Vers la simulation particulaire réaliste de l'interaction laser-plasma surcritique : conception d'un schéma implicite avec amortissement ajustable et fonctions de forme d'ordre élevé

Mathieu Drouin

▶ **To cite this version:**

Mathieu Drouin. Vers la simulation particulaire réaliste de l'interaction laser-plasma surcritique : conception d'un schéma implicite avec amortissement ajustable et fonctions de forme d'ordre élevé. Mathématiques [math]. École normale supérieure de Cachan - ENS Cachan, 2009. Français. NNT : . tel-00442715

HAL Id: tel-00442715
https://theses.hal.science/tel-00442715

Submitted on 22 Dec 2009

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 présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ECOLE NORMALE SUPERIEURE DE CACHAN

Spécialité : Mathématiques appliquées - physique des plasmas

par

Mathieu DROUIN

Vers la simulation particulaire réaliste de l'interaction laser-plasma surcritique : conception d'un schéma implicite avec amortissement ajustable et fonctions de forme d'ordre élevé

soutenue le 6 novembre 2009 devant le jury composé de :

MM.	Guy Bonnaud	Rapporteur
	Daniel Bouche	Directeur de thèse
	Laurent Desvillettes	Président
	Laurent Gremillet	Directeur de thèse
	Anne Héron	Examinatrice
	Eric Sonnendrücker	Rapporteur

Remerciements

Je tiens avant tout à remercier Laurent Gremillet et Daniel Bouche qui ont défendu ma candidature pour l'obtention du Contrat de Formation par la Recherche, qui a assuré le financement de ma thèse. Je remercie Daniel qui m'a fait confiance et m'a soutenu pour la suite de mon parcours. Mes pensées vont également à MM. Guy Bonnaud et Eric Sonnendrücker qui ont accepté de rapporter cette thèse.

J'exprime ma gratitude à Laurent Gremillet qui m'a offert la possibilité de travailler à l'interface entre méthodes numériques et physique, assouvissant ainsi un souhait longtemps resté fantasmatique. Grâce à ses conseils j'ai pu non seulement renforcer et affûter mon expérience de la simulation numérique, mais aussi mieux comprendre des problématiques clé en physique des plasmas. Parmi celles-ci, l'étude des instabilités faisceau-plasma attisait particulièrement ma curiosité, Laurent en fin limier de la question a su m'en transmettre les rudiments et je lui en sais gré. En plus d'être un guide dans ma découverte de la physique des plasmas, Laurent a su aussi me motiver et me recadrer lorsque ce fut nécessaire. De même ses remarques et son regard critique sur les aspects analytiques de ce travail ont permis de donner une véritable cohérence à l'analyse des schémas numériques employés et de relier les propriétés de ceux-ci aux divers comportements observés dans les simulations. Cette collaboration constructive a joué un rôle important dans la réussite de ce travail, ouvrant aujourd'hui des perspectives de développement prometteuses pour la simulation particulaire dans le service de physique des plasmas et d'électromagnétisme. Pour toutes ces raisons ce fut un plaisir que de travailler avec Laurent Gremillet pendant un peu plus de trois ans et j'espère que le travail effectué au cours de cette thèse pourra être poursuivi !

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Jean-Claude Adam et Anne Héron, du Centre de Physique de Théorique de l'École Polytechnique, qui ont su me transmettre l'impulsion initiale sans laquelle le code ELIXIRS, développé au cours de cette thèse, n'aurait jamais vu le jour. Un grand merci à Anne qui m'a expliqué le fonctionnement du solveur de l'équation d'onde, pierre angulaire du code, à partir duquel j'ai commencé à travailler sur la méthode implicite. Les conseils qu'ils m'ont prodigués ont toujours permis de mieux comprendre la validité des résultats obtenus par la méthode implicite.

Par ailleurs, je tiens à remercier Erik Lefebvre qui m'a accueilli dans le laboratoire IRM et qui a toujours apporté des explications précises à mes questions au sujet du code Calder. Mes remerciements vont également à Rachel Nuter qui a été une collaboratrice d'une grande rigueur. Sa méthodologie a nettement contribué à améliorer la fiabilité du code Calder.

En outre, je remercie Alain Bourdier avec qui j'ai collaboré de façon tout aussi fructueuse qu'inattendue sur la thématique du chauffage stochastique. Il m'a apporté un regard plus distant sur la physique, soulignant en particulier l'importance de la désobéissance dans tout travail créatif.

