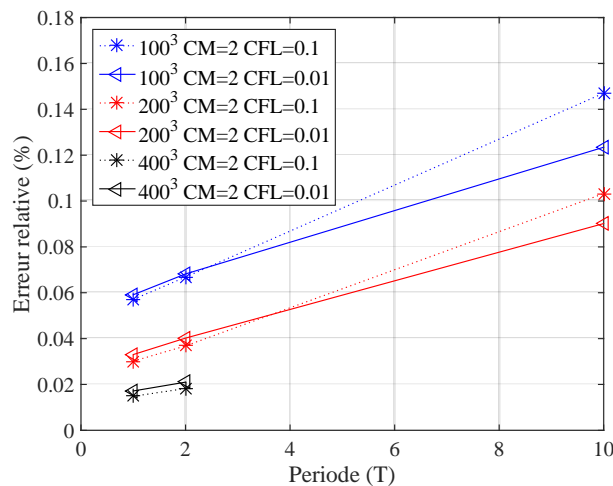


Figure 3-11 : Erreur relative en fonction du nombre de période et du CFL pour $n = 100$, 200, et 400.

Ces premiers tests préliminaires ont permis de tester la méthode MUSCL dans une configuration 3D est de vérifier son comportement à vitesse homogène et inhomogène dans chacune des directions de l'espace prises une à une (sachant que seul les résultats selon l'axe x sont présentés dans ce manuscrit). La section suivante montre le comportement de l'algorithme dans une configuration « réellement » 3D.

3.3.4 Transport de densité avec vitesse constante selon trois directions

La densité initiale cubique est la même que précédemment en accord avec l'équation e 3-8. Cette densité se déplace à une vitesse constante imposée selon l'équation e 3-9 le long de la diagonale principale du domaine d'étude. Dans cette exemple, nous avons choisi un $CFL = 0,01$ et $n = 200$. Les résultats en trois dimensions sont représentés sur la Figure 3-12 et la Figure 3-13 avec respectivement $CM = 1$ et $CM = 2$. Les volumes rouges sont des iso-volumes de densités comprises entre 9 et 10. Avec un $CM = 1$ (cf. Figure 3-12), la densité perd

rapidement sa forme cubique initiale. Les coins du cube s'arrondissent et sa taille diminue. A cause de la diffusion numérique, la zone de l'espace dans laquelle la densité est supérieure à 9 se rétrécit. La configuration avec un $CM = 2$, montrée sur la Figure 3-13, conserve la forme cubique. Les arrêtes du cube ne sont que légèrement arrondies montrant l'efficacité de la méthode MUSCL dans un test où les flux d'échange entre mailles contigües sont appliqués dans les 3 directions de l'espace.

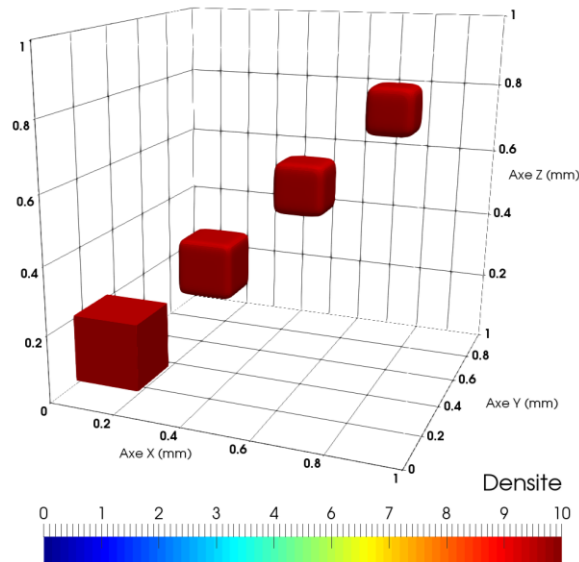


Figure 3-12: Visualisation du transport de la densité en 3D avec $n = 200$ à $t = 0T, 0.2T, 0.4T$ et $0.6T$ pour une valeur d'iso volume compris entre 9 et 10 (champ de vitesse selon la diagonale principale du cube, $CM = 1$ et $CFL = 0,01$).

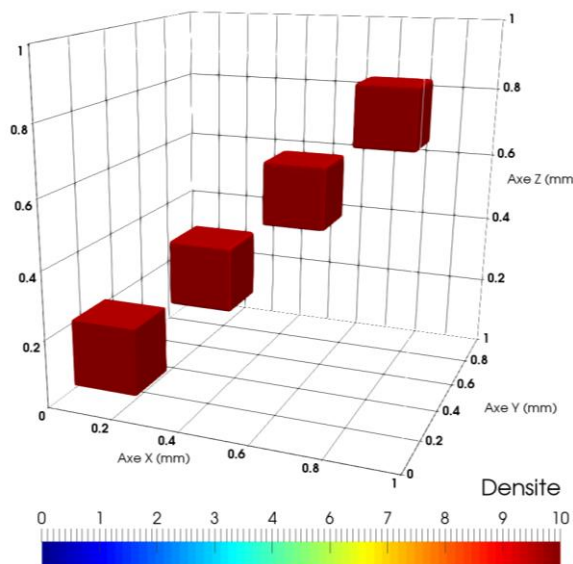


Figure 3-13: Visualisation du transport de la densité en 3D avec $n = 200$ à $t = 0T, 0.2T, 0.4T$ et $0.6T$ pour une valeur d'iso volume compris entre 9 et 10 (champ de vitesse selon la diagonale principale du cube, $CM = 2$ et $CFL = 0,01$).

Les différents tests effectués ont permis de valider l'efficacité de la méthode MUSCL à transporter en 3D des profils de densités à forts gradients. Toutefois, comme cela vient d'être montré, il faut apporter une attention particulière au choix des paramètres. $CM = 2$ et un CFL de l'ordre de 0,01 permettent de limiter la diffusion et la dispersion numérique. La définition du maillage est également un point important. Le nombre de points de discrétisation doit être un compromis entre les durées de calcul et l'amplitude des gradients à transporter.

Le code 3D dédié à la résolution du modèle fluide d'ordre 1 complet de la décharge (couplant les équations de transport, de Poisson et de cinétique réactionnelle) intègre les retours d'expériences des différents tests numériques 3D effectués, qu'il s'agisse de la résolution de l'équation de transport ou de l'équation de Poisson. La section suivante teste le comportement du code 3D parallèle réalisé durant la thèse par la confrontation des résultats 3D et 2D dans une condition de simulation présentant une symétrie de révolution autour de l'axe de propagation d'un streamer.

3.4 Validation du modèle 3D dans le cadre de la propagation axisymétrique d'un streamer mono-filamentaire

Le but de cette section est de comparer les résultats d'une simulation 3D cartésienne avec les résultats d'une simulation 2D cylindrique, c'est-à-dire présentant une symétrie de révolution autour de l'axe de propagation d'un streamer mono-filamentaire. Ces tests ont pour objet de valider le comportement du code 3D avec un code 2D réalisé dans le cadre de la thèse d'Olivier Ducasse [64].

3.4.1 Présentation du code 3D

Le code 3D développé dans le cadre de cette thèse est basé sur la méthode des volumes finis et d'une description explicite en temps pour la discrétisation des équations du modèle (voir § 2.1). La discrétisation de l'espace est réalisée à partir de cellules parallélépipédiques de tailles variables conduisant à la formation d'un maillage structuré. Ces cellules respectent un motif rectangulaire suivant les trois directions, leur volume ayant donc une forme cubique ou pavé. L'algorithme MUSCL Superbee est employé pour calculer les flux d'échanges selon les trois dimensions de chaque équation de transport discrétisée (une pour chaque espèce chargée prise en compte dans le modèle). L'équation de Poisson (cf. § 2.2) est résolue avec l'algorithme SOR R&B (cf. § 2.3.1.1) qui utilise l'accélérateur de Chebyshev pour augmenter la vitesse de convergence de la solution à chaque pas de temps d'évolution. Une étude préalable a été menée pour déterminer la valeur optimale du rayon spectral dans les conditions de simulation décrites plus loin (cf. § 2.4.1.2). Le code 3D dans son ensemble utilise la puissance du calcul haute performance en répartissant les calculs sur plusieurs cœurs (jusqu'à plus d'un millier) à l'aide de la bibliothèque MPI.

Les équations du modèle fluide d'ordre 1 sont très fortement couplées (cf. § 1.4.1). La résolution complète du modèle à chaque pas de temps nécessite donc des étapes de calculs dont la succession est décrite sur la Figure 3-14. A partir de conditions initiales (géométrie du système étudié, tension appliquée, densité des espèces chargées, etc.) ou d'un instant t dans l'évolution, le code calcule le profil 3D de la densité de charge d'espace. A partir de ce profil, l'algorithme SOR R&B calcule le potentiel électrique dont sont déduites les trois composantes du champ électrique en tous points de l'espace. Les coefficients de transport et de réaction sont calculés en fonction du module du champ électrique dans chaque maille et pour chaque espèce chargée. Les flux vectoriels de transport sont estimés à l'aide de la méthode MUSCL Superbee pour chaque espèce chargée. Enfin, l'évolution de la densité des espèces est effectuée de l'instant t à l'instant $t + \Delta t$ en application dans chaque maille et pour chaque espèce, les flux d'échange entre mailles contiguës et la cinétique réactionnelle. Les nouvelles densités permettent de déterminer la densité de charge d'espace résultante et de reboucler la séquence jusqu'au temps final de l'évolution.

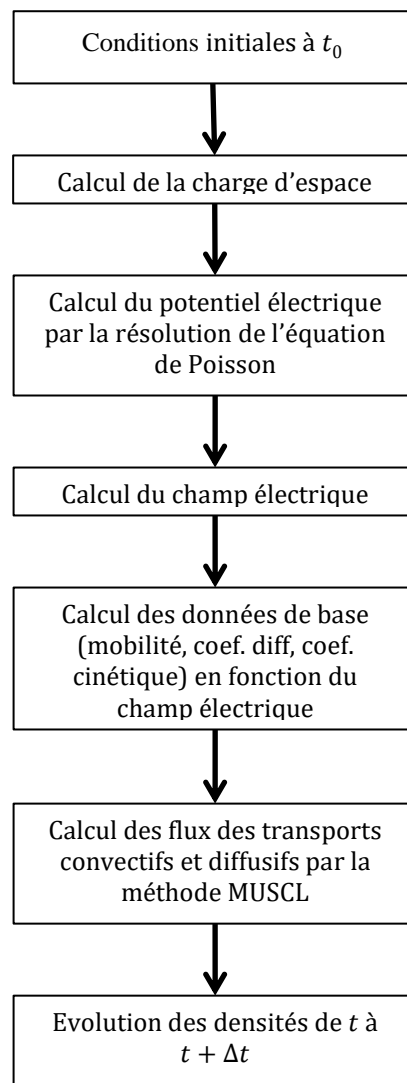


Figure 3-14 : Etapes successives pour la simulation du streamer

3.4.2 Conditions de simulation

Pour sa validation, le code 3D précédent décrit est appliqué aux conditions de simulation suivantes : Une pointe de type hyperbolique fait office d'anode portée à un potentiel constant de 3kV. La pointe hyperbolique a un rayon de courbure de 100 μ m. La cathode est un plan relié à la masse et distant de 1mm du bout de la pointe. Le gaz est de l'air à la pression atmosphérique et à la température ambiante. La décharge est modélisée à l'aide du modèle fluide d'ordre 1 (cf. § 1.4.1) utilisant l'approximation de dérive-diffusion et couplé avec l'équation de Poisson.

On considère les ions positifs et négatifs comme deux fluides ayant des comportements moyens (en termes de cinétique et de transport) qui rendent compte de l'ensemble des espèces les constituants (c'est-à-dire N_2^+ , N^+ , O_2^+ et O^+ pour le fluide d'ions positifs et O^- et O_2^- pour le fluide d'ions négatifs). Les données de base associées aux électrons et aux 2 fluides d'ions sont rappelées dans le Chapitre 1 (cf. § 1.4.1) et sont issues de la littérature [40] [37]. La photo-ionisation est prise en compte par l'ajout à chaque pas de temps d'un terme source constant dans l'équation de continuité des électrons et des ions positifs [29]. Quant aux phénomènes d'émission secondaire à la cathode, ils sont uniquement dus au bombardement ionique avec un coefficient d'émission γ égale à 0,01. Enfin, pour initialiser la densité des électrons et des ions positifs, on opte pour une distribution gaussienne (équation (e 3-13)) de valeur maximale $10^{19}m^{-3}$ et de valeur minimale 10^9m^{-3} (qui constitue un « fond continu » initial). La gaussienne a une largeur à mi-hauteur de 25 μ m et est placée sur l'axe à une distance de 0,8mm du plan. Pour les ions négatifs, on adopte une distribution uniforme de 10^9m^{-3} .

$n(x, y, z) = n^{max} \times e^{-\left(\frac{x^2+y^2+(z-z_0)^2}{2s_0^2}\right)}$	e 3-13
--	--------

Le domaine d'étude à un volume global de 2mm³. Le nombre de mailles de discrétisation vaut 180²×260 (soit ~8,4 Millions de mailles). L'axe z (discrétisé en 260 mailles) est aligné selon l'axe pointe-plan et la largeur dz des mailles dans cette direction est fixée à 5 μ m entre 0 (position du plan de masse) et 1,15mm puis s'élargit jusqu'au bord supérieur du domaine d'étude situé 2mm au-dessus du plan. Sur le plan xy (discrétisé en 180² mailles), la surface des mailles est de 4 μ m² sur une surface carrée totale de 200 μ m² centrée sur l'axe z. Au-delà de cette surface, les largeurs dx et dy augmentent progressivement jusqu'aux bords du domaine. Les conditions aux limites du potentiel sont fixes et les valeurs du potentiel sur les surfaces extérieures du domaine sont celles issues du calcul analytique dans le cas d'une configuration de pointe hyperbolique-plan [37]. Enfin, le nombre de cœurs utilisés est de 1000.

Les conditions de simulation sont résumées dans la Table 3-1.

Paramètres généraux	
Gaz	Air (N ₂ 80% et O ₂ 20%)
Température	20°C
Pression	101325Pa
Tension appliquée à l'anode	3kV (constant)
Espace inter-électrode	1mm
Pas temporel	~ 10 ⁻¹³ s (pour un CFL = 0,01)
Paramètres géométriques pour la pointe	
Rayon de courbure (rc) a ² /b	100µm
b	1mm
a	rc × b
Paramètres géométriques pour le maillage	
dz	5µm sur 1,15mm
dx = dy	4µm sur 200µm
Bornes du domaine Ω	2x2x2mm
Paramètres pour la forme gaussienne (e 4-1)	
$n_{i,j,k}^{max}$	10 ¹⁴ m ⁻³
S ₀	25µm
z ₀	800µm
Paramètres de transport (données de base)	Voir Annexe
Terme source secondaire en volume	10 ¹³ m ⁻³ (constant) ajouté à chaque itération
Bombardement des ions positifs sur la cathode métallique	γ = 0,01

Table 3-1: Conditions et paramètres du modèle

Pour confronter et valider les résultats 3D, ces mêmes conditions de simulation sont appliquées sur un code 2D à symétrie de révolution cylindrique.

3.4.3 Résultats

Tout d'abord, on propose une analyse qualitative des résultats. Pour ce faire, on assemble deux demi plans de coupe du domaine selon l'axe z (l'un extrait de la simulation 2D et un autre extrait de la simulation 3D) sur une même figure afin de pouvoir comparer visuellement les résultats. La norme du champ électrique réduit est représentée sur les Figure 3-15a, b et c respectivement aux temps $t = 1$ ns, 2ns et 3ns. La densité électronique est montrée sur les Figure 3-16a, b et c à ces mêmes instants.

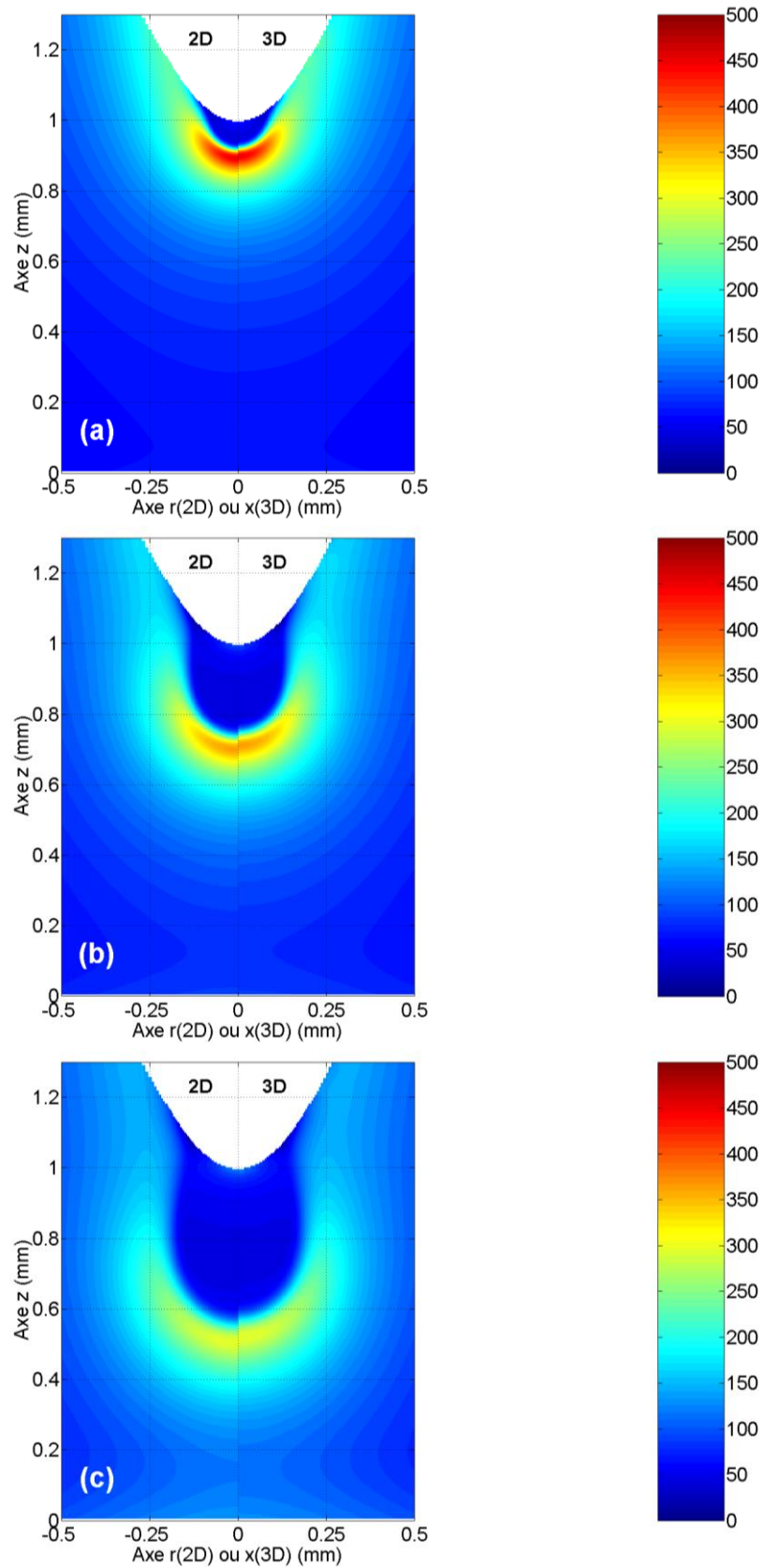


Figure 3-15: Visualisation de la norme du champ électrique exprimé en Td à $t = 1\text{ns}$ (a), 2ns (b) et 3ns (c)

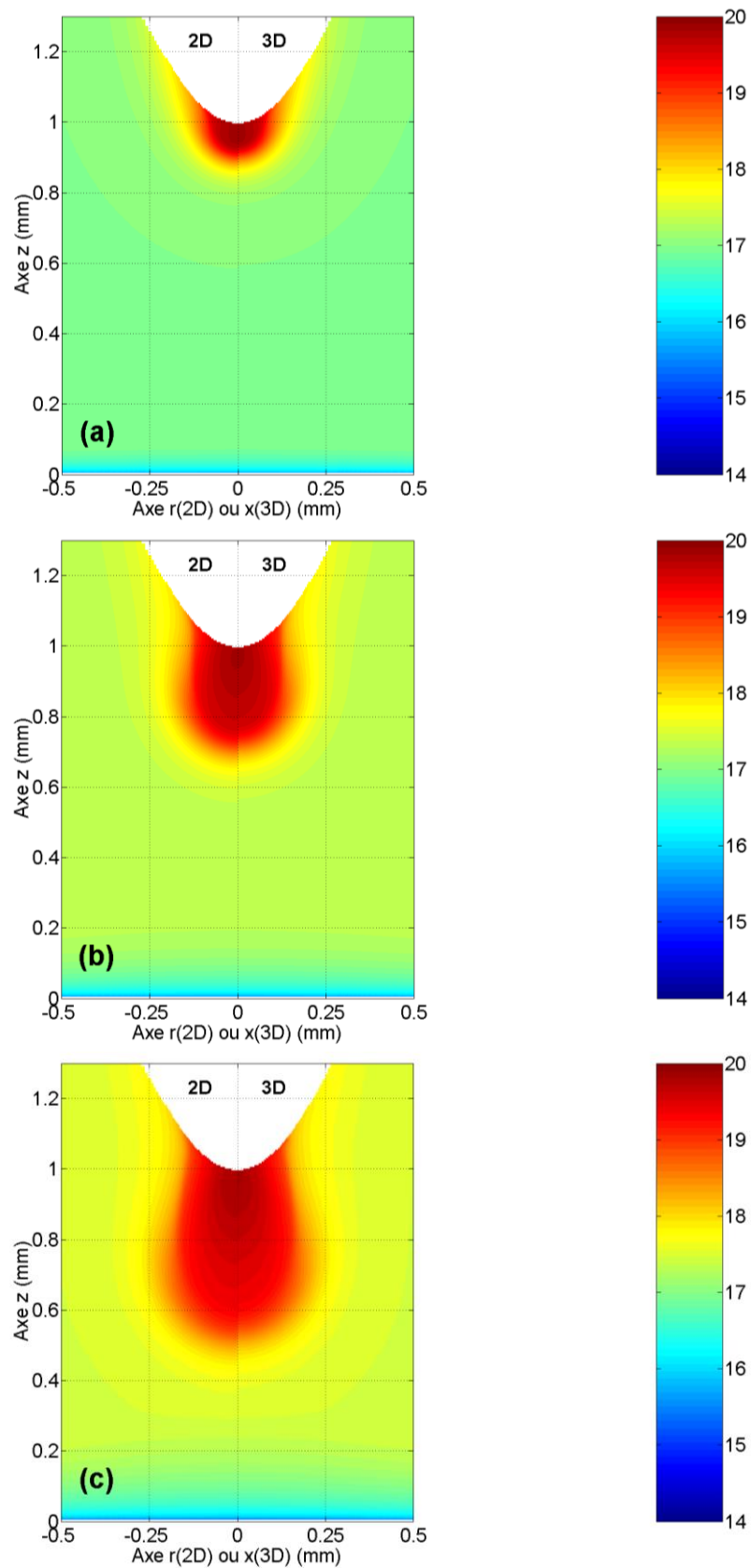


Figure 3-16: Visualisation de la densité électronique (en échelle log), exprimée en m^{-3} , à $t = 1\text{ns}$ (a), 2ns (b) et 3ns (c)

Les résultats obtenus montrent la structure classique d'un streamer positif qui se propage avec un fort champ électrique auto généré à l'avant du streamer par sa propre charge d'espace. On observe ainsi le déplacement d'un front d'onde d'ionisation (zone où le champ électrique local est suffisamment intense pour ioniser et exciter les molécules d'air). En amont du front d'ionisation, on distingue très clairement le canal ionisé laissé après le passage du front. Dans ce canal de conduction, la valeur du champ électrique est voisine de 25Td. Le canal du streamer est entouré par un champ électrique de charge d'espace élevé qui gaine son extension radiale. Le rayon du streamer mono-filamentaire est d'environ de 200 μm à $t = 3\text{ns}$.

Le champ maximum dans le front d'ionisation est égal à 450Td puis 300Td respectivement à 1 puis 3ns. Les résultats 2D et 3D sont cohérents et très similaires. On observe cependant un léger décalage sur le front d'onde du streamer. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer ce décalage. Si on encapsule par la pensée le domaine 2D dans le domaine 3D, on observerait un cylindre dont les surfaces latérales sont en contact avec les axes médians des bords latéraux du domaine cubique. Pour la simulation 2D, tout se passe comme si les conditions aux limites de l'équation de Poisson étaient sur la surface latérale du cylindre alors qu'en 3D, ces conditions sont placées sur les 4 plans latéraux du domaine cubique. Or l'équation de Poisson n'admet qu'une solution unique solution pour une géométrie et des conditions aux limites données. La géométrie du domaine et les conditions aux limites n'étant pas tout à fait identiques, cela peut influencer la solution lors du déplacement de la charge d'espace. Une deuxième explication peut venir de la forme des éléments de discrétisation. En effet, le domaine 2D est résolu avec une succession d'anneaux à section rectangulaire contrairement au domaine 3D, qui avec un maillage cartésien, est défini avec des éléments pavés. Il peut donc exister des échanges de flux entre des pavés contigus d'un plan horizontal même si la configuration physique admet une symétrie de révolution. Ces échanges latéraux ne sont pas possibles dans une configuration 2D. Pour limiter les écarts, il faudrait augmenter la résolution du maillage 3D pour également mieux définir la pointe. Toutefois, ce décalage selon l'axe z est de quelques micromètres et reste quasiment constant tout le long de la propagation dans l'espace inter-électrode.

La Figure 3-16 présente la structure de la densité électronique (en échelle logarithmique), toujours à 1ns, 2ns et 3ns. On note ici aussi la concordance globale des résultats. De manière générale, on observe que l'amplitude de la densité dans le canal ionisé est supérieure à 10^{19}m^{-3} sur une extension radiale d'environ 200 μm . En dehors du canal, la densité diminue rapidement. La densité électronique est maximum là où le champ électrique est le plus faible dans le canal ionisé montrant qu'un plasma filamentaire s'est formé. Ce plasma est gainé par une charge d'espace ionique qui entoure le canal de conduction. On peut noter que les résultats 3D présentés ont été obtenus après une durée de calcul de 1,54h sur 50 nœuds en mode compact (soit 1000 cœurs) pour 3ns de temps physique. Le temps CPU total dans ce cas est d'environ 1541,7h ($1,54\text{h}\times 1000$). Alors qu'en 2D le temps de calcul pour simuler 3ns de temps physique est de 8,5min sur 1 cœur donc un temps CPU total de 8,5min.

Une comparaison plus quantitative est rendue possible en traçant les données le long de l'axe de propagation de la décharge. La Figure 3-17 compare les profils des champs électriques issus des deux simulations (2D et 3D) à différents instants entre 0 et 3ns. On observe que les résultats se superposent quasiment. Le streamer 2D se propage en avance de phase par rapport au streamer 3D d'environ $20\mu\text{m}$. Ce décalage apparaît dès 1ns et se maintient jusqu'à 3ns. Malgré cet écart, l'amplitude du champ électrique au cours de la propagation du streamer est identique dans les deux configurations et est égale à 450Td environ à 1ns, et de l'ordre de 300Td à 3ns. Les courbes de la Figure 3-18 représentent l'évolution de la densité électronique dans l'espace inter-électrode entre 0 et 3ns.

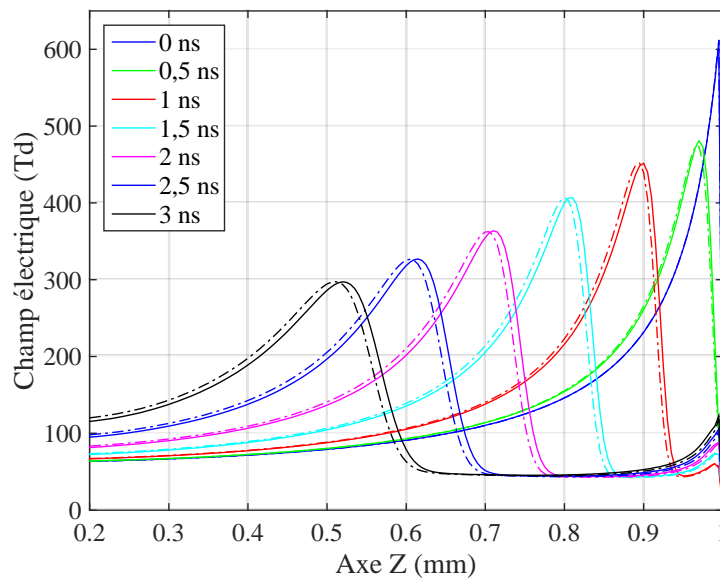


Figure 3-17: Profil du champ électrique en 1D selon l'axe z de 0ns à 3ns. Les courbes en trait plein correspondent à la simulation 3D, celles en pointillés correspondent au 2D.

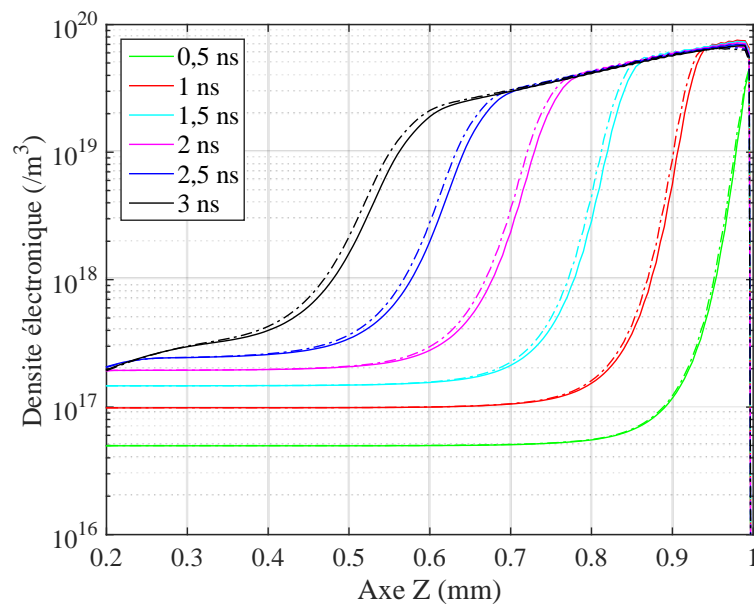


Figure 3-18: Profil de la densité électronique en 1D selon l'axe z de 0ns à 3ns. Les courbes en trait plein correspondent à la simulation 3D, celles en pointillés correspondent au 2D.

On constate ici au cours de la propagation du streamer la formation du canal ionisé. Le maximum de la densité électronique est égal à $7.10^{19}m^{-3}$. Ce maximum reste localisé au voisinage de la pointe, siège des fortes ionisations initiales avant la formation de la charge d'espace. On constate sur cette figure, l'augmentation de la densité en aval du streamer due à l'ajout d'un terme source constant dans les équations de continuité des électrons et des ions positifs pour modéliser l'effet de la photo-ionisation.

Analysons maintenant les formes de courants extraites des deux cas simulés. Le courant est déterminé à partir de l'équation de l'énergie donnée en e 3-14.

$V_a \times I = \int_{\tau} \vec{j} \cdot \vec{E} d\tau$	e 3-14
avec $\vec{j} = \vec{j}_c + \vec{j}_d$	
et $\vec{E} = \vec{E}_L + \vec{E}'$	

\vec{j} est le courant total, \vec{j}_c le courant de conduction et \vec{j}_d le courant de déplacement. Le vecteur champ électrique total est représenté par \vec{E} . \vec{E}_L est le vecteur solution de l'équation de Laplace (c'est-à-dire sans charge d'espace). \vec{E}' est le vecteur champ créé uniquement par la charge d'espace (c'est-à-dire qui satisfait l'équation de Poisson mais sans potentiel appliqué sur les électrodes).

Morrow et Sato ont montré que l'équation e 3-14 pouvait se réécrire selon l'équation e 3-15, où seule le champ laplacien intervient :

$V_a \times I = \int_{\tau} \vec{j}_c \cdot \vec{E}_L d\tau + \epsilon_0 \int_{\tau} \frac{\partial \vec{E}_L}{\partial t} \cdot \vec{E}_L d\tau$	e 3-15
---	--------

Dans notre cas, la tension appliquée sur la pointe est constante et il n'y a donc pas de variation du champ géométrique \vec{E}_L au cours du temps. De ce fait le dernier terme de l'équation e 3-15 est nul. Le calcul du courant dans notre programme est donc décrit par l'équation e 3-16 où j_{cx} , j_{cy} , et j_{cz} sont les composantes du courant de conduction. E_{Lx} , E_{Ly} et E_{Lz} représentent les composantes du champ géométrique (ou Laplacien) \vec{E}_L .

$V_a \times I = \iiint (j_{cx}E_{L_x} + j_{cy}E_{L_y} + j_{cz}E_{L_z}) dx dy dz$ $j_{cx} = \sum_{esp} n_{esp} \times q_{esp} \times v_{espx}$ $j_{cy} = \sum_{esp} n_{esp} \times q_{esp} \times v_{espy}$ $j_{cz} = \sum_{esp} n_{esp} \times q_{esp} \times v_{espz}$	e 3-16
---	--------

La Figure 3-19 montre les formes de courant obtenues dans le cas d'une simulation en 3D et 2D. Les courants sont légèrement plus élevés en 3D qu'en 2D. Les possibles causes de ces différences ont été explicitées précédemment en début de cette section. A $t = 3\text{ns}$, le courant est égal à 30,3mA pour le 2D et 33,2mA. Si l'on considère la simulation 2D comme référence, l'erreur relative est de 9,5% à $t = 3\text{ns}$.

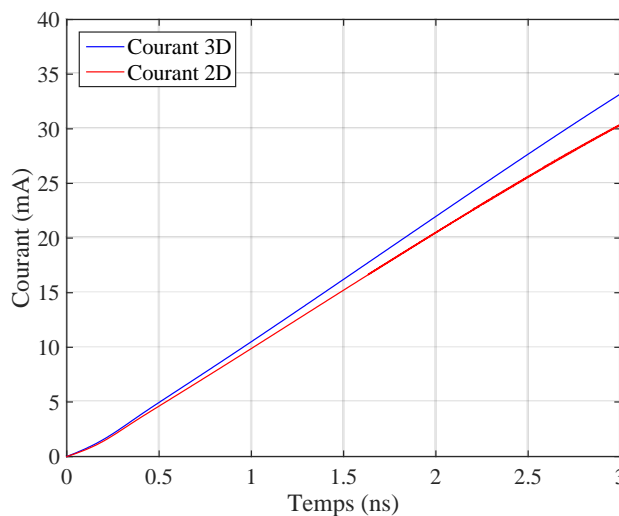


Figure 3-19: Courant de décharge de 0 à 3ns. La courbe en bleue est le courant obtenu avec la simulation en 3D, la courbe rouge est le courant extrait de la simulation 2D

3.5 Conclusion

La première partie de ce chapitre a été consacrée à l'étude de l'algorithme MUSCL permettant de résoudre les équations de transport. Le principe de l'algorithme a été expliqué et une campagne de tests a été effectuée pour valider ses performances dans plusieurs conditions contraignantes 3D de propagation d'un cube de densité sous vitesse homogène ou

oscillante. Ces tests, effectués en mode parallèle, ont permis d'extraire les paramètres les plus pertinents permettant de propager de forts gradients de densité en limitant le plus possible la diffusion et la dispersion numérique de la solution.

Sur la base de ces tests et des résultats obtenus dans le Chapitre 2 pour la résolution de l'équation de Poisson, un code 3D développé à l'aide de la bibliothèque MPI, a été conçu pour résoudre le modèle fluide d'ordre 1 complet de la décharge (couplant les équations de transport, de Poisson et de cinétique réactionnelle). Le comportement du code a été testé par la confrontation des résultats 3D et 2D dans une condition de simulation présentant une symétrie de révolution autour de l'axe de propagation d'un streamer mono-filamentaire. La comparaison d'une simulation 3D avec une simulation 2D a montré des résultats très similaires. Les différences observées peuvent trouver leur origine dans la définition spatiale de la pointe, les différences de structure entre le maillage 2D cylindrique et 3D et la différence de géométrie du domaine (cylindrique en 2D et cubique en 3D) qui influe que la position des conditions aux limites imposées pour la résolution de l'équation de Poisson

Toutefois, ces premières simulations 3D d'une décharge mono-filamentaire ont permis de valider le bon comportement du code 3D dans une configuration simplifiée. Il est intéressant maintenant d'exploiter la capacité du code 3D à simuler dans toutes les directions la propagation de plusieurs streamers. Ces simulations font l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4 Simulation 3D d'une décharge couronne dans une configuration pointe-plan en régime pulsé

4.1 Introduction

Ce chapitre présente les premiers résultats des simulations 3D de la phase décharge avec la propagation d'un ou plusieurs streamers (jusqu'à 4) dans une configuration pointe/plan sur des durées de plusieurs dizaines de nanosecondes et des distances de quelques millimètres. A notre connaissance et en s'appuyant sur l'état de l'art présenté dans le Chapitre 1, ce type de simulation n'a encore jamais été réalisé. Dans le cadre des modèles fluides, les simulations 3D ont été réalisées dans des configurations plan/plan sur quelques nanosecondes [30] [35] avec l'étude de la formation d'une ou deux ramifications. Seul Pancheshnyi [33] a montré l'amorçage de 4 streamers autour d'une pointe dans les tous premiers instants de leur propagation. Dans notre cas, le code 3D permet de suivre la structure arborescente de la décharge de la pointe jusqu'au plan.