Je remercie également Emeric Falize, alias *Falizounet*, dont j'ai partagé le bureau pendant deux ans. Combien de lancers de boulettes, de restaurants, de discussions interminables sur les promenades à proximité des trous noirs de Kerr, de Becherovka et de Limoncello n'avons-nous partagé. Cette pile électrique, aux grandes qualités humaines et scientifiques, a toujours su me soutenir dans les différents moments qui ont jalonné ces trois ans de thèse.

Un grand merci à Benoît Canaud qui m'a accompagné en conférence à Prague, et de façon plus mémorable à Hirschegg où j'ai constaté ses talents de surfeur émérite... Sa complicité et ses boutades durant la phase terminale de thèse ont été un véritable stimulant.

Plus généralement, je remercie Laurence Bonnet et Daniel Van-Der-Hagen grâce auxquels le service de physique des plasmas reste une véritable pépinière à thèsards et post-doctorants. Parmi les doctorants, je remercie Michaël Carrie, Déborah Elbaz, Yoan Lévy, Sarah Mauger, Zorah Hammouch et Aude Champmartin pour leur sympathie et je leur souhaite le meilleur pour mener à bien leurs recherches au cours des deux ans à venir. Parmi les jeunes docteurs et postdocs, je remercie Michel Albrecht-Marc -véritable lutin excentrique tout droit échappé d'une mare de grenouilles dynamitée- pour ses conseils et sa sympathie, mais aussi Solène le Bourdiec numéricienne invétérée pour les discussions que nous avons échangées au début de ma thèse. Je dédie également un clin d'œil bienveillant à Xavier Davoine, qui a effectué sa thèse en même temps que moi au sein du laboratoire IRM. Je souhaite également bonne route à Evangelos Siminos, Arnaud Beck et Gonzalo. Merci à Christine Clique, Stéphanie Champeaux, Gilles Riazuello, Claude Gouedard, Didier Bénisti, Michel Primout et Serge Bouquet pour leur accueil chaleureux dans le service PPE. Je n'oublie pas Nathan, Anne, Aude, Olaf, Clotilde, Nox, Florence, Suzanne... qui ont égaillé tous à leur façon ces trois années sur le centre et en dehors. Merci à Clotilde, pour ses crêpes à la confiture dégoulinantes !

Pour finir je remercie chaleureusement ma famille, et en particulier mes parents et Thierry, qui m'ont tour à tour soutenu ou patiemment supporté tout au long de cette thèse !

Enfin, je remercie Sophie tendre et patiente qui a su canaliser mon énergie pendant ces trois années. Maintes fois, elle m'a aidé à améliorer mes présentations orales avant de partir en conférence. Que de sentiers n'avons nous parcourus, et de péripéties traversées... Louant d'abord un bourricot à Ajaccio, nous avons traversé monts, vallées et rivières avant de le troquer contre une autruche. Celle-ci, bien plus gaillarde, nous a mené jusqu'à Watamu... Hélas, la pauvre bête, tétanisée, a déguerpi en apercevant une bande de musaraigne-éléphant à croupion doré ne laissant derrière elle qu'un nuage de plumes multicolores. C'était toute l'étoffe nécessaire pour tisser ce lien, satiné, fibre à fibre... longuement, jusqu'à ce qu'il se duplique formant des motifs, ici un 3, là un huit, de réplique en répliques. Et voilà finalement une toile, une aile, une voile au parfum de vanille, indefectible qui m'a soutenu et porté des prémices jusqu'au final.

Table des matières

TABLE DES MATIÈRES iv
TABLE DES FIGURES viii
LISTE DES TABLEAUX xv

Introduction **1**

I Etude du chauffage numérique dans la méthode explicite **6**

1 Aspects généraux d'une méthode PIC explicite **7**
1.1 Résolution de l'équation de Vlasov 7
1.2 Assignation des charges et interpolation des champs 10
1.3 Non-conservation de l'énergie 12
1.4 Schéma PIC conservatif en énergie 15
1.5 Résolution des équations de Maxwell 16
1.5.1 Schéma de Yee 16
1.5.2 Correction de Boris 17
1.6 Méthodes conservant la charge 18
1.7 Assignation du courant par la méthode d'Esirkepov 19
1.7.1 Formulation bidimensionnelle 19
1.7.2 Formulation tridimensionnelle 22
1.7.3 Incertitude sur le calcul de la partie transverse du courant 23
1.7.4 Validation numérique : Plasma maxwellien à l'équilibre . . 23

2 Etude de la relation de dispersion du plasma numérique et du chauffage numérique **27**
2.1 Introduction 27
2.2 Analyse de la discrétisation spatiale 28
2.2.1 Définition du problème et calculs préliminaires 28
2.2.2 Couplage de répliques sur la densité 30
2.2.3 Détermination de la relation de dispersion 31
2.2.4 Modifications pour un schéma conservatif en énergie 32
2.2.5 Couplage de répliques et instabilité numérique 32

2.2.6 Résolution numérique : influence du facteur de forme . . . 34
2.3 Analyse de la discrétisation en temps . . . 39
2.4 Analyse couplant la discrétisation en temps et en espace . . . 41
2.5 Variation de l'énergie totale en fonction du pas spatial, du nombre de particules par maille et de l'ordre . . . 45
2.6 Régimes d'auto-chauffage linéaire et exponentiel . . . 49
2.7 Atténuation du chauffage numérique par les collisions . . . 56
2.8 Applications en physique de l'interaction laser-plasma surcritique 58
2.8.1 Accélération de protons par laser . . . 58
2.8.2 Génération d'électrons rapides pour le chauffage isochore . 60
2.9 Conclusions . . . 63

II Développement d'un code implicite relativiste 65

3 Approximations physiques et schémas numériques en simulation PIC 66
3.1 Modèle hybride fluide-particule . . . 67
3.2 La méthode implicite des moments . . . 69
3.3 La méthode implicite directe . . . 73

4 ELIXIRS : un code électromagnétique relativiste implicite 76
4.1 La méthode implicite directe électrostatique . . . 77
4.1.1 Discrétisation temporelle . . . 78
4.1.2 Formulation faible . . . 79
4.1.3 La méthode implicite directe . . . 81
4.1.4 Prise en compte du terme de gradient . . . 82
4.1.5 Prise en compte des itérations $k > 1$ . . . 83
4.2 Extension relativiste avec amortissement ajustable de la méthode implicite électromagnétique . . . 85
4.2.1 Le système de Vlasov-Maxwell électromagnétique et relativiste . . . 85
4.2.2 Discrétisation temporelle des équations de Lorentz et Maxwell 86
4.2.3 Formulation faible de l'équation d'onde sur le champ électrique . . . 88
4.2.4 Autres formes de l'équation d'onde . . . 93
4.2.5 Linéarisation simplifiée des termes de force . . . 95
4.3 Résolution numérique de l'équation d'onde électromagnétique . . 96
4.3.1 Résolution par une méthode itérative . . . 96
4.3.2 Discrétisation spatiale de l'équation d'onde . . . 98
4.3.3 Correction de la charge . . . 101
4.3.4 Conditions aux limites électromagnétiques absorbantes ou injectantes . . . 103

4.4 Analyse numérique de la méthode implicite directe 105
4.4.1 Relation de dispersion d'une onde électromagnétique dans le vide 105
4.4.2 Relation de dispersion électrostatique du plasma discrétisé en espace et en temps 107

5 Validation du code ELIXIRS : simulations numériques 115
5.1 Injection, propagation et absorption d'ondes électromagnétiques dans le vide 116
5.1.1 Injection/absorption d'une onde plane 116
5.1.2 Injection/absorption d'un faisceau gaussien 116
5.1.3 Propagation d'une onde plane avec amortissement ajustable 120
5.2 Validation du pousseur relativiste 121
5.2.1 Mouvement d'une charge dans une onde plane 121
5.2.2 Comparaison aux simulations numériques 123
5.3 Influence de la discrétisation spatio-temporelle et du facteur de forme sur la conservation de l'énergie : étude d'un plasma Maxwellien 125
5.4 Expansion de plasma dans le vide 132
5.4.1 Cas non relativiste 132
5.4.2 Cas relativiste 134
5.5 Instabilité deux-faisceaux relativiste 139
5.5.1 Prédictions de la théorie linéaire 139
5.5.2 Simulations numériques 141
5.6 Instabilité de filamentation relativiste 147
5.6.1 Théorie linéaire 147
5.6.2 Simulations numériques 148
5.7 Interaction laser-plasma dense en régime relativiste 153
5.7.1 Cible épaisse quasi-1D 153
5.7.2 Cible 2D de dimensions réalistes 156
5.8 Conclusions 162

Perspectives 163

III Annexes 165

A Relation de dispersion généralisée d'un plasma Maxwellien incluant les discrétisations en temps et en espace 166

B Transformation de Fourier de l'équation d'onde 171

C Trajectoire d'une charge dans une onde plane 177
C.1 Intégration des équations du mouvement 177
C.2 Influence d'une équation d'enveloppe 182