La première section de ce chapitre décrit les conditions de simulation et les principales hypothèses physiques utilisées. La seconde section présente les résultats obtenus et compare le comportement des décharges en fonction du nombre de streamers générés.

4.2 Conditions de simulation

Le code 3D décrit précédemment au Chapitre 3 est maintenant appliqué aux conditions de simulation suivantes :

- Une pointe de type hyperbolique fait office d'anode portée à un potentiel constant de 2kV. La pointe hyperbolique a un rayon de courbure de $20\mu\text{m}$ (valeur proche du rayon de courbure des pointes expérimentales utilisées dans le groupe de recherche PRHE du LAPLACE).
- La cathode est un plan relié à la masse et distant de 1mm du bout de la pointe.
- Le gaz est de l'air à la pression atmosphérique et à la température ambiante.

Le domaine d'étude à un volume global de 2mm^3 et l'axe z se confond avec l'axe de révolution de la pointe hyperbolique. La décharge est modélisée à l'aide du modèle fluide d'ordre 1 (cf. § 1.4.1) avec l'approximation de dérive-diffusion et couplé avec l'équation de Poisson. Pour réduire le nombre d'espèces à prendre en compte, on considère les ions positifs et négatifs comme deux fluides ayant des comportements moyens (en termes de cinétique et de transport) qui rendent compte de l'ensemble des espèces les constituants (c'est-à-dire $N_4^+, N_2O_2^+, N_2^+, N^+, O_2^+, O^+$ pour le fluide d'ions positifs et O_2^-, O^- pour le fluide d'ions négatifs). Les données de base associées aux électrons et aux deux fluides d'ions sont rappelées dans le Chapitre 1 (cf. § 1.4.1) et sont issues de la littérature [40] [37]. La photo-

ionisation est prise en compte par le maintien à chaque instant d'un fond continu constant égale à 10^{17}m^{-3} . En effet, les travaux de Wormeester [65] ont montré qu'un fond continu inférieur à $10^{16} - 10^{17} \text{m}^{-3}$ n'avait pas d'influence sur la propagation d'un streamer 2D dans l'air lorsque la photo-ionisation était prise en compte. De plus, les résultats obtenus précédemment (cf. Chapitre 3 - Figure 3-18) ont montrés que le streamer s'amorce pour une densité électronique dans le milieu comprise entre $10^{16} - 10^{17} \text{m}^{-3}$. Cela sous-entend qu'un modèle précis de la photo-ionisation génère des densités d'électrons germes aussi élevés que $10^{16} - 10^{17} \text{m}^{-3}$ juste en aval de la tête d'un streamer là où le champ électrique est le plus élevé. Dans notre cas, nous avons choisi 10^{17}m^{-3} comme fond continu d'électrons représentatif des effets de la photo-ionisation car cette valeur permet d'obtenir des vitesses de propagation des streamers en adéquation avec les vitesses observées expérimentalement.

Dans notre modèle, les ramifications sont initiées par des spots plasmas répartis dans l'espace inter-électrode. Cette « technique » est la plus couramment utilisée dans la littérature [35] [30]. Les travaux de Dowds et al. [27], dont certains des résultats sont reportés sur la Figure 1-13 du Chapitre 1, montrent que la densité électronique dans les spots plasmas atteint 10^{19}m^{-3} quelques fractions de nanoseconde avant la formation des canaux ionisés. Ces mêmes résultats permettent d'estimer le diamètre spatial des spots sphériques à environ $50 \mu\text{m}$. Dans nos simulations, les spots plasmas sont modélisés par une distribution gaussienne d'équation (e 4-1), de valeur maximale 10^{19}m^{-3} , de largeur à mi-hauteur $25 \mu\text{m}$ et qui se superpose au fond continu.

$n(x, y, z) = n^{max} \times e^{-\left(\frac{x^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}{2s_0^2}\right)}$	e 4-1
--	-------

Dans le cadre de cette thèse, on étudie l'influence de un, deux et quatre spots plasma sur l'amorçage et la propagation de streamers. Afin de faciliter l'analyse et la lecture des résultats, les spots plasma sont tous positionnés sur un même plan contenant l'axe de la pointe (c'est-à-dire le plan défini par $x = 1 \text{mm}$). La Figure 4-1 montre la position des spots plasma sur une coupe selon ce plan yz (à $x = 1 \text{mm}$).

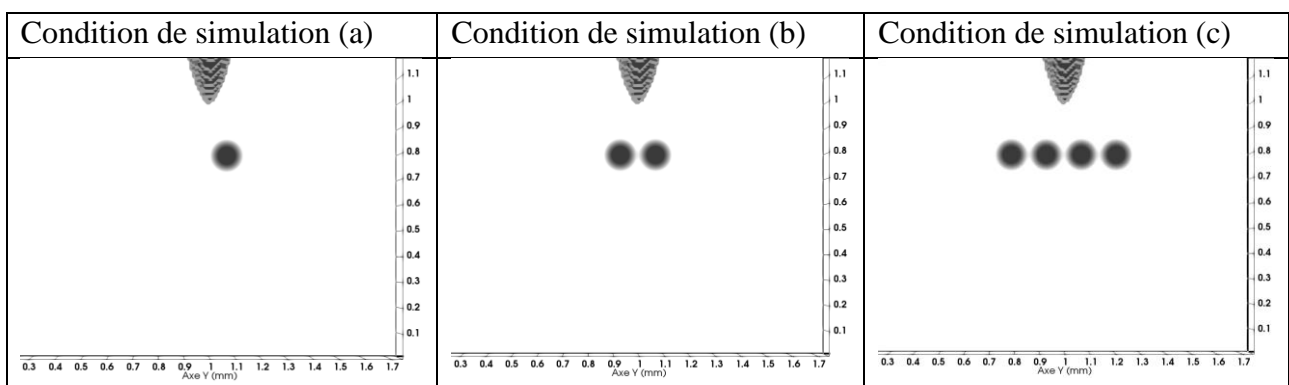


Figure 4-1: Positionnement des spots plasma dans l'espace inter-électrode.

Pour l'étude d'un seul streamer (cf. Figure 4-1a) le centre du spot plasma est placé à $z_0 = 0,8\text{mm}$ du plan de masse et décalé de $y_0 = 70,7\mu\text{m}$ de l'axe de la pointe. Sur la Figure 4-1b, on positionne un deuxième spot plasma décalé de $y_0 = -70,7\mu\text{m}$ par rapport à l'axe de la pointe (les 2 spots sont donc symétriques par rapport à l'axe de la pointe). Enfin, dans le cas de quatre spots plasma (cf. Figure 4-1c), on ajoute de part et d'autre des deux premiers spots, deux spots supplémentaires espacés centre à centre de $282,8\mu\text{m}$. Ces trois conditions de simulation sont respectivement notées (a), (b) et (c).

Le nombre de mailles de discrétisation vaut 400^3 (soit 64 Millions de mailles). Le domaine complet de 2mm^3 est ainsi discrétisé avec des éléments cubiques de $5\mu\text{m}$ de côté. Les conditions aux limites du potentiel sont stationnaires et les valeurs du potentiel sur les surfaces extérieures du domaine (hors pointe et électrode de masse) respectent les conditions de Neumann à dérivées nulles. Les conditions aux limites concernant les densités sont à dérivées nulles sur toutes les faces du domaine cubique. L'équation de Poisson est résolue par la méthode SOR R&B avec un critère de convergence fixé à 10^{-6} et les équations de conservation des électrons, des ions positifs et négatifs sont résolues avec la méthode MUSCL

Superbee avec un $CFL = 0,01$. Enfin, le nombre de cœurs de calcul utilisés est de 1000 en mode compact MPI. Les conditions de simulation sont résumées dans la Table 3-1.

Paramètres généraux	
Gaz	Air (N ₂ 80% et O ₂ 20%)
Température	20°C
Pression	101325Pa
Tension appliquée à l'anode	2kV (constant)
Espace inter-électrode	1mm
Pas temporel	$\sim 10^{-13}\text{s}$ (pour un $CFL = 0,01$)
Paramètres géométriques des électrodes	
Rayon de courbure de la pointe hyperbolique	20 μm
Distance inter-électrode	1mm
Paramètres géométriques pour le maillage	
$dz = dx = dy$	5 μm
Bornes du domaine Ω	2×2×2mm
Spot plasma gaussien (e 4-1)	
n^{max}	10^{19}m^{-3}
Largeur à mi-hauteur s_0	25 μm
Distance au plan z_0	800 μm
Distance à l'axe de la pointe y_0 (μm)	-141,4 / -70,7 / 70,7 / 141,7
Paramètres de transport et de cinétique	Voir Annexe
Photo-ionisation = Fond continu d'électrons	10^{17}m^{-3} (constant)

Table 4-1: Conditions et paramètres du modèle

4.3 Résultats

Cette section propose une analyse qualitative des résultats associés aux simulations avec un, deux ou quatre spots plasma. Afin de faciliter la lecture des résultats, on réalise une coupe du domaine 3D selon le plan yz en $x = 1\text{mm}$. Les cartographies de la densité électronique sont représentées sur la Figure 4-2, la Figure 4-4, la Figure 4-6 et la Figure 4-10 et celles de la norme du champ électrique réduit sur la Figure 4-3, la Figure 4-5, la Figure 4-7 et la Figure 4-11.

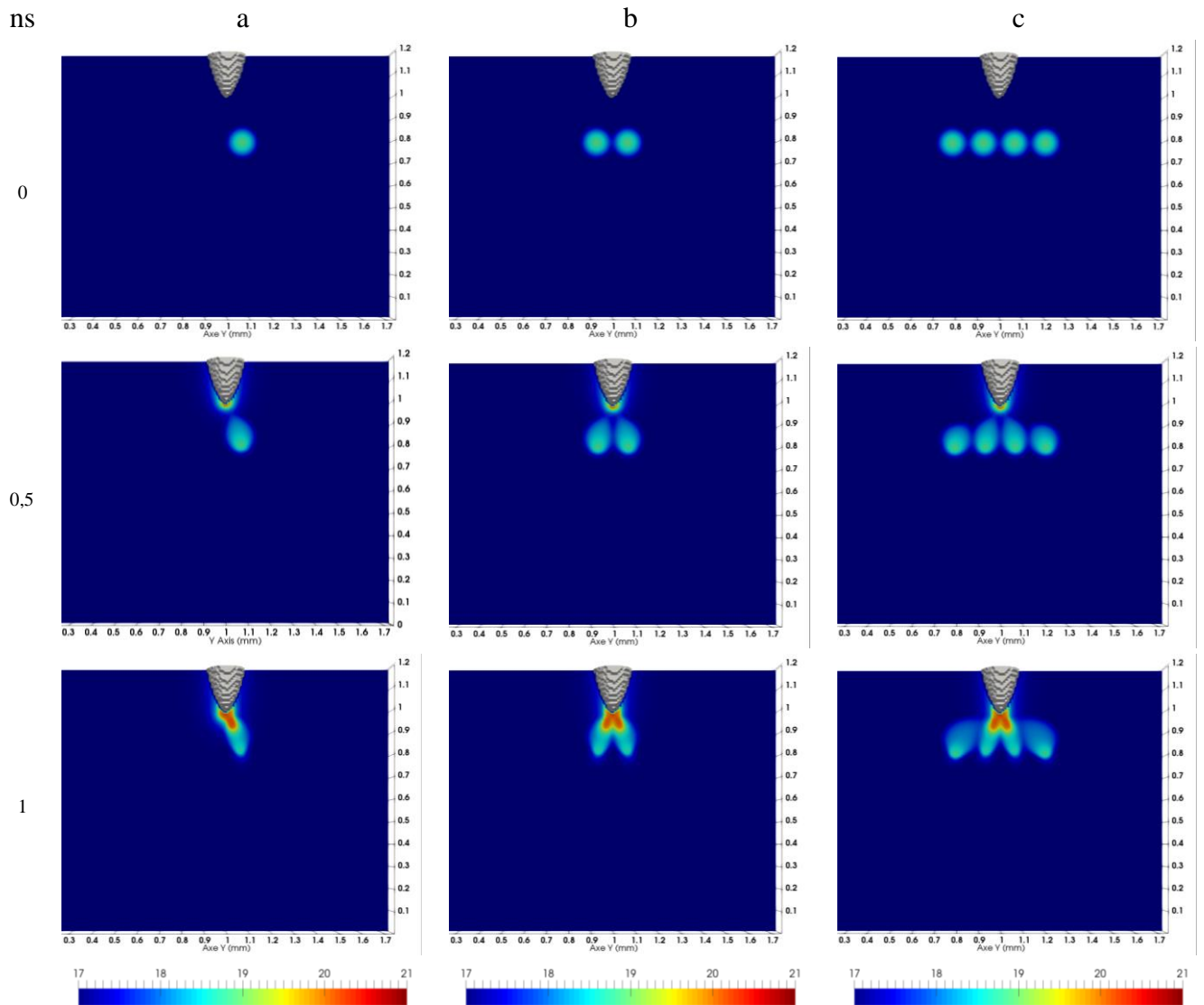


Figure 4-2: Densité électronique (m^{-3}) de 0 à 1ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale (échelle logarithmique)

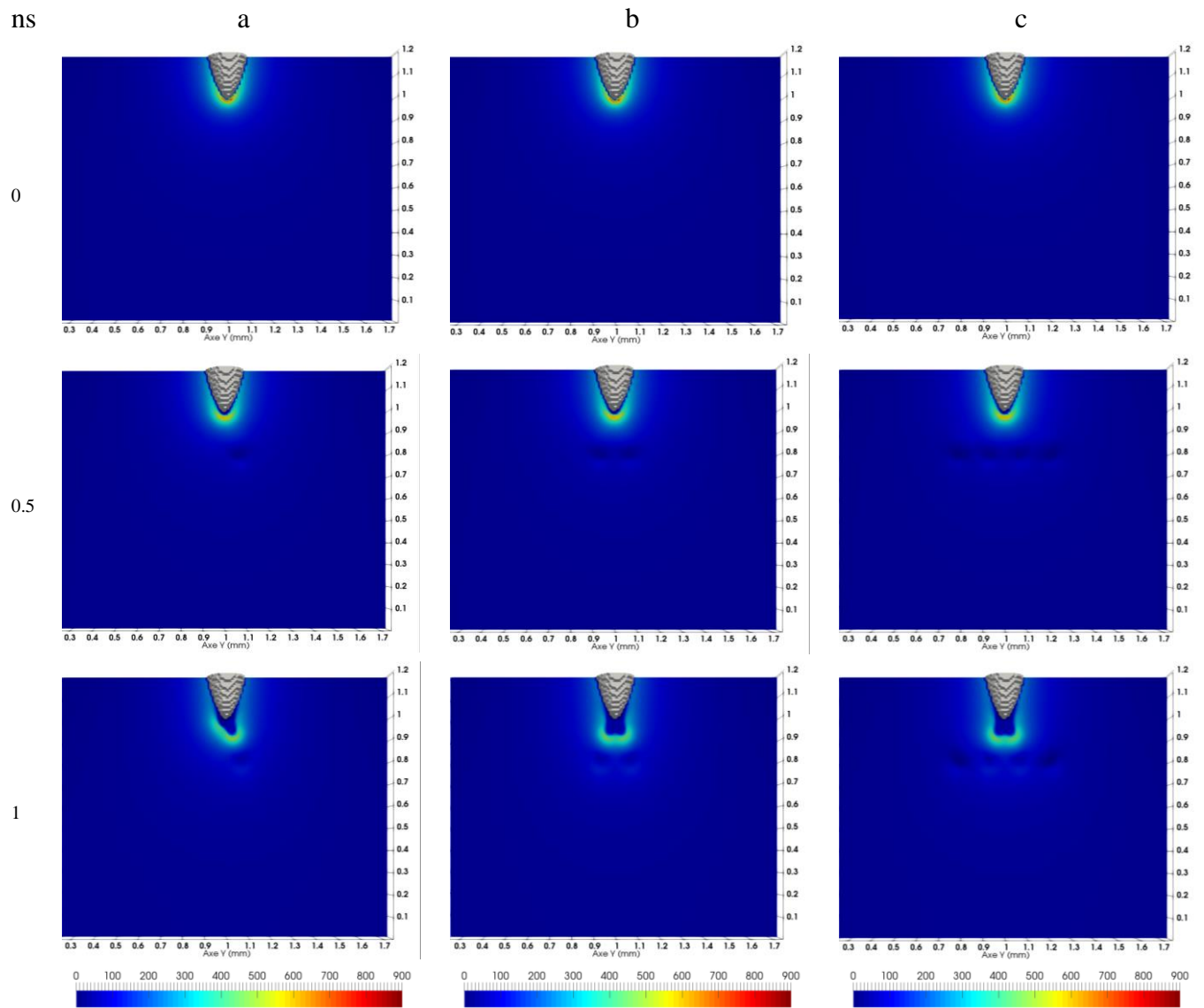


Figure 4-3: Champ électrique réduit (Td) de 0 à 1ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale

Ces figures comparent les trois conditions de simulation à différents instants de propagation avec un, deux ou quatre spots plasma respectivement indicés par les lettres *a*, *b*, et *c*. Cette première analyse est ensuite complétée par l'étude de grandeurs physiques telles que la distance parcourue par les streamers, leur vitesse et par la comparaison des courants de décharge.

Commençons par l'analyse des cartographies. La Figure 4-2 montre la densité électronique de 0 à 1ns. L'échelle indiquée représente la densité électronique en échelle logarithmique sur quatre décades (10^{17} à 10^{21}m^{-3}). La Figure 4-3 présente la norme du champ électrique réduit de 0 à 1ns. Sur la Figure 4-2, à l'instant $t = 0\text{ns}$, on observe les spots de densité électronique correspondant aux spots plasma initiaux. Le champ électrique (cf. Figure 4-3) correspond à cet instant au champ électrique géométrique avec un maximum au voisinage de la pointe d'environ 850Td. En effet, les spots plasma renferment autant d'espèces chargées positives que négatives ce qui entraîne une densité de charge d'espace nulle. Dans les trois cas (*a*, *b*, et *c*), à $t = 0,5\text{ns}$, une avalanche électronique se produit au bout de la pointe due à la présence du fort champ électrique et au fond continu initial de densité électronique. La densité électronique dépasse 10^{20}m^{-3} au bout de la pointe comme l'indique la couleur rouge-orangé sur la Figure 4-2 à 0,5ns dans les trois conditions de simulation.

L'accumulation d'électrons et d'ions au bout de la pointe modifie le champ électrique qui diminue au bout de la pointe jusqu'à environ 720Td. De plus, à partir des spots plasma, on observe des germes d'électrons qui dérivent vers la pointe en suivant les lignes de champ électrique (cf. Figure 4-2). Ce mouvement d'électrons laisse derrière lui un excédent d'ions positifs qui génère une charge d'espace positive qui elle-même affecte localement le champ électrique (cf. Figure 4-3 à 0,5ns).

Sur la Figure 4-2, entre 0,5 et 1ns, les nuages électroniques qui dérivent à partir des spots plasma se rapprochent de la zone de fort champ autour de la pointe. Les canaux de conduction préformés sont alors le siège d'une importante ionisation conduisant à la formation d'avalanches électroniques. Des charges d'espace se forment qui dévient le front d'ionisation dans la direction des canaux de conduction laissés derrière eux par les nuages électroniques issus des spots initiaux. Ainsi à 1ns, on remarque sur la Figure 4-2 et la Figure 4-3, l'apparition de canaux ionisés dirigés vers les spots initiaux. Dans ces canaux, le champ électrique est de l'ordre de la vingtaine de Townsend et la densité électronique y est supérieure à 10^{20}m^{-3} traduisant la formation de filaments de plasma hors-équilibre c'est-à-dire de streamers. Chacun des streamers formés est entouré par un champ électrique de charge d'espace élevé qui gaine leur extension radiale. Le fort champ électrique initialement localisé autour de la pointe est ramené à l'avant du/des streamer(s). A cet instant, les canaux ionisés sont issus des deux spots les plus proches de l'axe pointe/plan (cf. Figure 4-2c et Figure 4-3c). Concernant les deux spots les plus extérieurs sur la Figure 4-2c et sur la Figure 4-3c, on observe juste le déplacement d'un nuage électronique mais pas la formation de canaux ionisés à $t = 1\text{ns}$.

La Figure 4-4 et la Figure 4-5 montrent respectivement la densité électronique et le champ électrique réduit de 1,5ns à 3ns. Entre 1,5 et 2ns et pour les conditions de simulation (a) et (b) (c'est-à-dire avec 1 ou 2 spots initiaux), les streamers continuent de se propager dans les canaux pré-ionisés (cf. Figure 4-4a, Figure 4-4b, Figure 4-5a et Figure 4-5b). Sur ces mêmes figures à 3ns, les streamers dépassent l'emplacement des spots initiaux de plasma et continuent leur propagation dans le fond continu d'électrons. Ils se propagent grâce au fort champ électrique auto généré à l'avant des streamers par leur propre charge d'espace (cf. Figure 4-5a et Figure 4-5b).

Avec 4 spots initiaux de plasma (cf. Figure 4-4c et Figure 4-5c), les 2 streamers initiaux subissent chacun un processus de ramification. Entre 1,5 et 2ns, l'apport d'électrons en provenance des 2 spots de plasma les plus excentrés, perturbe la charge d'espace qui gaine les canaux ionisés des 2 premiers streamers. Cette perturbation est suffisante pour engendrer, à partir des 2 streamers initiaux, 2 nouvelles ondes d'ionisation dont la propagation est initialement guidée par les canaux d'électrons préformés et issus des 2 spots les plus excentrés. Ainsi, à 3ns, on distingue clairement 4 canaux de conduction (Figure 4-4c) à l'avant desquels se propagent 4 ondes d'ionisation caractérisées par un fort champ électrique local (Figure 4-5c).

Analysons maintenant le comportement des streamers lors de leur propagation jusqu'au plan cathodique. La Figure 4-6 et la Figure 4-7 représentent respectivement la densité électronique et le champ électrique réduit de 4ns à 10ns. Afin de faciliter l'estimation du champ électrique réduit, l'échelle des couleurs a été modifiée et est désormais comprise entre 0 et 400Td sur la Figure 4-7. D'une manière générale, les streamers poursuivent leur cheminement vers le plan de masse.

Toutefois, on remarque une différence de vitesse de propagation des streamers dans les trois cas. Le streamer unique généré par un seul spot plasma est clairement plus rapide (cf. Figure 4-6a et Figure 4-7a). Il possède également un diamètre plus important qu'avec deux streamers (Figure 4-6b) ou quatre (Figure 4-6c) streamers qui se propagent simultanément. On observe à l'évidence un phénomène d'interaction entre streamers. Sur la Figure 4-6b et la Figure 4-7b (c'est-à-dire dans le cas de 2 streamers se propageant simultanément), on constate un effet de répulsion qui est lié au fait que les ondes d'ionisation à l'avant de chaque streamer transportent une charge d'espace positive.

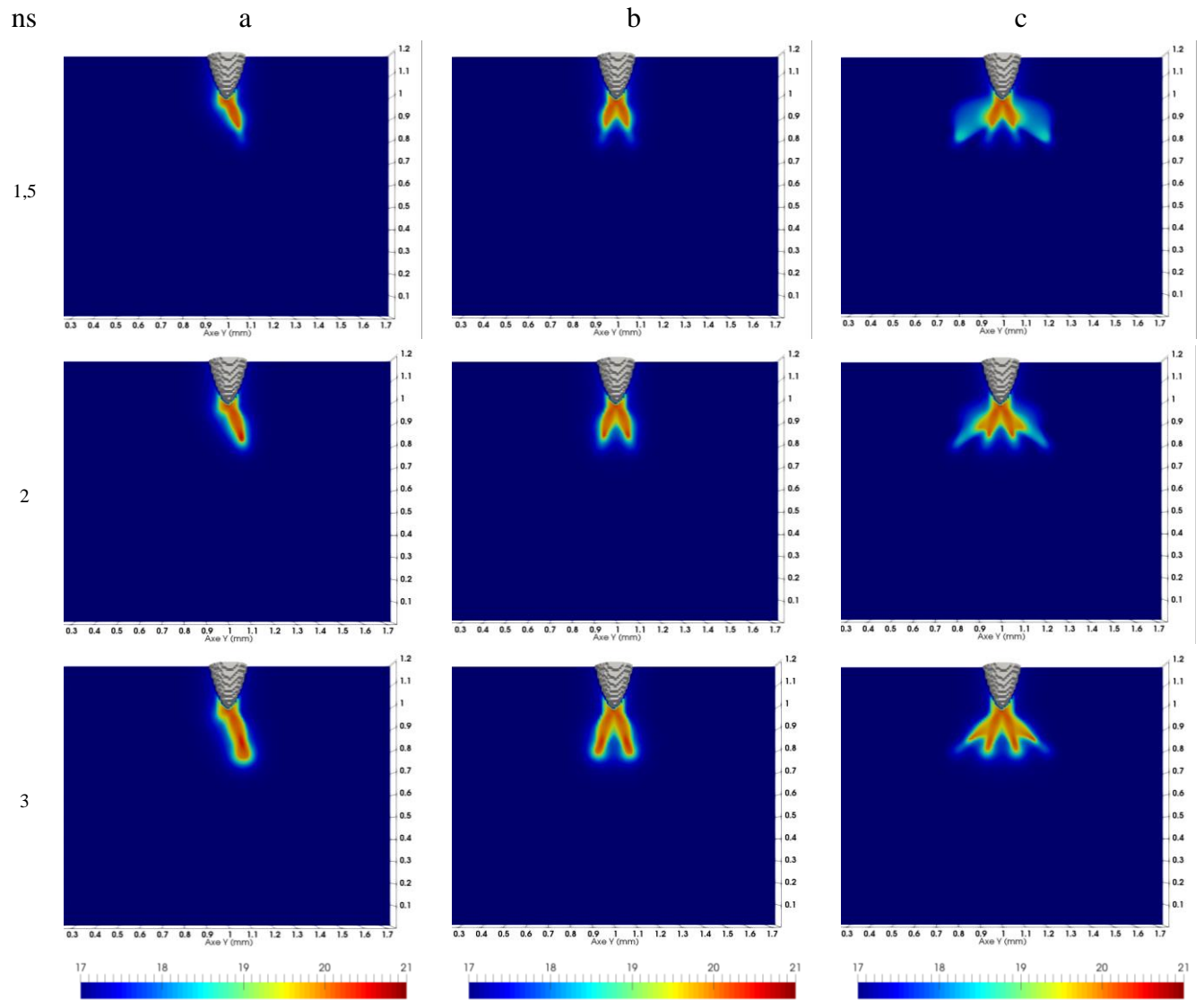


Figure 4-4: Densité électronique (m^{-3}) de 1,5 à 3ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale (échelle logarithmique)

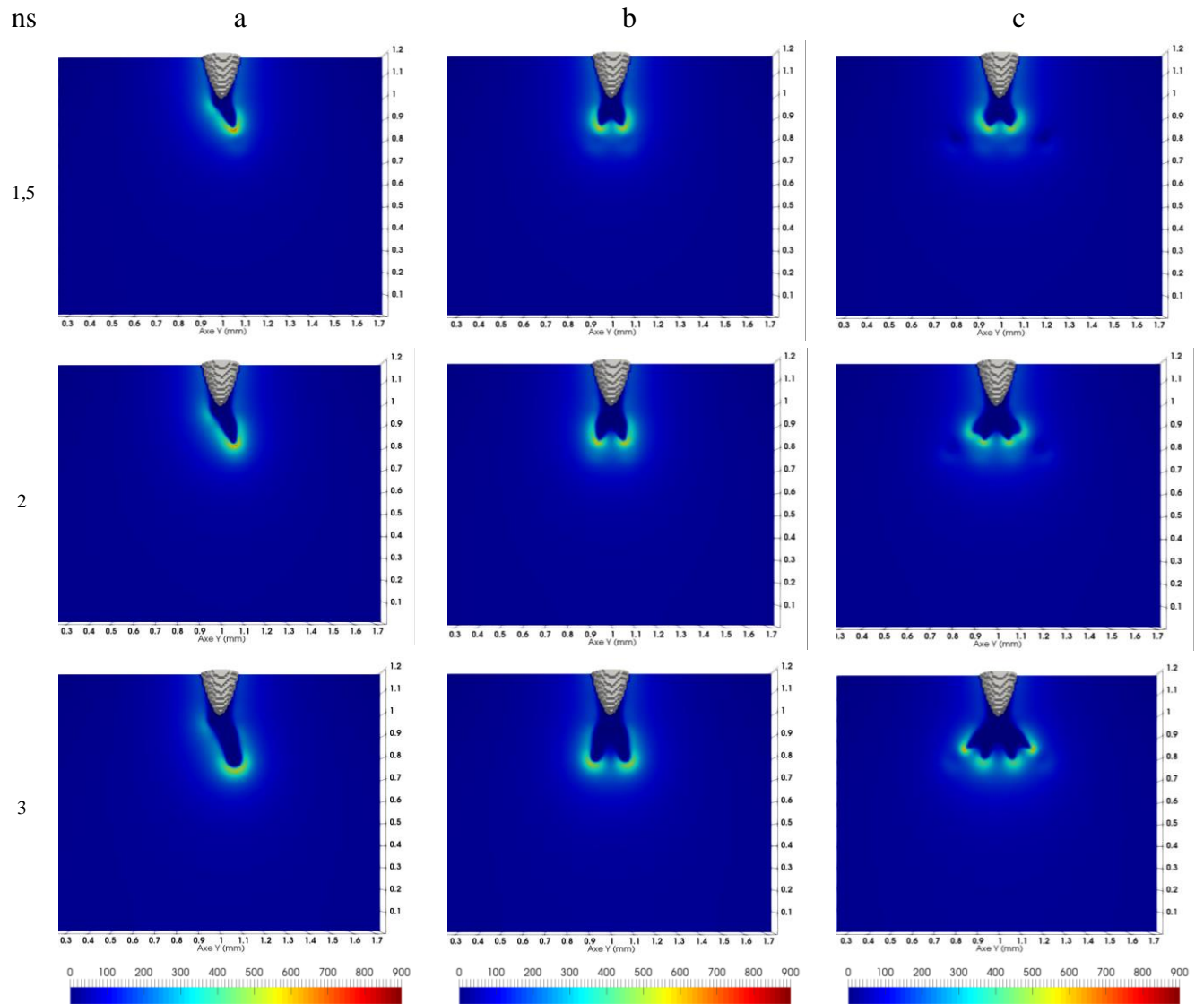


Figure 4-5: Champ électrique réduit (Td) de 1,5 à 3ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale

Sur la Figure 4-6c et la Figure 4-7c, avec 4 streamers, le même effet de répulsion existe entre les deux streamers intérieurs mais il est moins flagrant à cause de la présence des deux streamers extérieurs qui exercent également le même phénomène de répulsion. Les deux streamers extérieurs ont toutefois tendance à s'écarter de plus en plus de l'axe pointe-plan au cours de leur propagation.

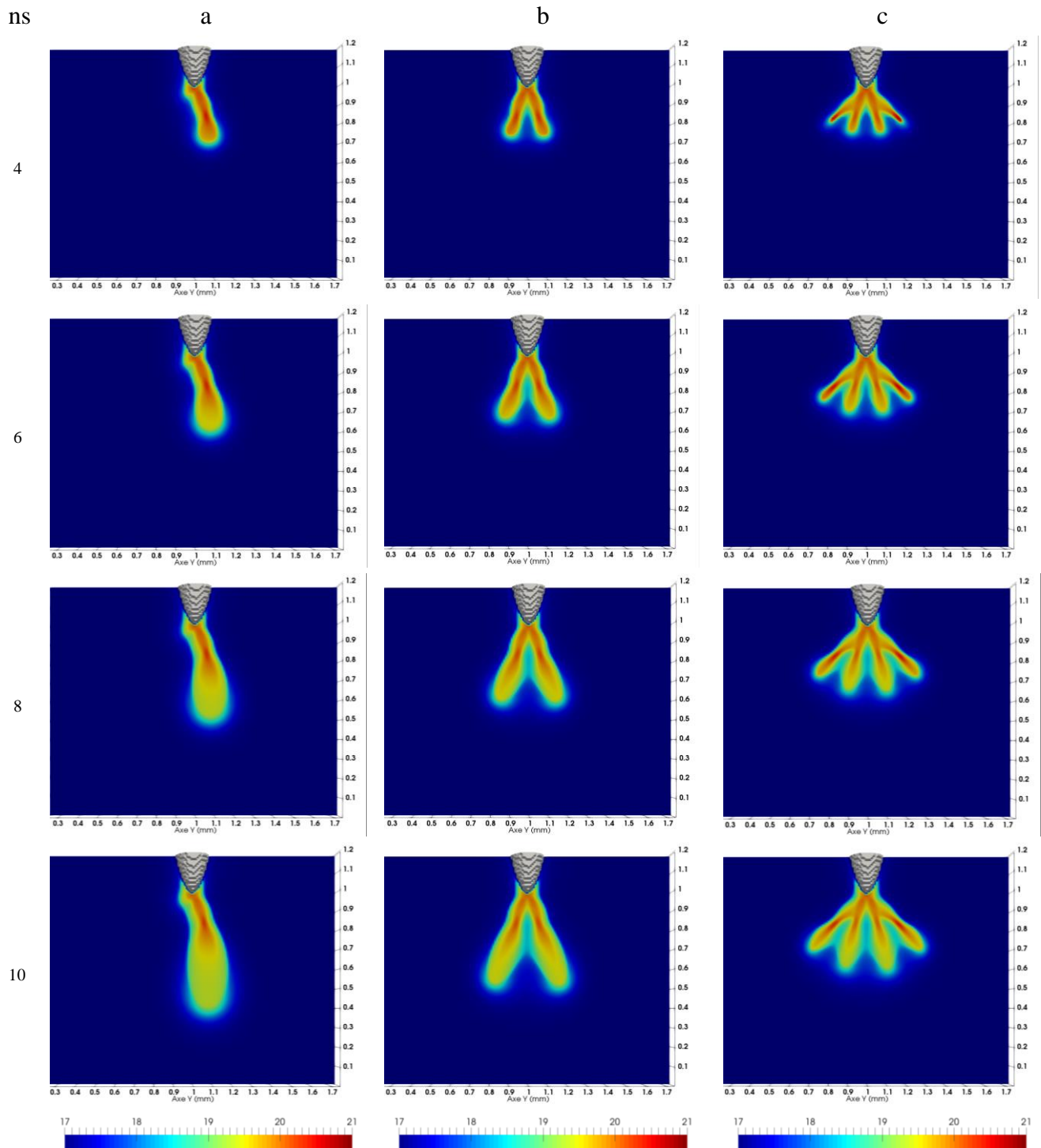


Figure 4-6: Densité électronique (m^{-3}) de 4 à 10ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale (échelle logarithmique)

Globalement, l'onde d'ionisation d'un streamer seul (Figure 4-6a et Figure 4-7a) n'est pas contrainte et s'étend librement. Dans le cas de 2 ou 4 streamers (cas b et c sur ces mêmes Figures), les ondes d'ionisation interagissent entre elles car elles transportent toutes des charges d'espace positive exerçant l'une sur l'autre une force de répulsion.