D Détermination du bilan d'énergie dans les simulations laser-plasma 184

Bibliographie 186

Table des figures

1.1 Algorithme de principe d'une méthode PIC 10
1.2 Facteurs de forme d'ordre 0 (NGP), 1 et 2. 11
1.3 Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation linéaire, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce. 25
1.4 Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation quadratique, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce. 25
1.5 Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation cubique, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce. 25

2.1 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 0 (NGP) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite). 34
2.2 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 0 (NGP) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite). 35
2.3 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 1 (PIC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite). 35
2.4 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 1 (PIC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite). 36
2.5 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 2 (TSC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite). 36
2.6 Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 2 (TSC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite). 37

2.7 Taux de croissance maximal de l'instabilité d'aliasing en fonction de $\Delta x/\lambda_D$ pour différentes valeur de l'ordre de la fonction d'interpolation. 38
2.8 Solutions de la relation de dispersion (2.63) pour différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$. 41
2.9 Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\Delta x/\lambda_D = 1$, un schéma d'interpolation d'ordre 1, et différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$. . 42
2.10 Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\Delta x/\lambda_D = 1$, un schéma d'interpolation d'ordre 3, et différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$. . 43
2.11 Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 1.5$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$. 43
2.12 Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 2$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$. 44
2.13 Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 2.5$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$. 44
2.14 $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $1dx2dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3. 46
2.15 $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $2dx2dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3. 47
2.16 $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $3dx3dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3. 48
2.17 Évolution temporelle de la température pour diverses températures initiales. 49
2.18 Évolution temporelle de l'énergie électrique longitudinale totale pour diverses températures initiales. Simulations avec 500 macro-particules par maille. 50
2.19 Évolution temporelle du spectre de l'énergie électrique. Simulations avec 500 macro-particules par maille. 51
2.20 Densité spectrale du champ électrique normalisée par l'énergie cinétique initiale pour diverses valeurs du nombre de macro-particules par maille et $\Delta x/\lambda_D = 1$. Spectre théorique du plasma continu (pointillé rouge), spectre théorique du plasma discrétisé conservatif en énergie (trait plein rouge) et spectre obtenu à partir des simulations (bleu). 54
2.21 Densité spectrale du champ électrique normalisée par l'énergie cinétique initiale pour diverses valeurs de $\Delta x/\lambda_D$, 500 macro-particules par maille et une interpolation linéaire. Spectre théorique du plasma continu (pointillé rouge), spectre théorique du plasma discrétisé conservatif en énergie (trait plein rouge) et spectre obtenu à partir des simulations (bleu). 54
2.22 Taux de chauffage calculé à partir de l'énergie cinétique (trait plein), et à partir de l'écart entre spectres simulé et théorique discrétisé (pointillés). 55

2.23 Evolution de la température longitudinale normalisée $T_x/T_x(0)$ avec prise en compte ou non des collisions pour les facteurs de forme d'ordre un 2.23(a) et deux 2.23(b). La densité du plasma vaut $n_e = 100n_c$ et $T(0) = 100$eV ($\Delta x/\lambda_D = 71$). 58
2.24 Energies cinétiques moyennes totale par maille (bleu), électronique (verte) et ionique (rouge) obtenues pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique. 59
2.25 Bilan d'énergie pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique. 60
2.26 Espace des phases ionique à la fin de la simulation pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique. 60
2.27 Evolution de l'écart à la conservation de l'énergie en pourcents : irradiations à $1\omega_0$ et $2\omega_0$. 62
2.28 Densité d'énergie cinétique (normalisée par $m_e c^2 n_c$) des électrons rapides (*i.e* d'énergie supérieure à 100 keV) au moment de l'extinction du laser. 62
2.29 Energie moyenne en keV des électrons thermiques (*i.e* d'énergie inférieure à 10 keV) environ 0.6 ps après extinction du laser. . . . 63

4.1 Vitesse de phase de la racine la moins amortie de Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas) et $\theta_f = 0$. Un domaine $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$ plus étroit est représenté à droite. . . . 107
4.2 Vitesse de phase (à gauche) et taux d'amortissement $\Im\omega\Delta t$ (à droite) de la racine la moins amortie de l'Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas à gauche, et de bas en haut à droite) avec $\theta_f = 1$. 108
4.3 Identique à la Fig. 4.2 mais sur un domaine $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$ plus étroit. 108
4.4 Vitesse de phase (à gauche) et taux d'amortissement $\Im\omega\Delta t$ (à droite) de la racine la moins amortie de l'Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas à gauche, et de bas en haut à droite) avec $\theta_f = 1$. La vitesse de phase sans amortissement ($\theta_f = 0$) est représentée en pointillés. 109
4.5 Identique à la Fig. 4.4 mais sur un intervalle $(k_x\Delta x)$ plus étroit. . 109
4.6 Partie réelle de la pulsation (en bleu) et taux de croissance (en rouge) en fonction de $k\Delta x$ pour le mode dominant solution de Eq. (4.169) avec $\omega_p\Delta t = 2$, $\theta_f = 1$ et un facteur de forme linéaire ($m = 1$) : $\Delta x/\lambda_D = 32$ (à gauche), 20 (au centre) et 4 (à droite). . 111

5.1 Propagation dans le vide en incidence normale : coupes du champ E_y lors de la propagation, pendant et après absorption au bord droit. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$. 117
5.2 Propagation dans le vide en incidence normale : cartes des champs E_x et E_y. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = 0.2$, $\Delta\widetilde{y} = 0.8$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$. 118
5.3 Propagation dans le vide en incidence normale : coupes du champ E_y lors de la propagation, pendant et après absorption au bord droit. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = 0.2$, $\Delta\widetilde{y} = 0.8$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$. 118
5.4 Propagation dans le vide selon une incidence de 30° : cartes des champs E_y et E_x lors de la propagation, pendant et après absorption. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$. 119
5.5 Propagation d'une onde plane avec $\theta_f = 1$ (en haut à gauche), $\theta_f = 0$ (en haut à droite), et un indice θ_f variable suivant Eq. (5.1) (en bas). 120
5.6 Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et agrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus avec le code PIC explicite (CALDER), tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta. 124
5.7 Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et aggrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta. 125
5.8 Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et aggrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe (ELIXIRS) avec $\theta_f = 0$, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta. 126

5.9 Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et agrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe et le pousseur du code LSP, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta. . . . 127
5.10 Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électrostatique avec facteur de forme linéaire. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas. 129
5.11 Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électromagnétique avec facteur de forme linéaire. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas. 130
5.12 Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électromagnétique avec facteur de forme quadratique. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas. 131
5.13 Evolution temporelle des profils de densité ionique : simulations explicite (à gauche) et implicite (à droite) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$. 132
5.14 Espace des phases ionique à $t = 2600\omega_p^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite (à droite) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$. 133
5.15 Evolution temporelle des énergies cinétiques électronique (en rouge) et ionique (en vert) : simulations explicite (en trait plein) et implicite (en pointillés) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$. . . . 133
5.16 Evolution temporelle des énergies cinétiques des électrons chauds (en vert), des électrons froids (en rouge) et des ions (en bleu). Simulation explicite (en pointillés) et simulation implicite (en trait plein) avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$, et $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$, respectivement. Le nombre de particules dans la boîte de simulation vaut $N_p = 6 \times 10^4$ (à gauche) et $N_p = 6 \times 10^5$(à droite). 136
5.17 Espace des phases des ions à $600\omega_0^{-1}$: simulations implicites avec $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$. 136

5.18 Espace des phases des ions à $600\omega_0^{-1}$: simulations explicites avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$. 137
5.19 Evolution temporelle des profils de densité ionique dans les cas explicite et implicite avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$ et $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$, respectivement. 138
5.20 Taux de croissance théorique des fluctuations électromagnétiques dans le plan (k_x, k_y). 140
5.21 Orientation du champ électrique et taux de croissance théorique des fluctuations électromagnétiques dans le plan (k_x, k_y). 141
5.22 Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation explicite avec 14 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu). 142
5.23 Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation implicite avec 14 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu). 143
5.24 Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation explicite avec 100 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu). 143
5.25 Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminés avec $|E_x|$ et $20 < \omega_e t < 30$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite). 144
5.26 Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminés avec $|B_z|$ et $20 < \omega_e t < 30$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite). 145
5.27 Evolution temporelle des énergies cinétiques du plasma (rouge) et du faisceau (vert) normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation avec 14 particules/maille par espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite). 145
5.28 Cartes de densité des électrons du plasma à $\omega_e t = 60$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite). 146
5.29 Cartes de densité des électrons du faisceau à $\omega_e t = 60$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite). 146
5.30 Taux de croissance (gauche) et rapport des composantes électrostatique et électromagnétique du champ électrique (droite) pour $n_b/n_p = 0.8$, $\gamma_b = 4$, $T_b = 100$ keV et $T_p = 5$ keV. 148
5.31 Evolution temporelle des énergies électriques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et E_z (en bleu). 149