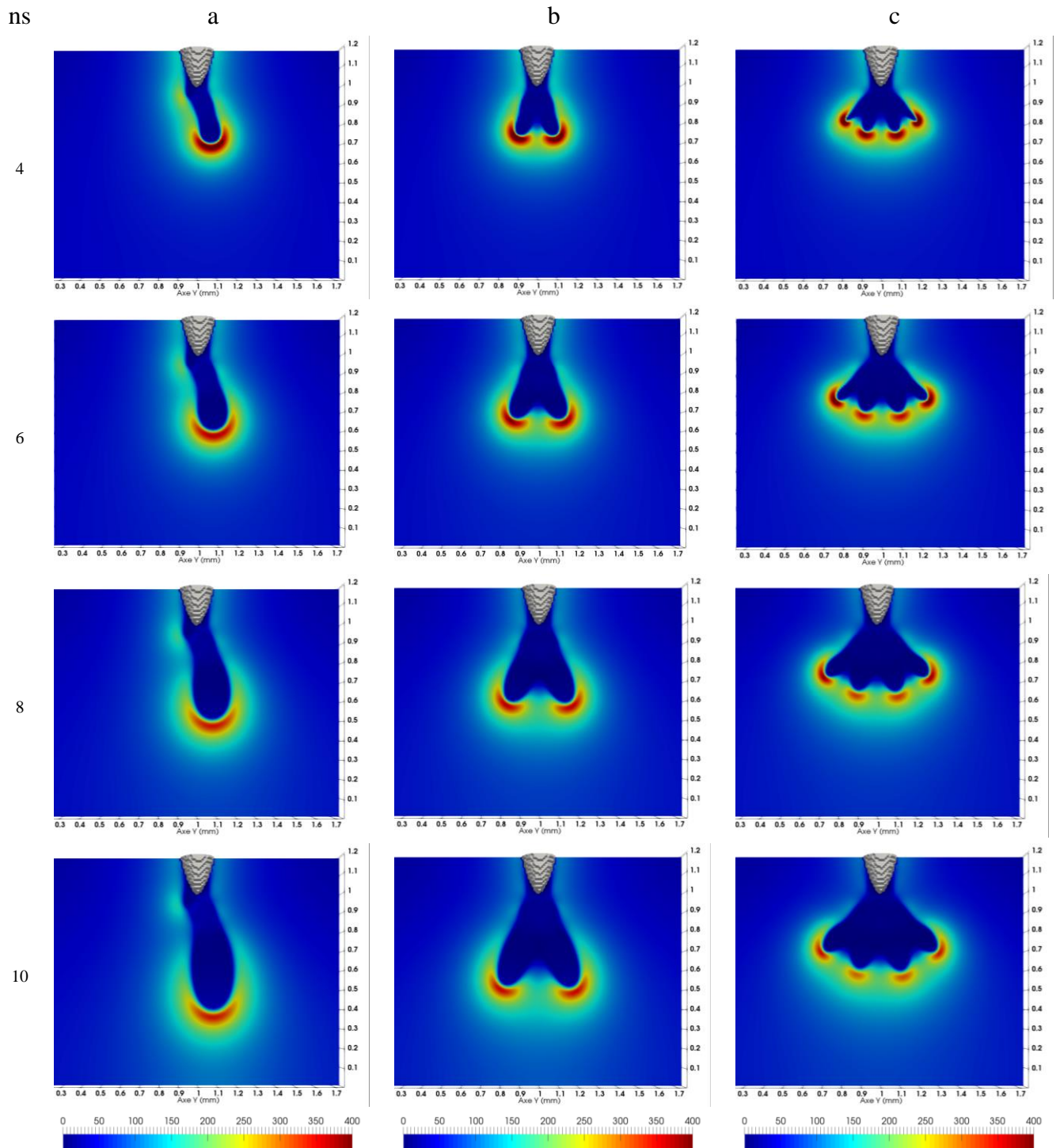


Figure 4-7: Champ électrique réduit (Td) de 4 à 10ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale

Les derniers instants de la propagation sont représentés sur la Figure 4-10 et la Figure 4-11 entre 12ns et 20ns. L'échelle des valeurs du champ électrique réduit sur la Figure 4-11 est toujours comprise entre 0 et 400Td pour faciliter la lecture des résultats. La différence de vitesse des streamers dans les 3 conditions de simulation apparait très clairement. Dans le cas (a), le streamer atteint le plan aux alentours de 14ns (voir la Figure 4-10a et la Figure 4-11a au temps correspondant). Dans le cas (b), les 2 streamers atteignent quasi-simultanément le plan vers 16ns, alors que 1 seul streamer atteint le plan au bout de 20ns dans le cas (c). Il est étonnant de constater qu'entre 12 et 20ns, une dissymétrie apparait dans le développement de la décharge pour 2 ou 4 streamers. Cette dissymétrie est évidente dans le cas (c) avec une propagation clairement plus rapide du premier streamer à droite de l'axe pointe-plan (voir Figure 4-10b) et est plus atténuée dans le cas (c) lorsque seulement 2 streamers se propagent simultanément. Nous n'avons pas encore d'explications claires à ce phénomène qui ne semble pas physique puisque les spots initiaux de plasma sont eux parfaitement symétriques. Ce phénomène n'est pas lié à un artéfact visuel de la lecture dans un plan 2D d'un phénomène 3D où l'on pourrait penser que certains streamers « vrillent » et quittent le plan initial de propagation. Ceci est vérifié sur la Figure 4-8 qui montre clairement, par l'affichage d'une iso-valeur de la densité électronique, que les 4 streamers restent parfaitement coplanaires. Une hypothèse plausible, mais qui reste à vérifier, concerne la forme discrétisée de la pointe qui n'est peut-être pas parfaitement axisymétrique. En effet, cette dernière est modélisée sur un maillage cubique et certains cubes lors de la discrétisation appartiennent ou non à la pointe en fonction de sa forme mathématique. Si quelques cubes aux frontières de la forme réelle basculent de l'électrode vers le gaz ou inversement cela peut générer quelques différences mineures lors de l'amorçage des streamers qui s'accroissent au fur et à mesure de la propagation. Dans tous les cas, des tests préliminaires pour améliorer la définition de la pointe selon l'axe z ont montrés une légère amélioration dans la propagation symétrique des streamers. Ces tests vont devoir se poursuivre dans les directions x et y. Cependant, ce défaut « numérique » pourrait être maintenu dans le cas d'une répartition totalement aléatoire des spots initiaux de plasma pour introduire une statistique supplémentaire dans l'extension de la décharge.

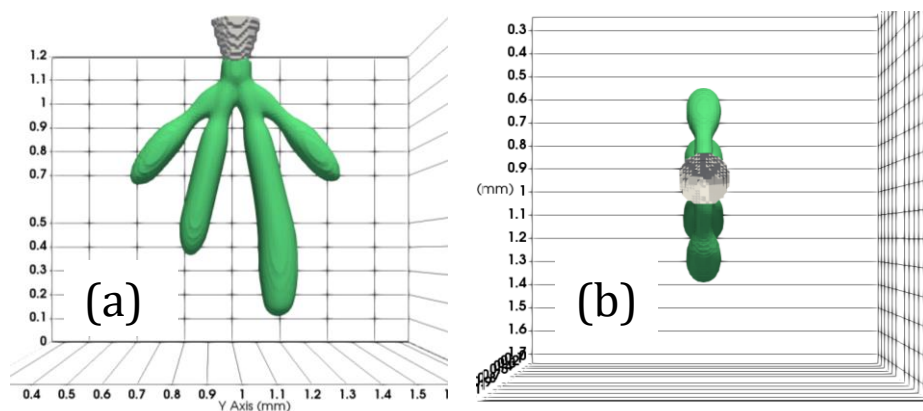


Figure 4-8: Iso-surface de la densité électronique à 18ns pour une valeur égale à 10^{19}m^{-3} lors de la propagation de 4 streamers. (a) Vue selon le plan vertical yk . (b) Vue de dessus selon le plan xy

Sur la Figure 4-10a, entre 12 et 14ns, le streamer est arrivé sur le plan de masse. On constate à 14ns une augmentation de la densité des électrons au niveau du plan (Figure 4-10a) et la disparition du champ électrique de charge d'espace qui a été absorbé par le plan (cf. Figure 4-11a). On peut signaler que pour faciliter « l'accrochage » des streamers à leur arrivée sur la cathode, nous avons rajouté une émission secondaire sur toute la surface de la cathode qui s'active lorsque le/les streamers sont suffisamment proches du plan. Cette émission homogène se surajoute au fond continu déjà élevé. Les électrons émis dérivent ensuite vers la pointe ce qui explique l'augmentation du fond continu d'électrons dans l'espace inter-électrode (voir la Figure 4-10a entre 14 et 20ns et la Figure 4-10b entre 16 et 18ns). On peut également remarquer dans les cas (a) et (b) que lorsque les streamers rentrent en contact avec la cathode, le champ électrique autour de la pointe augmente et s'étend dans les canaux ionisés de la pointe vers le plan. Ceci s'observe sur la Figure 4-11a entre 14 et 20ns et sur la Figure 4-11b entre 16 et 20ns. Ce phénomène est typique de l'extension des secondary streamers également observé en régime mono-filamentaire [18].

Sur la Figure 4-9, il est également intéressant de constater que malgré les phénomènes complexes et auto-cohérents qui gèrent la propagation des ondes d'ionisation (transport d'une charge d'espace positive sous l'effet de son propre champ) les chemins parcourus par les streamers restent tout de même très influencés par les lignes de champ électrique géométrique (c'est-à-dire issu du champ Laplacien sans la présence des charges d'espace). Ce phénomène a également été observé expérimentalement [2].

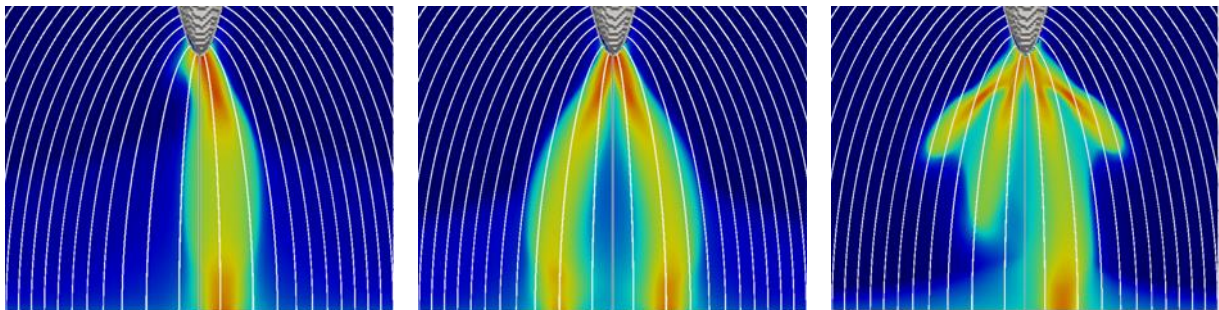


Figure 4-9: Lignes de champ électrique géométrique et chemins parcourus par les streamers à 20ns.

Afin d'approfondir l'analyse de la propagation des streamers et d'apporter des éléments plus quantitatifs, nous avons utilisé un logiciel de traitement d'image (nommé Fiji ImageJ [66]) pour extraire à partir des cartographies précédentes : l'éloignement des streamers par rapport à l'axe pointe/plan, la distance parcourue par les streamers en fonction du temps et leur vitesse de propagation.

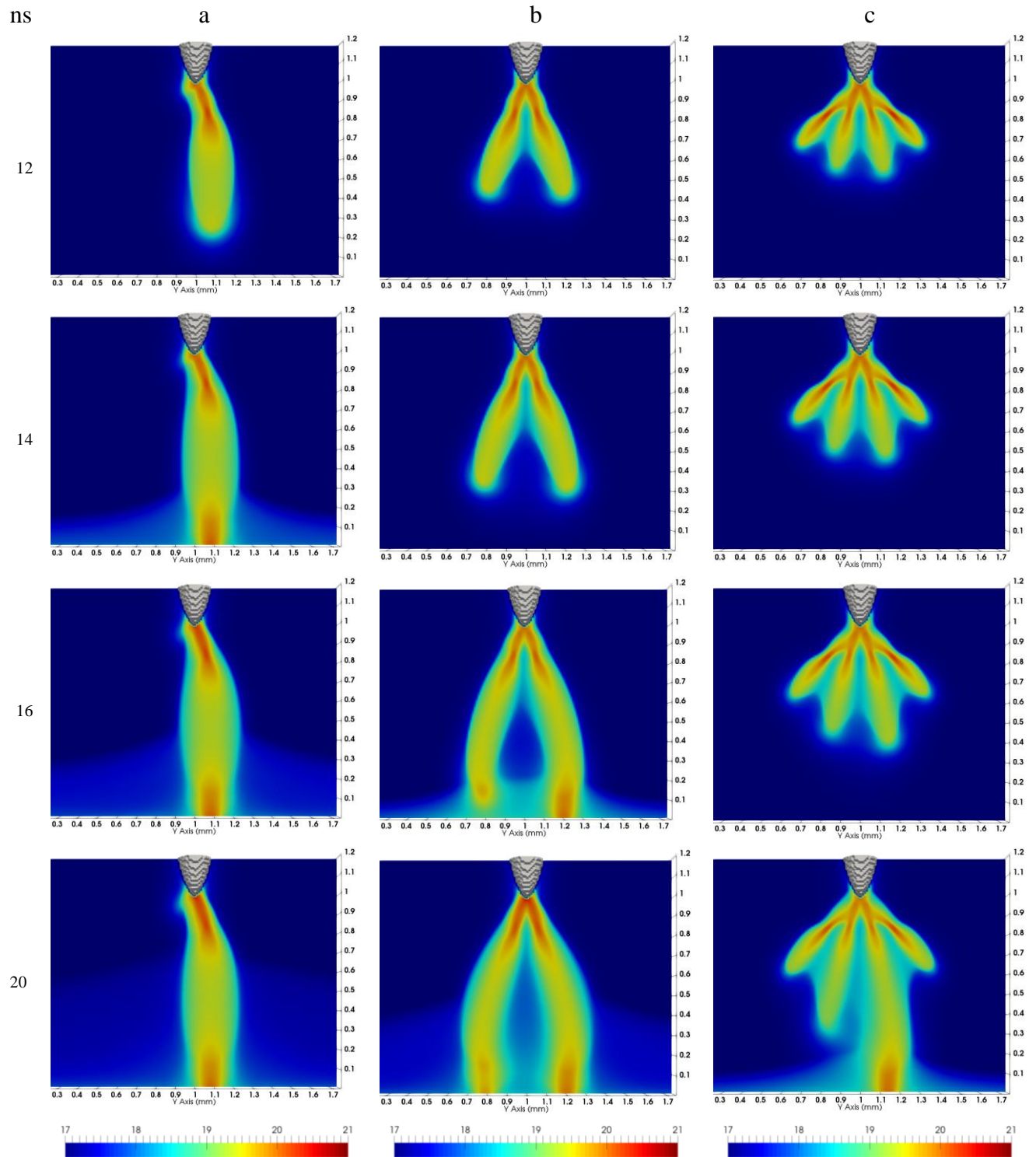


Figure 4-10: Densité électronique (m^{-3}) de 12 à 20ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale (échelle logarithmique)

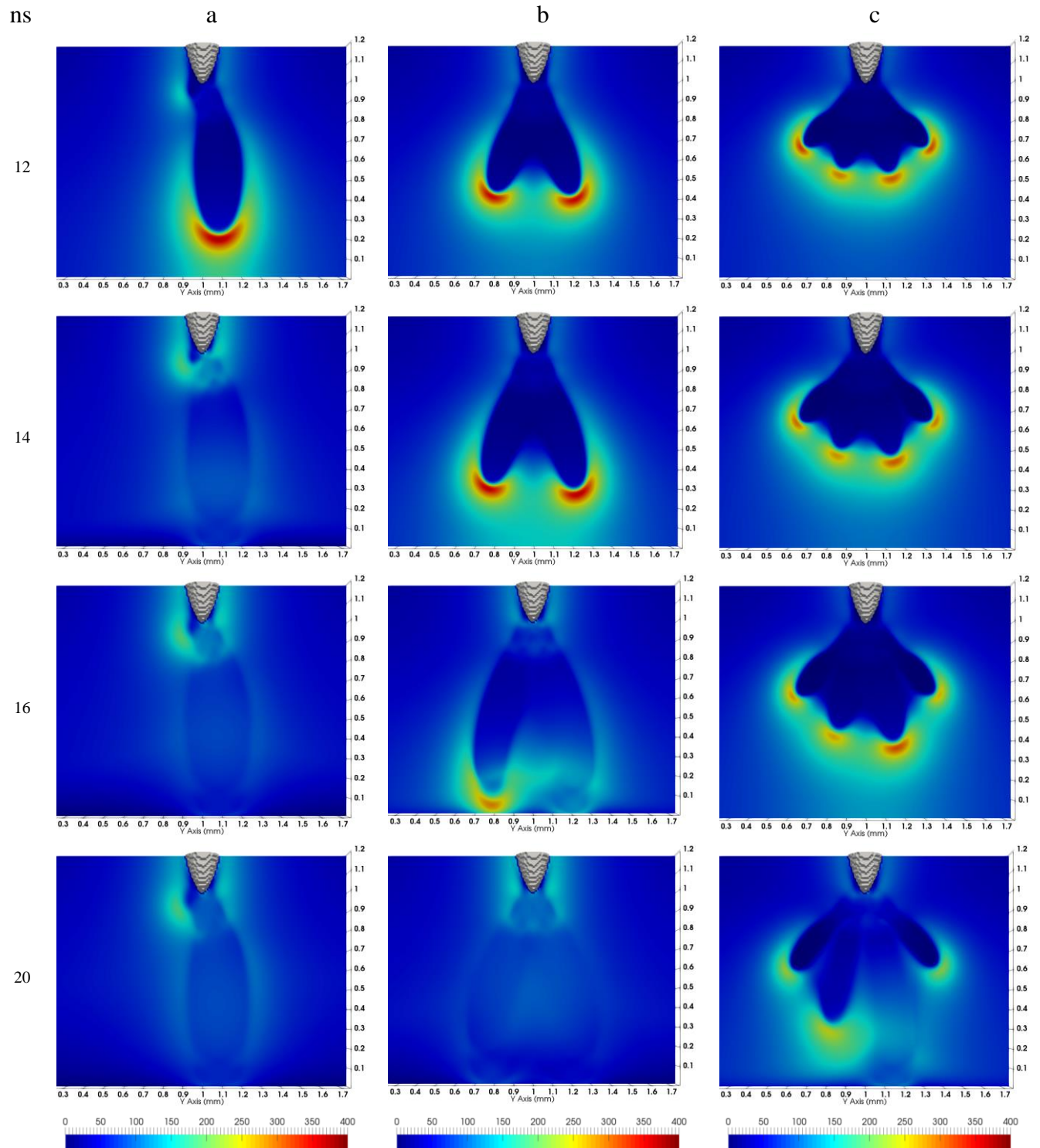


Figure 4-11: Champ électrique réduit (Td) de 12 à 20ns avec (a) un, (b) deux, (c) quatre spots plasma en condition initiale

Un exemple de mesure sur un streamer est donné Figure 4-12. Les mesures se font en deux points indiqués par une croix rouge sur la Figure 4-12. Un point à partir du bout de la pointe et un autre situé juste à l'arrière du front d'ionisation. On obtient ainsi deux distances Dz_t et Dy_t à chaque instant permettant de calculer les grandeurs choisies. La valeur Dy_t représente l'écart entre le bout de la tête du canal ionisé et l'axe pointe/plan. Les mesures sont prises pour chacun des cas jusqu'à l'arrivée du streamer étudié sur la cathode, c'est à dire à $t = 13\text{ns}$ pour le cas (a), $t = 16\text{ns}$ pour le cas (b) et $t = 19\text{ns}$ pour le cas (c).