5.32 Evolution temporelle des énergies magnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Énergie du champ B_x (en rouge), B_y (en vert) et B_z (en bleu). 149
5.33 Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminé avec $|B_x|$ et $8 < \omega_e t < 16$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite). 150
5.34 Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminé avec $|B_y|$ et $8 < \omega_e t < 16$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite). 150
5.35 Prédominance des effets électrostatiques sur les effets électromagnétiques pendant la phase linéaire de l'instabilité. 151
5.36 Densités de courant $J_z(x, y)$ à différents instants $\omega_e t = 24, 40, 60$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite). 152
5.37 Espace des phases (x, p_x) des électrons à $t = 198\omega_0^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte. 154
5.38 Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulations explicite (en rouge) et implicite (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$. 155
5.39 Espace des phases (x, p_x) des ions à $t = 792\omega_0^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte. 155
5.40 Evolution temporelle des énergies cinétiques des électrons (en rouge) et des ions (en vert) : simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte. 156
5.41 Evolution temporelle de l'énergie cinétique des électrons (en rouge) et des ions (en vert) : simulation explicite (à gauche), simulations implicites avec $\theta_f = 0.1$ (au centre) et $\theta_f = 0.5$ (à droite). 157
5.42 Espace des phases (x, p_x) des électrons à $t = 96\omega_0^{-1}$: simulation explicite et implicites avec $\theta_f = 0.1$ et $\theta_f = 0.5$. 158
5.43 Espace des phases (x, p_x) des ions à $t = 523\omega_0^{-1}$: simulation explicite et implicites avec $\theta_f = 0.1$ et $\theta_f = 0.5$. 159
5.44 Densité d'énergie cinétique des électrons (normalisée par $m_e c^2 n_c$) à $t = 67\omega_0^{-1}$ et $t = 86\omega_0^{-1}$: simulation explicite (en haut) et simulations implicites avec $\theta_f = 0.1$ (au centre) et $\theta_f = 0.5$ (en bas). 160
5.45 Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulation explicite (en rouge) et simulation implicite avec $\theta_f = 0.1$ (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$. 161
5.46 Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulation explicite (en rouge) et simulation implicite avec $\theta_f = 0.5$ (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$. 161

Liste des tableaux

1.1 Comparaison des temps de calcul totaux par processeur en secondes avec les méthodes d'Esirkepov et de Boris. 26
1.2 Comparaison des temps de calcul par processeur, par particule et par itération en secondes. 26

2.1 Valeur maximale du taux de croissance Γ_{max}/ω_p (et mode k_{max} associé) pour quelques valeurs de $\Delta x/\lambda_D$ en fonction de l'ordre. . 38
2.2 Valeur maximale du taux de croissance Γ_{max}/ω_p (et mode k_{max} associé) pour quelques valeurs de $\Delta x/\lambda_D$ en fonction de l'ordre. . 38
2.3 Taux de croissance maximal Γ_{max}/ω_p et nombre d'onde $k_{max}\lambda_D$ associé pour diverses valeurs de $\omega_p\Delta t$. 41
2.4 Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $1dx2dv$. 47
2.5 Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $2dx2dv$. 47
2.6 Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $3dx3dv$. 48
2.7 Ecart à la conservation de l'énergie en fonction de l'ordre et du nombre de macro-particules par maille à la fin de la simulation ($t = 864\omega_0^{-1}$). 59

4.1 Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $\Delta x/\lambda_D$ et de l'ordre du facteur de forme pour $\omega_p\Delta t = 2$ et $\theta_f = 1$. 111
4.2 Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $v_t\Delta t/\Delta x$ et du paramètre d'amortissement θ_f pour $\omega_p\Delta t = 2$ et un facteur de forme linéaire ($m = 1$). 112

4.3 Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $v_t\Delta t/\Delta x$ et du paramètre d'amortissement θ_f pour $\omega_p\Delta t = 2$ et un facteurde forme quadratique ($m = 2$). 113
4.4 Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction des pas d'espace et de temps, du facteur de forme, pour un ratio $v_t\Delta t/\Delta x = 0.09$ et $\theta_f = 1$. 114

5.1 Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électrostatique avec facteur de forme linéaire.127
5.2 Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme linéaire. 128
5.3 Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme quadratique. 128
5.4 Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme cubique. 128
5.5 Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme d'ordre quatre. 128
5.6 Variation de l'énergie totale et énergie cinétique ionique maximale (keV) à $2600\omega_p^{-1}$ avec $N_p = 6 \times 10^4$. 134
5.7 Variation de l'énergie totale et énergie cinétique ionique maximale (keV) à $2600\omega_p^{-1}$ avec $N_p = 6 \times 10^5$. 134
5.8 Variation relative de l'énergie totale en fonction du nombre de particules dans la boîte de simulation. 136
5.9 Temps de calcul en fonction du nombre de particules dans la boîte de simulation pour les simulations explicite et implicite. 137
5.10 Interaction laser-plasma quasi-1D : variation de l'énergie dans les simulations explicite ($\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$) et implicite ($\Delta t = 0.14\omega_0^{-1}$) pour différentes valeurs de θ_f. Les autres paramètres de simulation sont précisés dans le texte. 154

Introduction

La révolution des lasers intenses qui s'est produite au cours des vingt dernières années, grâce notamment à la mise au point de la technique d'amplification par dérive de fréquence [1], permet aujourd'hui d'atteindre des puissances de l'ordre du pétawatt (PW), donnant lieu après focalisation à des éclairements supérieurs à $10^{20}\mathrm{Wcm}^{-2}$ sur des durées voisines de la picoseconde [2, 3]. Soumis à des lasers aussi intenses, les électrons contenus dans le milieu (solide ou gazeux) irradié (et instantanément ionisé) oscillent à des vitesses proches de la vitesse de la lumière. Plus généralement, une vaste gamme de mécanismes propres à cette physique de l'interaction à haut-flux permet de convertir une fraction importante de l'énergie laser ($\sim$ 0.1 - 0.5) en faisceaux de particules très énergétiques ($\sim$ MeV).

On détermine aisément à partir de l'équation de propagation d'une onde plane électromagnétique dans un plasma froid une densité seuil, dite critique $n_c = \frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}$ (où n_e, m_e, ϵ_0 désignent respectivement la densité électronique, la masse électronique et la permitivité électrique du vide), définie comme la densité au-delà de laquelle un laser de longueur d'onde donnée ne peut plus se propager ($n_c = 10^{21}\mathrm{cm}^{-3}$ pour $\lambda_0 = 1\mu$m). Il s'ensuit que nous pouvons distinguer deux régimes principaux d'interaction selon la transparence ou non du plasma.

En régime sous-critique, la principale application de l'interaction laser-plasma à haut flux est l'accélération d'électrons par sillage laser [4]. Il est désormais possible de produire des faisceaux quasi mono-énergétiques d'électrons à des énergies supérieures au Gev [5], sur des distances de quelques centimètres, grâce à ces accélérateurs d'un nouveau genre. L'exploitation de ces faisceaux d'électrons à des fins de production de rayonnements X intenses et brefs est également activement étudiée [6, 7, 8, 9].

Les faisceaux d'électrons créés dans l'interaction surcritique sont moins énergétiques ($\sim$ MeV) mais transportent une charge bien plus élevée ($\sim \mu$C) que ceux générés par sillage ($\sim$ nC). Capables de se propager en profondeur, ils peuvent donner lieu à un chauffage rapide ($\sim$ ps) - donc isochore - et intense ($\sim$ 100 eV) de la cible dense. A ce titre, ils constituent un outil novateur pour investiguer les propriétés encore largement méconnues de la matière dense et tiède [10, 11]. En outre, en débouchant dans le vide à l'arrière de la cible, ils induisent un champ électrostatique à même d'accélérer les ions de la cible, et au premier chef les protons des contaminants hydrogénés surfaciques. Les faisceaux d'ions ainsi accélérés présentent des propriétés remarquables (briéveté, laminarité ...) les rendant attractifs pour nombre d'applications allant du sondage ultra-rapide de plasmas denses [12], au chauffage isochore [13] et à la protonthérapie [14]. La capacité des électrons produits dans l'interaction surcritique à déposer leur énergie dans des régions denses inaccessibles au laser est également mise à profit dans le schéma d'Allumage rapide de la fusion par confinement inertiel [15, 16].

Au regard de l'approche classique, sur laquelle reposent les installations NIF et LMJ [17, 18], l'originalité de ce schéma tient à la dissociation des phases de compression et de chauffage de la cible fusible. Celui-ci ferait appel aux électrons relativistes accélérés par une impulsion laser PW focalisée dans la cible précomprimée ($\rho \geq 300\text{g/cm}^3$) le succés du projet requiert un transport assez collimaté des électrons (sur une centaine de microns) jusqu'à une région dense de la cible pour y créer un point chaud vérifiant les conditions d'allumage [19]. Dimensionner l'impulsion laser PW (dans le cadre, par exemple, du projet HIPER [20]) suppose donc de connaître le rendement de conversion de l'énergie laser en énergie cinétique "utile", c'est à dire emportée par les particules concourant effectivement, de par leur énergie et leur angle d'émission, à l'ignition. Fonction complexe de l'interaction laser-plasma, de la compétition entre processus collisionnels et collectifs régissant le transport des particules et, bien sûr, de la géomètrie de la cible, son estimation est rendue difficile par les contraintes numériques qu'il s'agit de surmonter.