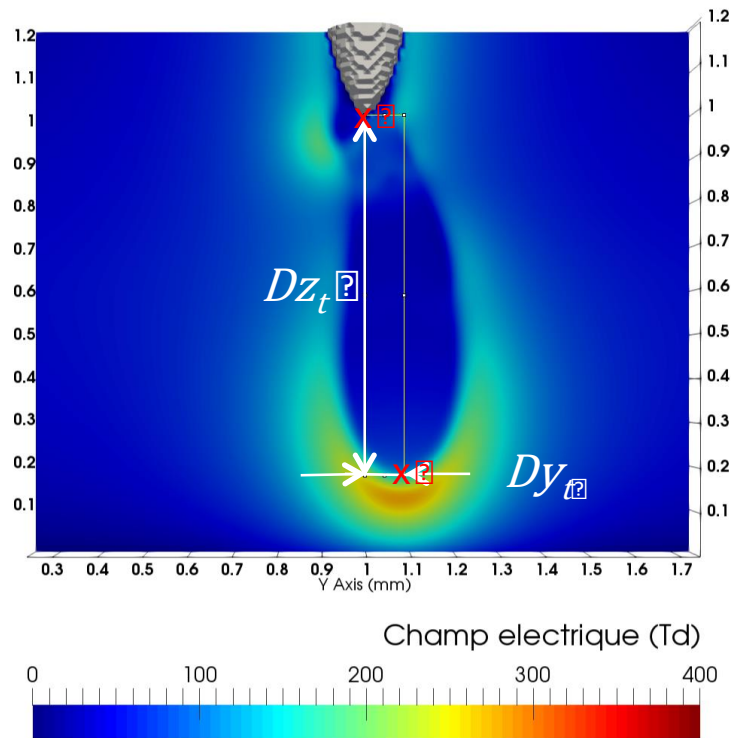


Figure 4-12: Exemple de mesure sur le logiciel Fiji ImageJ à un instant t donné

Dans les trois cas, (a) pour 1 streamer, (b) pour 2 streamers et (c) pour 4 streamers, l'étude a été menée sur le streamer issu du premier spot à droite de l'axe de pointe/plan. Les streamers pris en compte pour la comparaison sont pointés par une flèche blanche sur la Figure 4-13.

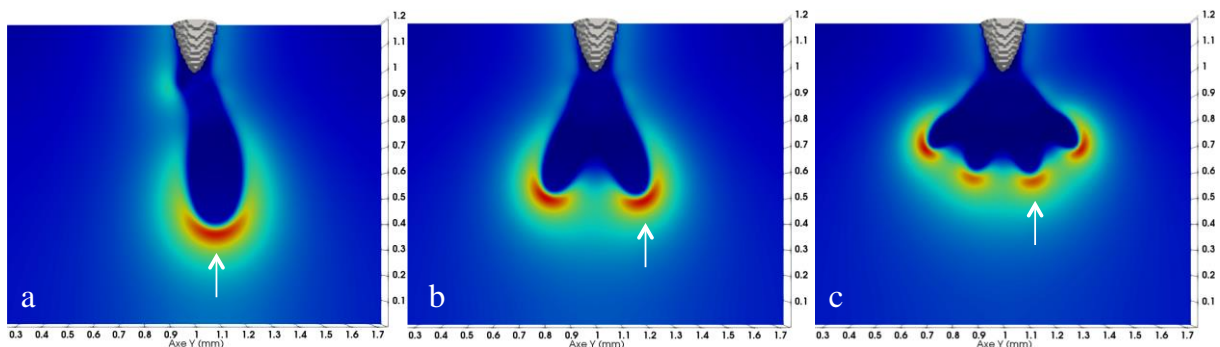


Figure 4-13: Streamer pris en compte pour la mesure à $t = 10\text{ns}$

Les résultats de cette campagne de traitement d'image sont montrés sur la Figure 4-14, la Figure 4-15 et la Figure 4-16. La Figure 4-14 montre l'évolution de l'écart Dy_t du streamer étudié par rapport à l'axe pointe/plan.

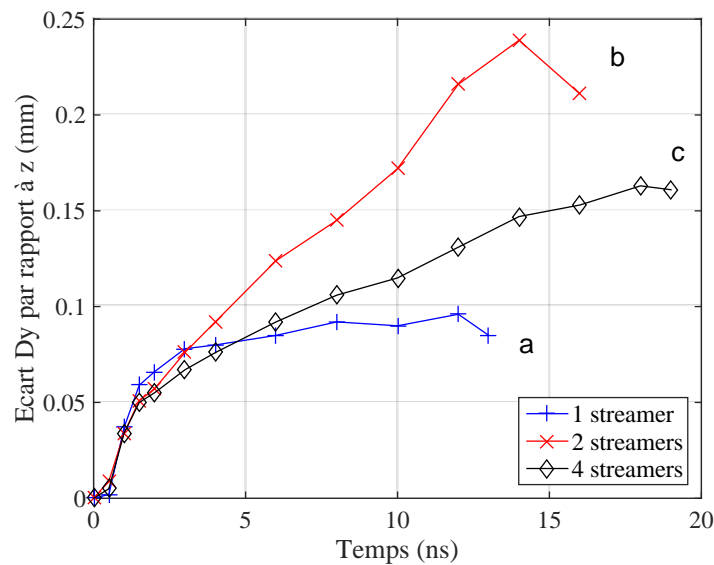


Figure 4-14: Ecart Dy en mm entre l'axe pointe/plan et le streamer.

Dans le cas de la propagation d'un seul streamer cet écart au cours du cheminement vers la cathode reste inférieur à $100\mu\text{m}$ (cf. courbe bleu Figure 4-14). Entre les cas (a) et le cas (b), l'écart par rapport à l'axe pointe/plan est quasiment identique pour le streamer étudié. A 3ns, il est de l'ordre de $76\mu\text{m}$ pour les 2 cas (cf. courbe bleu et rouge sur la Figure 4-14). A partir de 4ns, la Figure 4-6b montre clairement un effet de répulsion entre streamer. Ainsi, à 10ns, le streamer du cas (a) se trouve à $90\mu\text{m}$ de l'axe pointe/plan alors que le streamer étudié du cas (b) en est quasiment 2 fois plus éloigné ($\sim 172\mu\text{m}$).

Dans le cas de la propagation de 4 streamers, la courbe noire se situe clairement entre les courbes bleue et rouge, montrant l'influence de la répulsion simultanée du streamer le plus externe qui a tendance à ramener le streamer étudié vers l'axe.

La Figure 4-15 montre dans les 3 cas, la longueur du chemin parcouru par les streamers étudiés depuis la pointe. Cette distance est calculée à chaque instant avec les distances mesurées Dy_t et Dz_t selon l'équation (e 4-2).

$D_{parcours}(t) = \sum_t \sqrt{(Dy_t - Dy_{t-1})^2 + (Dz_t - Dz_{t-1})^2}$	e 4-2
---	-------

Pour un instant donné, le streamer seul (cas (a)) parcourt une distance plus grande que les streamers étudiés au cas (b) ou (c). Par exemple, à 6ns, les streamers étudiés se sont propagés d'une longueur de 404 μ m, 358 μ m et 309 μ m respectivement dans les cas (a), (b) et (c).

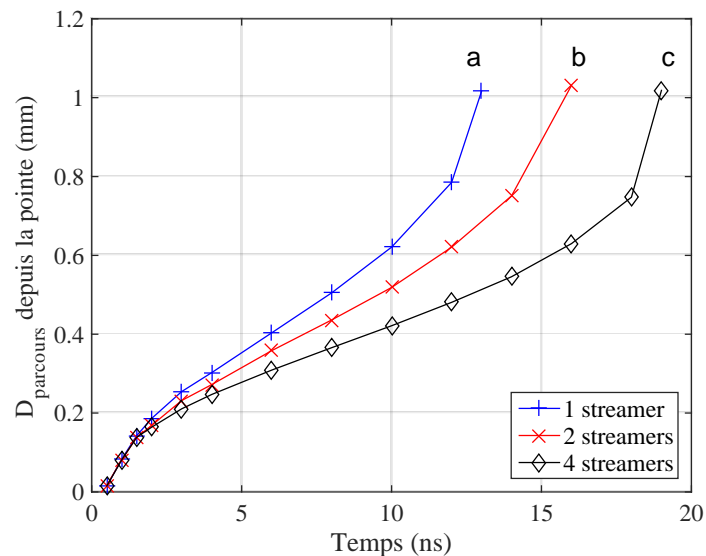


Figure 4-15: Extension du streamer étudié en fonction du temps

Ainsi, la vitesse moyenne des streamers calculée entre deux instants sur la Figure 4-16 est toujours plus grande dans le cas (a) que pour les cas (b) ou (c). Dans les trois cas, la forte concentration des lignes de champ autour de la pointe entraîne une forte dynamique des streamers dans les premiers instants. Trois tendances générales se dégagent de la Figure 4-16. Une première phase de décélération jusqu'à 3ns où la vitesse passe de $1,39 \times 10^7$ cm/s à $4,8 \times 10^6$ cm/s pour le cas (a), de $1,3 \times 10^7$ cm/s à 4×10^6 cm/s pour le cas (b) et de $1,33 \times 10^7$ cm/s à $3,6 \times 10^6$ cm/s pour le cas (c). Ce temps de décélération correspond à la durée que les streamers mettent pour atteindre les spots initiaux (cf. Figure 4-4 et Figure 4-5). Dans les premiers instants, lorsque la charge d'espace apparaît, le champ électrique qu'elle génère est très élevé (environ 750Td sur la Figure 4-3). Au cours de son déplacement, cette charge d'espace s'éloigne de la zone de fort champ géométrique localisée autour de la pointe et avance vers les spots plasma qui possèdent une densité électronique plus élevée (10^{19} m $^{-3}$) que celle du fond continu (10^{17} m $^{-3}$). La dynamique en tête de streamer est affectée par cet apport supplémentaire d'électrons et se stabilise à des vitesses constantes dans l'espace inter-électrodes où l'amplitude du champ géométrique est également plus homogène. Ainsi, à partir de 4ns, le streamer a dépassé la zone des spots plasmas et sa vitesse devient constante jusqu'à 7ns pour le cas (a), 9ns pour le cas (b) et 13ns pour le cas (c) avec respectivement des vitesses de 5×10^6 cm/s, $3,9 \times 10^6$ cm/s et $2,3 \times 10^6$ cm/s.

Dans la dernière phase, la vitesse des streamers augmente à leur arrivée sur le plan de masse. Cette accélération est due d'une part à l'apport d'électrons en provenance de la cathode et à l'augmentation du champ de charge d'espace juste avant l'arrivée sur le plan.

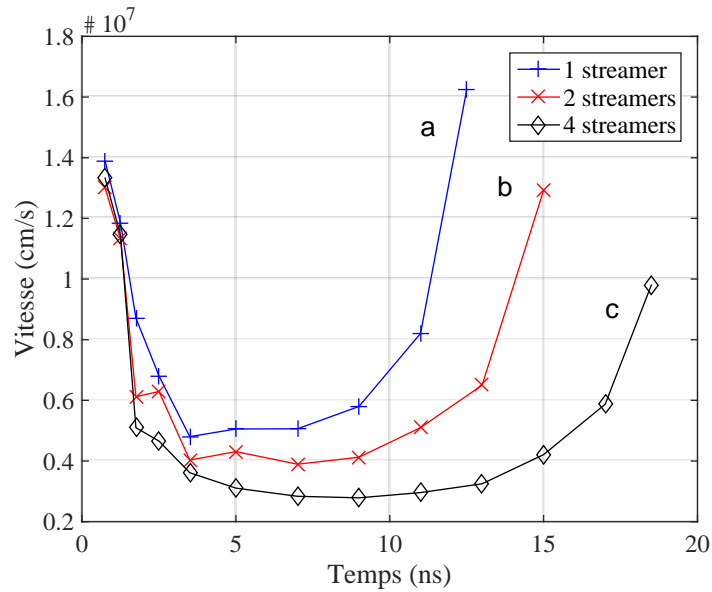


Figure 4-16: Vitesse d'extension du streamer

En effet, la différence de potentiel pointe/plan reste constante durant toute la traversée des streamers. Le potentiel étant quasiment constant dans les canaux ionisés, il se concentre à l'avant des streamers. Lorsque la tête des streamers se rapproche du plan le gradient de potentiel c'est-à-dire le champ électrique augmente alors subitement.

Pour finir cette analyse, la Figure 4-17 montre les formes de courant calculées à partir de l'équation de Morrow et Sato explicité dans le §3.4.3.

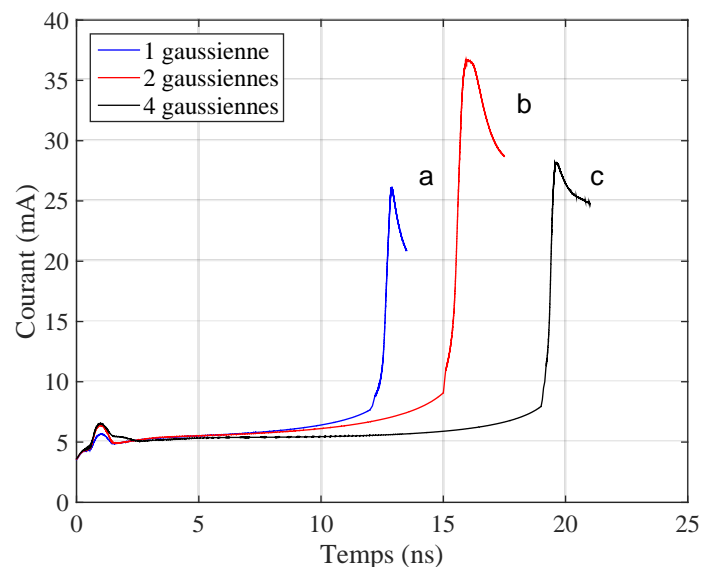


Figure 4-17: Courant de décharge dans les 3 cas étudiés jusqu'à l'arrivée des streamers sur le plan cathodique

Les résultats ne sont montrés que jusqu'au contact des streamers sur la cathode car les conditions d'émissions secondaires appliquées de façon homogène sur la cathode entraînent un apport trop important d'électrons qui perturbent la relaxation du courant. Ceci devra être corrigé dans des travaux futurs d'amélioration et d'exploitation du code. Dans les tous premiers instants de la formation des décharges autour de 1ns, on constate dans tous les cas un petit pic de courant égal à 5,65mA, 6,38mA et 6,53mA respectivement pour les cas (a), (b) et (c). Ce pic de courant correspond à la formation de la charge d'espace autour de la pointe et la formation des premiers canaux de conduction (cf. Figure 4-2a, Figure 4-2b et Figure 4-2c entre 0,5 et 1ns).

Ensuite, durant la propagation des streamers de la pointe vers le plan, les courants dans chacun des cas augmentent très légèrement. On observe à nouveau un pic de courant de valeur plus élevée égale à 26,1mA à $t = 12,9\text{ns}$ pour le cas (a), 36,65mA à $t = 16\text{ns}$ pour le cas (b) et 28,1mA à $t = 19,6\text{ns}$ pour le cas (c). Ce deuxième pic de courant correspond à l'arrivée des streamers sur la cathode (cf. Figure 4-10 et Figure 4-11). Le pic de courant pour le cas (b) (courbe rouge sur la Figure 4-17) a une amplitude plus grande et est moins resserré que les pics dans les cas (a) et (c). En effet, dans le cas (b), les 2 streamers arrivent quasiment en même temps à $t = 16\text{ns}$ ce qui induit un appel de courant plus important. Le pic de courant dans le cas (c) est légèrement plus élevé que dans le cas (a) mais reste du même ordre de grandeur. En effet, dans le cas (c), malgré le développement simultané de 4 streamers, un seul arrive sur la cathode à $t = 20\text{ns}$ (voir Figure 4-10c et Figure 4-11c à 20ns).

Globalement, les résultats du code 3D sont cohérents malgré les différentes hypothèses physiques utilisées pour ces premiers tests d'exploitation. Avec 1000 cœurs et 64 Millions de mailles, l'exécution d'un calcul demande 25min par nanoseconde de temps physique.

4.4 Conclusion

Ce chapitre a été consacré à une première exploitation du code 3D dans une configuration introduisant une rupture de symétrie axiale. L'initiation du phénomène de ramification de la décharge est gérée par l'adjonction de spots plasma dans l'espace inter-électrode. Ces spots ont été placés dans un même plan de façon à pouvoir analyser plus en détails la structure et le développement de la décharge. L'étude de la propagation de un, deux et quatre streamers s'est faite à l'aide de cartographie de la densité électronique et du module du champ électrique réduit. Cette étude a permis de comprendre la formation des ramifications de la décharge et d'analyser l'interaction des streamers entre eux. La vitesse de propagation des streamers, les chemins parcourus et les courbes de courant obtenus sont en adéquation avec les observations expérimentales.

Plusieurs améliorations sont encore à apporter comme une meilleure définition de la pointe, la prise en compte de la photo-ionisation (pour s'abstenir du fond continu d'électrons) et l'ajout d'une émission secondaire localisée (et non plus homogène sur toute la surface de la cathode).

En parallèle de ces améliorations, le code 3D dans sa version actuelle peut déjà être exploité pour des distances inter-électrodes plus grandes avec une répartition aléatoire de plusieurs spots plasma. Les résultats obtenus (courbe de courant et cartographies de la répartition de la densité d'électron et du champ réduit) pourront être confrontés aux courbes de courant expérimentales et à des mesures d'imagerie rapide.

CONCLUSION GENERALE

Au bilan, ce travail de thèse a abouti à la réalisation d'un code 3D de résolution d'un modèle fluide d'ordre 1 d'une décharge électrique couronne dans une configuration pointe/plan. Le code 3D utilise la puissance du calcul haute performance en répartissant les tâches de calculs sur différents cœurs à l'aide la bibliothèque MPI. Le code a été exécuté sur le supercalculateur EOS du réseau CALMIP dont l'architecture est propice au calcul parallèle (mémoire distribuée, 1800 cœurs). Le modèle fluide de la décharge est discrétisé dans le cadre de la méthode des volumes finis sur un maillage non-homogène et stationnaire. Le code est dit agile, dans la mesure où l'utilisateur peut choisir la configuration géométrique des électrodes pointes/plan (forme de la pointe, rayon de courbure, distance inter-électrode, volume du domaine d'étude), le niveau et la forme de la pulse de potentiel appliqué sur la pointe et la structure du maillage (nombre de points de discrétisation et zones de resserrement du maillage). Les technologies actuelles ont également permis le développement et l'exécution du code 3D.

Dans le déroulement de la thèse, l'étude bibliographique nous a permis de retenir le modèle fluide d'ordre 1 pour simuler la décharge et de nous conforter dans le choix de certaines stratégies telles que : (i) la préférence de la méthode des volumes finis pour discrétiser les équations du modèle, (ii) l'utilisation d'un maillage stationnaire et d'un grand nombre de points de discrétisation et (iii) l'emploi du calcul massivement parallèle pour supporter ces contraintes. Cette étude nous a également permis d'estimer le niveau du fond continu d'électrons à prendre en compte pour reproduire les effets de la photo-ionisation et de choisir d'introduire des spots plasmas pour amorcer la ramification des streamers.

Les différents tests contraignants sur les performances des méthodes numériques en calcul massivement parallèle (tests effectués aussi bien sur la résolution de l'équation elliptique de Poisson que sur les équations hyperboliques de transport) ont permis de sélectionner les méthodes les plus pertinentes pour nos conditions de simulation. Ainsi, il a été montré que les méthodes itératives SOR R&B (développée dans le cadre de ce travail) et BiCGSTAB sont les plus performantes pour la résolution de l'équation de Poisson avec une vitesse de convergence et une consommation mémoire en faveur de la méthode SOR R&B. Les équations de transport des particules chargées sont résolues à l'aide de l'algorithme MUSCL Superbee qui n'a introduit ni de diffusion, ni de dispersion numériques quelles que soient les conditions des tests de propagation de forts gradients (déplacement d'une densité cubique sous champ de vitesse période homogène ou oscillant). Un travail important de parallélisation et d'optimisation du code au plus près de l'architecture du super-calculateur EOS a conduit à des durées de calculs très raisonnables de l'ordre de 25min par ns de temps physique pour 64 millions de points de discrétisation et 1000 cœurs embarqués.

Le comportement du code 3D a été testé par la confrontation des résultats 3D et 2D dans une condition de simulation présentant une symétrie de révolution autour de l'axe de propagation

d'un streamer mono-filamentaire. La correspondance des résultats a permis de valider le code 3D dans une configuration simplifiée en introduisant la géométrie pointe/plan.

Le code 3D a ensuite été exploité dans une configuration pointe/plan en introduisant une rupture de symétrie axiale. Un, deux ou quatre spots de plasma ont été placés dans un même plan pour étudier en détail le développement de la structure arborescente d'une décharge couronne et l'interaction entre streamers. Cette étude a montré les effets de la répulsion des charges d'espaces positives transportées par les ondes d'ionisation sur le déplacement des streamers. Les valeurs obtenues de la densité électronique, du module du champ électrique réduit, de la vitesse de propagation des streamers, des chemins empruntés entre la pointe et le plan ainsi que l'amplitude et la forme des courants de décharge sont en adéquation avec les observations expérimentales et démontrent la capacité du code 3D à simuler le développement complet d'une décharge couronne.

Sur la base de ce travail, plusieurs perspectives et améliorations sont possibles. D'un point de vue développement, elles concernent la prise en compte de la forme des pointes expérimentales, l'amélioration de la définition de la pointe en tenant compte de ses coordonnées réelles, la prise en compte de la photo-ionisation (pour s'abstenir du fond continu d'électron) et l'ajout d'une émission secondaire localisée sur la cathode. Concernant le calcul parallèle, l'implémentation pour la méthode SOR R&B du couplage hybride MPI et OpenMP apportera un gain en temps de calcul supplémentaire (estimé à un facteur 4 d'après les premiers tests effectués sur la méthode BiCGSTAB). D'un point de vue exploitation, le code 3D sera utilisé pour simuler une configuration expérimentale spécifiquement dédiée avec l'ajout aléatoire de spots plasma dans l'espace inter-électrode et la confrontation directe simulation/expérience à l'aide de l'imagerie rapide et des courbes expérimentales de courant et de tension.

Annexe : Expression des données de base des électrons et des ions dans l'air en fonction du champ réduit

Pour alimenter le modèle fluide d'ordre 1, on utilise les paramètres de réaction et de transport proposé dans l'article de Ducasse et al. [38]. Dans cette étude, les fonctions interpolées de Lowke et Morrow [37] (reprises également par Hallac [39]) sont améliorées pour l'attachement à deux et à trois corps ainsi que pour la vitesse de dérive des électrons. Les nouvelles fonctions d'interpolation ont été établies sur la base des données de Lowke [40] pour des champs électriques réduits allant de 1 à 1000Td. Les autres paramètres de réaction et de transport (ionisation, recombinaison, coefficient de diffusion d'électrons, et les vitesses de dérive d'ions) proposés par Lowke et Morrow n'ont pas été modifiés. Les expressions ci-dessous sont exprimées en fonction du champ électrique réduit $E_{Td} = \frac{|E|}{n_g}$ exprimé en Td.

Coefficient réduit d'ionisation dans l'air :

- $E_{Td} > 150 Td$

$$\frac{\alpha}{n_g}(E_{Td}) = 2.10^{-16} \times e^{-\frac{7,248.10^2}{E_{Td}}} \text{ cm}^2$$

- $E_{Td} \leq 150 Td$

$$\frac{\alpha}{n_g}(E_{Td}) = 6,619.10^{-17} \times e^{-\frac{5,593.10^2}{E_{Td}}} \text{ cm}^2$$

Coefficient réduit d'attachement dans l'air :

- $600 \leq E_{Td} < 1000 Td$

$$\begin{aligned} \frac{\eta}{n_g}(E_{Td}) = & 6,56041.10^{-19} - 1,45181.10^{-21} \times E_{Td} + 1,45951.10^{-24} \times (E_{Td})^2 \\ & - 5,69565.10^{-28} \times (E_{Td})^3 \text{ cm}^2 \end{aligned}$$

- $170 \leq E_{Td} < 600 Td$

$$\frac{\eta}{n_g}(E_{Td}) = 6,23261.10^{-19} - 1,17646.10^{-21} \times E_{Td} + 7,51103.10^{-25} \times (E_{Td})^2 \text{ cm}^2$$

- $69 \leq E_{Td} < 170 Td$

$$\frac{\eta}{n_g}(E_{Td}) = -3,6311.10^{-19} + 1,01192.10^{-20} \times E_{Td} - 3,17875.10^{-23} \times (E_{Td})^2 \text{ cm}^2$$

- $23 \leq E_{Td} < 69 Td$

$$\frac{\eta}{n_g}(E_{Td}) = 3,10976.10^{-19} - 9,41213.10^{-21} \times E_{Td} + 1,09693.10^{-22} \times (E_{Td})^2 \text{ cm}^2$$

- $1 \leq E_{Td} < 23 Td$

$$\frac{\eta}{n_g}(E_{Td}) = 1,2409.10^{-19} + 8,9497.10^{-18} \times e^{-\frac{E_{Td}}{1,0931}} + 1,321.10^{-18} \times e^{-\frac{E_{Td}}{6,05148}} \text{ cm}^2$$

Module de la vitesse de dérive pour les électrons :

- $E_{Td} \geq 9,8 Td$

$$v_{de}(E_{Td}) = 10^{5,5237+0,7822 \times \log_{10}(E_{Td})} \text{ cm. s}^{-1}$$

- $0 < E_{Td} < 9,8 Td$

$$v_{de}(E_{Td}) = \times 10^{5,8693+0,4376 \times \log_{10}(E_{Td})} \text{ cm. s}^{-1}$$

Coefficient de diffusion pour les électrons :

$$D_e(E_{Td}) = 0,3341.10^9 \times (E_{Td} \times 10^{-17})^{0,54069} \times \left| \frac{v_{de} \times 10^2}{E_{Td} \times 10^{-17} \times n_g \times 10^{-6}} \right| \text{ cm}^2. \text{ s}^{-1}$$

Vitesse de dérive pour les ions négatifs :

- $E_{Td} \geq 50 Td$

$$v_{d_{ion-}}(E_{Td}) = -2,7 \times E_{Td} \times 10^{-17} \times n_g \times 10^{-6} \text{ cm. s}^{-1}$$

- $0 < E_{Td} < 50 Td$

$$v_{d_{ion-}}(E_{Td}) = -1,86 \times E_{Td} \times 10^{-17} \times n_g \times 10^{-6} \text{ cm. s}^{-1}$$

Vitesse de dérive pour les ions positifs :

- $E_{Td} > 0 Td$

$$v_{d_{ion+}}(E_{Td}) = 2,34 \times E_{Td} \times 10^{-17} \times n_g \times 10^{-6} \text{ cm. s}^{-1}$$

Bibliographie

- [1] Karol Hensel, Nobuya Hayashi, Chobei Yamabe, and Marcela Morvova, "Positive DC Corona Discharge in N₂-NO-CO₂-O₂ Mixtures," *Japanese Journal of Applied Physics*, pp. 336-345, January 2002, doi: 10.1143/JJAP.41.336.
- [2] Abderrahmane Mraïhi, Nofel Merbahi, Mohammed Yousfi, Alyen Abahazem, and Olivier Eichwald, "Electrical and spectroscopic analysis of mono- and multi-tip pulsed corona discharges in air at atmospheric pressure," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 20, p. 12, november 2011, doi:10.1088/0963-0252/20/6/065002.
- [3] Itay Even-Ezra, Anat Mizrahi, Daniel Gerrity, Shane Snyder, Andrew Salveson, Ori Lahav "Application of a novel plasma-based advanced oxidation process for efficient and cost-effective destruction of refractory organics in tertiary effluents and contaminated groundwater," *Desalination and water treatment*, vol. 11, pp. 236-244, 2009, doi: 10.5004/dwt.2009.808.
- [4] Steven Carruthers, "Introduction to Ozone Generation," *Practical Hydroponics & Greenhouses*, no. Issue 36, October 1997.
- [5] M. Goldman, A. Goldman, and R. S. Sigmond, "The corona discharge, its properties and specific uses," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 57, pp. 1353-1362, 1985.
- [6] Yuliya Klenko and Vladimir Scholtz, "Influence of a point-to-plane DC negative corona discharge on gel surface," *Acta Polytechnical*, vol. 48, pp. 27-29, 2008.
- [7] Philippe Béquin, V Joly, and Ph Herzog, "Modeling of a corona discharge microphone," *Journal of Physics D: Applied Physics* 46 (2013) 175204 (8pp), vol. 46, no. 17, p. 8, April 2013, doi: 10.1088/0022-3727/46/17/175204.
- [8] Diane Dubois, "Réalisation et caractérisation d'un réacteur plasma de laboratoire pour des études sur la dépollution des gaz d'échappement," Université de Toulouse 3 Paul Sabatier, Toulouse, Thèse 2006TOU30139, 2006.
- [9] R. S. Sigmond, *Electrical breakdown of gases*, John Wiley & Sons ed.: Meek, J. M.; Craggs, J. D., 1978, Wiley series in plasma physics.
- [10] Michael Faraday, *Experimental researches in electricity*.: Richard and John Edward Taylor, 1849, vol. 1.
- [11] R. Morrow, "The theory of positive glow corona," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 30, no. 22, pp. 3099-3114, September 1997, doi: 10.1088/0022-3727/30/22/008.
- [12] K. Adamiak and P. Atten, "Simulation of corona discharge in point-plane configuration," *Journal of Electrostatics*, vol. 61, pp. 85-98, January 2004, doi: 10.1016/j.elstat.2004.01.021.
- [13] Lipeng Liu and Marley Becerra, "On the transition from stable positive glow corona to streamers," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 49, no. 22, p. 13, May 2016, doi: 10.1088/0022-3727/49/22/225202.
- [14] John Zeleny, "On discharges from points in gases with special regard to so-called dark discharges," *Physical Review*, vol. 24, no. Issue 3, pp. 255-271, September 1924, doi: 10.1103/PhysRev.24.255.
- [15] N. Merbahi, A. Abahazem, D. Dubois, O. Eichwald, and M. Yousfi, "Optical and electrical analyses of DC positive corona discharge in N₂/O₂/CO₂ gas mixtures," *The European Physical Journal Applied Physics*, vol. 42, pp. 55-61, January 2008, doi: 10.1051/epjap:2008035.

- [16] C. V. Nguyen, A. P. J. Van Deursen, E. J. M. Van Heesch, G. J. J. Winands, and A. J. M. Pemen, "X-ray emission in streamer-corona plasma," *Journal of physics D: Applied Physics*, vol. 43, no. 025202, p. 5, December 2009, doi:10.1088/0022-3727/43/2/025202.
- [17] Ryo Ono and Tetsuji Oda, "Formation and structure of primary and secondary streamers in positive pulsed corona discharge—effect of oxygen concentration and applied voltage," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 36, pp. 1952-1958, July 2003, doi: 10.1088/0022-3727/36/16/306.
- [18] Olivier Eichwald, Olivier Ducasse, Diane Dubois, A Abahazem, Nofel Merbahi, Malika Benhenni, Mohammed Yousfi, "Experimental analysis and modelling of positive streamer in air: towards an estimation of O and N radical production," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 41, no. 23, p. 11, November 2008, doi: 10.1088/0022-3727/41/23/234002.
- [19] E. Marode, Ph. Dessante, and P. Tardiveau, "2D positive streamer modelling in NTP air under extreme pulse fronts. What about runaway electrons?," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 25, no. 6, p. 15, October 2016, doi: 10.1088/0963-0252/25/6/064004.
- [20] Komuro Atsushi and Ono Ryo, "Simulated Streak Pictures for the Production of Chemical Species in an Atmospheric Pressure Streamer Discharge," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 42, no. 10, pp. 2406-2407, October 2014, doi: 10.1109/TPS.2014.2323063.
- [21] T M P Briels, E M van Veldhuizen, and U Ebert, "Positive streamers in air and nitrogen of varying density: experiments on similarity laws," *Journal of physics D: Applied Physics*, vol. 41, no. 23, p. 14, November 2008, doi:10.1088/0022-3727/41/23/234008.
- [22] T M P Briels, J Kos, G J J Winands, E M van Veldhuizen, and U Ebert, "Positive and negative streamers in ambient air: measuring diameter, velocity and dissipated energy," *Journal of physics D: Applied Physics*, vol. 41, no. 23, p. 11, November 2008, doi: 10.1088/0022-3727/41/23/234004.
- [23] Y. L. M. Creighton, "Pulsed positive corona discharges : fundamental study and application to flue gas treatment," *Eindhoven: Technische Universiteit Eindhoven*, January 1994, doi: 10.6100/IR421458.
- [24] Mose Akyuz, Anders Larsson, Vernon Cooray, and Gustav Strandberg, "3D simulations of streamer branching in air," *Journal of Electrostatics*, vol. 59, no. Issue 3, pp. 115-141, September 2003, doi: 10.1016/S0304-3886(03)00066-4.
- [25] Alejandro Luque and Ute Ebert, "Growing discharge trees with self-consistent charge transport: the collective dynamics of streamers," *New Journal of Physics*, vol. 16, p. 26, January 2014, doi: 10.1088/1367-2630/16/1/013039.
- [26] Li Chao, Ute Ebert, and Willem Hundsdorfer, "Spatially hybrid computations for streamer discharges : II. Fully 3D simulations," *Journal of Computational Physics*, vol. 231, no. Issue 3, pp. 1020-1050, February 2012, doi: 10.1016/j.jcp.2011.07.023.
- [27] B. J. P. Dowds, R. K. Barrett, and D. A. Diver, "Streamer initiation in atmospheric pressure gas discharges by direct particle simulation," *Physical Review E*, vol. 68, no. 026412, p. 9, 2003, doi: 10.1103/PhysRevE.68.026412.
- [28] G. E. Georghiou, A. P. Papadakis, R. Morrow, and A. C. Metaxas, "Numerical modelling of atmospheric pressure gas discharges leading to plasma production," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 38, no. 20, pp. R303-R328, September 2005, doi: 10.1088/0022-3727/38/20/R01.
- [29] A. Hallac, G. E. Georghiou, and A. C. Metaxas, "Three-Dimensional Characterization of

- Short-Gap Streamers in Air at Atmospheric Pressure," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 33, no. Issue 2, pp. 268-269, April 2005, doi: 10.1109/TPS.2005.845911.
- [30] L. Papageorgiou, A. C. Metaxas, and G. E. Georghiou, "Three-dimensional numerical modelling of gas discharges at atmospheric pressure incorporating photoionization phenomena," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 44, no. 4, p. 10, January 2011, doi: 10.1088/0022-3727/44/4/045203.
- [31] L. Papageorgiou, A. C. Metaxas, and G. E. Georghiou, "Three-Dimensional Streamer Modeling in Atmospheric Pressure Air," vol. 39, no. Issue 11, pp. 2224-2225, July 2011, doi: 10.1109/TPS.2011.2159127.
- [32] Shailendra Singh, Yuriy V. Serdyuk, and Raimund Summer, "Streamer Branching in Air: Physical Model and Simulations in Fully 3D Spatial Domain," *IEEE 11th International Conference on the Properties and Applications of Dielectric Materials (ICPADM)*, pp. 220-223, July 2015, doi: 10.1109/ICPADM.2015.7295248.
- [33] S. Pancheshnyi, "Role of electronegative gas admixtures in streamer start, propagation and branching phenomena," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 14, no. 4, pp. 645-653, August 2005, doi: 10.1088/0963-0252/14/4/002.
- [34] S. Pancheshnyi, P. Ségur, and A. Bourdon, "Numerical simulation of filamentary discharges with the parallel adaptive mesh refinement technique," *Journal of Computational Physics*, vol. 13, no. 227, pp. 6574-6590, June 2008, doi: 10.1016/j.jcp.2008.03.020.
- [35] Fayssal Benkhaldoun, Jaroslav Fort, Khaled Hassouni, Jan Karel, Gilles Scarella, and David Trdlicka, "A Full 3-D Dynamically Adaptive Unstructured Grid Finite-Volume Approach to Simulate Multiple Branching in Streamer Propagation," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 44, no. Issue 10, pp. 2420 - 2421, October 2014, doi: 10.1109/TPS.2014.2321351.
- [36] S. Nijdam, J. Teunissen, E. Takahashi, and U. Ebert, "The role of free electrons in the guiding of positive streamers," *Plasma Sources Science and Technology*, vol. 25, no. 4, p. 13, May 2016, doi: 10.1088/0963-0252/25/4/044001.
- [37] R. Morrow and J. J. Lowke, "Streamer propagation in air," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 30, no. 4, pp. 614-627, 1997, doi: 10.1088/0022-3727/30/4/017.
- [38] Olivier Ducasse, Liberis Papageorghiou, Olivier Eichwald, Nicolas Spyrou, and Mohammed Yousfi, "Critical Analysis on Two-Dimensional Point-to-Plane Streamer Simulations Using the Finite Element and Finite Volume Methods," *IEEE Transaction on plasma science*, vol. 35, no. 5, pp. 1287-1300, October 2007, doi: 10.1109/TPS.2007.905112.
- [39] A. Hallac, G. E. Georghiou, and A. C. Metaxas, "Secondary emission effects on streamer branching in transient non-uniform short-gap discharges," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 36, no. 20, pp. 2498-2509, October 2003, doi: 10.1088/0022-3727/36/20/011.
- [40] John J. Lowke and Richard Morrow, "Theoretical analysis of removal of oxides of sulphur and nitrogen in pulsed operation of electrostatic precipitators," *IEEE Transactions on Plasma Science*, vol. 23, no. Issue 4, pp. 661-671, August 1995, doi: 10.1109/27.467988.
- [41] Olivier Ducasse, Philippe Dessante, Carolyn Jacobs, Olivier Eichwald, Nicolas Renon, Mohammed Yousfi, "3D tests of Poisson equation solvers for streamer simulation," *20th International Conference on Gas Discharges and their Applications, Orleans, France*, p. 4, July 2014.

- [42] CALMIP. (2014, January) Caractéristiques d'EOS. [Online]. <https://www.calmip.univ-toulouse.fr/spip.php?article388>
- [43] Chaoyang Zhang, Hong Lan, Yang Ye, and Brett D. Estrade, "Parallel SOR Iterative Algorithms and Performance Evaluation on a Linux Cluster," *Proceedings of the International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications*, vol. 1, p. 8, June 2005.
- [44] Jonathan Richard Shewchuk, "An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain," *Technical Report*, 1994, available at: <http://www.cs.cmu.edu/~jrs/jrspapers.html>.
- [45] Yu-Ling Lai, Wen-Wei Linb, and Dan Pierce, "Conjugate gradient and minimal residual methods for solving symmetric indefinite systems," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 84, no. Issue 2, pp. 243-256, October 1997.
- [46] Sou-Cheng T. Choi, Christopher C. Paige, and Michael A. Saunders, "MINRES-QLP: a Krylov subspace method for indefinite or singular symmetric systems," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 33, no. Issue 4, pp. 1810-1836, 2011.
- [47] Patrick R. Amestoy, Iain S. Duff, and Jean-Yves L'Excellent, "Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 184, no. Issue 2-4, pp. 501-520, April 2000.
- [48] Patrick R. Amestoy, Iain S. Duff, Jean-Yves L'Excellent, and Jacko Koster, "A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling," *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, vol. 23, no. Issue 1, pp. 15-41, June 1999.
- [49] Siddhartha Kumar Khaitan, James D. McCalley, and Qiming Chen, "Multifrontal Solver for Online Power System Time-Domain Simulation," *IEEE Transactions on power systems*, vol. 23, no. 4, pp. 1727-1737, November 2008.
- [50] Abdou Guermouche and Jean-Yves L'Excellent, "Constructing memory-minimizing schedules for multifrontal methods," *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 32, no. Issue 1, pp. 17-32, March 2006.
- [51] Abdou Guermouche, Jean-Yves L'Excellent, and Gil Utard, "Impact of reordering on the memory of a multifrontal solver," *Parallel Computing*, vol. 29, no. Issue 9, pp. 1191-1218, September 2003.
- [52] Iain S. Duff and John Reid, "The Multifrontal Solution of Indefinite Sparse Symmetric Linear," *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 3, no. Issue 3, pp. 302-325, September 1983.
- [53] Iain S. Duff and John Reid, "The multifrontal solution of unsymmetric sets of linear systems," *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol. 5, no. Issue 3, pp. 633-641, 1984.
- [54] ENSEEIHT-IRIT and LIP-INRIA. MUMPS: a Multifrontal Massively Parallel sparse direct Solver. [Online]. <http://mumps.enseeiht.fr>
- [55] Joseph-Marie Plewa, Olivier Ducasse, Philippe Dessante, Carolyn Jacobs, Olivier Eichwald, Nicolas Renon, Mohammed Yousfi, "Benchmarks of 3D Laplace Equation Solvers in a Cubic Configuration for Streamer Simulation," *Plasma Science and Technology*, vol. 18, no. 5, p. 6, May 2016.
- [56] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery, "Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing - 2nd edition," *Press Syndicate of the University of Cambridge*, 1992.
- [57] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy, "On the partial difference equations of mathematical physics," *IBM Journal of Research and Development*, vol. 11, no. Issue

- 2, pp. 215-234, March 1967.
- [58] O. Eichwald, H. Bensaad, O. Ducasse, and M. Yousfi, "Effects of numerical and physical anisotropic diffusion on branching phenomena of negative streamer dynamics," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 45, no. 38, p. 15, September 2012.
- [59] Bram Van Leer, "Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method," *Journal of Computational Physics*, vol. 32, no. Issue 1, pp. 101-136, July 1979, doi: 10.1016/0021-9991(79)90145-1.
- [60] O. Eichwald, P. Bayle, M. Yousfi, and M. Jugroot, "Modeling and three dimensional simulation of the neutral dynamics in an air discharge confined in a microcavity. II. Analysis of the wall and geometry effects," *Journal of Applied Physics*, vol. 84, no. Issue 9, p. 4716, July 1998, doi: 10.1063/1.368714.
- [61] Olivier Eichwald, "Modélisation de la dynamique des neutres dans une décharge transitoire : application aux microsystèmes électroniques et aux dispositifs de dépollution," Université de Toulouse 3 Paul Sabatier, Toulouse, Thèse 1997TOU30148, 1997.
- [62] P. K. Sweby, "High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws," *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 21, no. Issue 5, pp. 995–1011, 1984, doi:10.1137/0721062.
- [63] P. L. Roe and M. J. Baines, "Proceedings of the 4th GAMM conference on numerical methods in fluid mechanics," p. 281, 1982.
- [64] Olivier Ducasse, "Modélisation électrohydrodynamique d'un réacteur plasma hors équilibre de dépollution des gaz," Université de Toulouse 3 Paul Sabatier, Toulouse, Thèse 2006TOU30287, 2006.
- [65] G Wormeester, S Pancheshnyi, A Luque, S Nijdam, and U Ebert, "Probing photoionization: simulations of positive streamers in varying N₂:O₂-mixtures," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 43, no. 50, p. 13, December 2010, doi: 10.1088/0022-3727/43/50/505201.
- [66] Johannes Schindelin and Erwin Frise, Verena Kaynig, Mark Longair, Tobias Pietzsch, Stephan Preibisch, Curtis Rueden, Stephan Saalfeld, Benjamin Schmid, Jean-Yves Tinevez, Daniel James White, Volker Hartenstein, Kevin Eliceiri, Pavel Tomancak, Albert Cardona, Ignacio Arganda-Carreras, "Fiji: an open-source platform for biological-image analysis," *Nature Methods*, vol. 9, pp. 676-682, June 2012, doi: 10.1038/nmeth.2019.

Index des notations

V	Potentiel électrique
ΔV	Laplacien du potentiel
E	Champ électrique
\vec{E}	Vecteur du champ électrique total
E_{Td}	Norme du champ électrique réduit
ρ	Densité de charge d'espace
ε	Permittivité diélectrique du milieu
n_g	Densité du gaz porteur de la décharge
q_{esp}	Charge électrique d'une espèce esp
n_{esp}	Densité de l'espèce chargée esp
\vec{v}_{esp}	Vitesse moyenne des particules
v_{de}	Module de la vitesse de dérive des électrons
$v_{d_{ion+}}$	Module de la vitesse de dérive des ions positifs
$v_{d_{ion-}}$	Module de la vitesse de dérive des ions négatifs
μ_{esp}	Mobilité de l'espèce esp
D_{esp}	Coefficient de diffusion de l'espèce esp
D_e	Coefficient de diffusion des électrons
S_{esp}	Terme source de création ou de disparition de l'espèce esp
S_e	Terme source des électrons
S_p	Terme source des ions positifs
S_n	Terme source des ions négatifs
S^{ph}	Terme source lié à la photo-ionisation
α	Coefficient d'ionisation
η	Coefficient d'attachement
β_{ep}	Coefficient de recombinaison entre électron et ion positif
β_{np}	Coefficient de recombinaison entre ion négatif - ion positif
n_e	Densité des électrons
n_p	Densité des ions positifs
n_n	Densité des ions négatifs
ε_0	Permittivité du vide
x_i, y_j, z_k	Coordonnées d'un point du domaine discrétisé indicé par i, j, k
n	Nombre de points de discrétisation selon un axe
$\tau_{i,j,k}$	Volume d'une cellule élémentaire du maillage
S	Surface fermée qui entoure le volume $\tau_{i,j,k}$
$\bar{\rho}_{i,j,k}$	Densité de charge moyenne contenue dans le volume élémentaire
$E_{x_{i,j,k}}$	Composante du champ électrique selon l'axe x au point indicé en i, j, k

$E_{y,i,j,k}$	Composante du champ électrique selon l'axe y au point indicé en i, j, k
$E_{z,i,j,k}$	Composante du champ électrique selon l'axe z au point indicé en i, j, k
A	Matrice carrée creuse de dimension $n^3 \times n^3$ composée des coefficients géométriques
u	Vecteur potentiel (composé du n^3 inconnues $V_{i,j,k}$)
β	Vecteur de densité de charge d'espace incluant les conditions aux limites de potentiel
ξ	Précision de convergence souhaitée pour les méthodes itératives
r^ℓ	Vecteur résidu
ℓ	Itération
$a_{i,j,k} ; b_{i,j,k} ; c_{i,j,k} ; d_{i,j,k} ; e_{i,j,k} ; f_{i,j,k} ; g_{i,j,k}$	Coefficients géométriques associés à l'équation de Poisson
ω	Paramètre de sur-relaxation $\omega \in]0,2[$
A_p	Matrice pré-conditionnée
β_p	Second membre pré-conditionné du système linéaire
u_p	Vecteur solution pré-conditionné
P	Matrice inversant l'ordre des inconnus de la matrice
Q_c	Matrice de permutation
D_r	Matrice diagonale
D_c	Matrices diagonales
L	Matrice triangulaire basse
U	Matrice triangulaire haute
$V_a(z)$	Potential analytique selon l'axe z
$\vec{E}_a(z)$	Vecteur champ électrique analytique selon l'axe z
r_s	Rayon spectral
$Err_{relative}$	Erreur relative
\tilde{V}	Solution numérique approchée du potentiel électrique
d	Distance inter-électrodes
v_{str}	Vitesse de la charge d'espace
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	Delta d'une maille
$\bar{n}(t)$	Densité moyenne
$n_{i,j,k}$	Densité au point i, j, k
CM	Coefficient de MUSCL
p_i, p_j et p_k	Pente des densités pour MUSCL
$\tilde{n}_{i,j,k}$	Solution numérique approchée de la densité
$n_{a,i,j,k}$	Densité analytique
v_{esp_x}	Composante en x de la vitesse des espèces
v_{esp_y}	Composante en y de la vitesse des espèces

v_{esp_z}	Composante en z de la vitesse des espèces
\vec{E}_L	Vecteur solution de l'équation de Laplace
E_{L_x}	Composantes du champ géométrique en x
E_{L_y}	Composantes du champ géométrique en y
E_{L_z}	Composantes du champ géométrique en z
\vec{E}'	Vecteur champ créé uniquement par la charge d'espace
\vec{J}	Courant total
\vec{J}_d	Courant de déplacement
\vec{J}_c	Courant de conduction
J_{cx}	Composantes du courant de conduction en x
J_{cy}	Composantes du courant de conduction en y
J_{cz}	Composantes du courant de conduction en z
I	Courant de décharge
Dy_t	Ecart du streamer par rapport à l'axe z
Dz_t	Distance parcourue par le streamer projeté sur l'axe z
$D_{parcours}$	Distance parcourue par le streamer

TITLE OF THE THESIS

3D simulation of a pine to plane corona discharge in dry air : High performance computing, Poisson equation solvers and Physics

ABSTRACT

This work is devoted to the three dimensional (3D) simulation of streamer corona discharges in air at atmospheric pressure using high-performance parallel computing. When a pulsed high-voltage is applied between a tip and a plane in air, the strong electric field lines constricted around the tip induce the simultaneous propagation of several streamers leading to a corona discharge with a tree structure. Only a true 3D electro-hydrodynamics simulation is able to reproduce this branching and to provide the orders of magnitude of the local deposited energy and the concentration of the species created during the discharge phase. However, such a 3D simulation which requires large computational memory and huge time calculation is nowadays accessible only when performed with massively parallel computation.

In the field of 3D electro-hydrodynamics simulations, a special attention must be paid to the efficiency of solvers in solving 3D elliptic equations because their contribution can exceed 80% of the global computation time. Therefore, a specific chapter is devoted to test the performance of iterative and direct methods (such as SOR R&B, BiCGSTAB and MUMPS) in solving elliptic equations, using the massively parallel computation and the MPI library. The calculations are performed on the supercomputer EOS of the CALMIP network, with a number of computing cores and meshes increasing up to respectively 1800 and 800^3 (i.e. more than 1/2 Billion meshes). The performances are compared for the calculation of the geometric potential and in a dynamic simulation conditions consisting in the propagation of an analytical space charge density characteristic of the streamers.

To perform a complete 3D simulation of the streamer discharge, must also involve a robust algorithm able to solve the coupled conservation equations of the charged particle density with very sharp gradients characteristic of the streamers. In this manuscript, the MUSCL algorithm is tested under different propagation conditions of a cubic density (with uniform or non-uniform velocity field). The 3D code, designed to solve the complete electro-hydrodynamics model of the discharge (coupling the conservation equations, the Poisson equation and the chemical kinetics) is validated by comparing the 3D and 2D results in a simulation conditions presenting a rotational symmetry around the propagation axis of a mono-filamentary streamer.

Finally, the first results of the 3D simulations of the discharge phase with the propagation of one or several asymmetric streamers are presented and analyzed. These simulations allow to follow the tree structure of a corona discharge when a pulsed voltage is applied between a tip and a plane. The ignition of the tree structure is studied as a function of the initial position of the plasma spots.

KEYWORDS

3D simulation, corona discharges, high performance computing, MPI, streamer, Poisson equation

TITRE DE LA THESE

Simulation 3D d'une décharge couronne pointe-plan dans l'air : calcul haute performance, algorithmes de résolution de l'équation de Poisson et analyses physiques.

RESUME

Cette thèse porte sur la simulation tridimensionnelle (3D) des décharges couronnes à l'aide du calcul haute performance. Lorsqu'on applique une impulsion de haute tension entre une pointe et un plan, les lignes de champ électrique fortement resserrées autour de la pointe induisent la propagation simultanée de plusieurs streamers et la formation d'une décharge couronne de structure arborescente. Dans ces conditions, seule une simulation électro-hydrodynamique 3D est apte à reproduire cette structure et fournir les ordres de grandeur de l'énergie déposée et de la concentration des espèces créées durant la phase de décharge. Cependant, cette simulation 3D est très consommatrice en temps et mémoire de calcul et n'est désormais accessible que grâce à l'accroissement permanent de la puissance des ordinateurs dédié au calcul haute performance.

Dans le cadre d'une simulation électro-hydrodynamique 3D, une attention particulière doit être prise concernant l'efficacité des solveurs à résoudre les équations elliptiques 3D car leur contribution en termes de temps de calcul peut dépasser 80% du temps global de la simulation. Ainsi, une partie de manuscrit est consacrée aux tests de performances de méthodes de résolution d'équations elliptiques directes ou itératives telle que SOR R&B, BiCGSTAB et MUMPS, en utilisant le calcul massivement parallèle et les bibliothèques MPI. Les calculs sont réalisés sur le supercalculateur EOS du réseau CALMIP, avec un nombre de cœurs de calcul allant jusqu'à 1800, et un nombre de mailles atteignant 800^3 (soit plus 1/2 Milliard de mailles). Les tests de performances sont réalisés en statique sur le calcul du potentiel géométrique et en dynamique en propageant une densité de charge d'espace analytique caractéristique des streamers.

Pour réaliser une simulation complète 3D de la décharge il faut également intégrer au programme un algorithme capable de résoudre les équations de transport de particule chargée à fort gradients de densité caractéristiques aux streamers. Dans ce manuscrit, l'algorithme MUSCL est testé dans différentes conditions de propagation d'un cube de densité (à vitesse homogène ou non homogène spatialement) afin d'optimiser le transport des densités d'espèces chargées impliquées. Le code 3D, conçu pour résoudre le modèle électro-hydrodynamique complet de la décharge (couplant les équations de transport, de Poisson et de cinétique réactionnelle) est ensuite validé par la confrontation des résultats 3D et 2D dans une condition de simulation présentant une symétrie de révolution autour de l'axe de propagation d'un streamer.

Enfin, les premiers résultats des simulations 3D de la phase décharge avec la propagation d'un ou plusieurs streamers asymétriques sont présentés et analysés. Ces simulations permettent de suivre la structure arborescente de la décharge lorsqu'on applique une tension pulsée entre une pointe et un plan. L'initiation de la structure arborescente est étudiée en fonction de la position de spots plasmas et de leur influence sur l'amorçage des streamers.

MOTS-CLES

Simulation 3D, décharges couronnes, calcul haute performance, MPI, streamer, équation de Poisson