Quelle que soit l'application considérée, le caractère éminemment cinétique et hors-équilibre de l'interaction laser-plasma et du transport électronique nécessite de résoudre le système complet des équations de Vlasov-Maxwell. Les codes PIC (pour "Particle-In-Cell") constituent pour cela des outils de choix, qui discrétisent le plasma en un grand nombre de macro-particules de taille finie soumises, via l'équation de Lorentz, à des champs moyens auto-consistants [21]. La plupart des codes PIC existants font appel à un algorithme explicite et à un schéma d'interpolation/ projection (des particules vers le maillage et vice versa) les obligeant à une discrétisation spatiale de l'ordre de la longueur de Debye $\Delta x \leq 3 - 5\lambda_D$ (où $\lambda_D = \sqrt{\epsilon_0 k_B T_e / n e^2}$) pour limiter l'auto-chauffage numérique [21]. Si cette contrainte et la condition de Courant électromagnétique sont vérifiées alors la contrainte de stabilité du schéma explicite $\omega_p \Delta t \leq 2$ est également vérifiée. La simulation de cibles initialement denses ($> 1\text{g/cm}^3$) et "froides" ($\lesssim 100$ eV) implique donc des pas spatiaux et temporels extrêmement petits ($\lambda_D \approx 1.6$Å dans un plasma solide d'Aluminium à 10 eV), ce qui oblige à des architectures massivement parallèles dans le cas de systèmes multidimensionnels d'intérêt expérimental. Ne serait-ce que dans une géométrie $2D$, la simulation de l'interaction laser-solide se révèle très contrainte numériquement. Une boîte numérique de $(50\mu\text{m})^2$ requiert ainsi, pour une cible d'Al solide initialisée à 10 eV (soit $n_e = 200 n_c$) et discrétisée avec $\Delta x \sim 3 \times 10^{-4}\mu$m, environ $(1.6 \times 10^5)^2$ mailles et au moins dix fois plus de macro-particules, des valeurs hors d'atteinte par les moyens informatiques actuels. Sans compter une contrainte temporelle tout aussi draconienne imposée par la condition de Courant $\Delta t < \frac{\Delta x}{\sqrt{2}c} \sim 2 \times 10^{-3}$ fs. Une simulation sur une durée réaliste ($\sim$1 ps) implique donc environ 5×10^5 pas de temps. Rien d'étonnant donc à ce que les simulations PIC d'interaction laser-plasma surcritique se soient longtemps limitées à des densités très sous-estimées ($\sim 10 n_c$) et/ou des températures surestimées [22]. Si ces artifices semblent tolérables pour ce qui concerne la

description de la génération des électrons rapides (dans le cas notamment d'un préplasma étendu, de densité modérée, et où l'interaction est confinée), ils interdisent une description réaliste des processus de transport, tout particulièrement en présence de collisions. Le développement de techniques visant à étendre le régime de fonctionnement des codes PIC aux conditions physiques réelles s'impose si l'on aspire à une modélisation précise des phénomènes expérimentaux. C'est cette ambition qui a motivé ce travail de thèse.

On peut distinguer dans l'interaction surcritique la partie de la cible qui nécessite une modélisation complétement cinétique pour reproduire les mécanismes de génération des électrons relativistes, de celle dans laquelle ceux-ci sont transportés et qui au-delà d'une densité avoisinant 100 n_c devient collisionnelle. Les contraintes numériques associées à ce dernier régime ont motivé le développement d'algorithmes spécifiques, fondés sur une modélisation hybride fluide-particulaire. Dans ce cas, les électrons rapides restent traités selon un schéma PIC, tandis que le plasma obéit à un modèle fluide [23, 24, 25, 26, 27, 28]. La modélisation fluide permet d'une part de s'affranchir de l'instabilité d'aliasing provenant de la discrétisation spatiale dans le modèle PIC, et d'autre part d'éliminer les sources hautes fréquences du modèle mathématique, en considérant par exemple un fluide électronique sans inertie. Néanmoins, cette discrimination entre électrons rapides et fluides n'est pas toujours fondée et peut conduire à des résultats erronés [29, 30]. Mener des simulations PIC entièrement cinétiques dans des plasmas dont la densité avoisine $1000n_c$ constitue un véritable défi. Tant du point de vue du chauffage numérique qui doit être jugulé pour atteindre des durées de simulation de plusieurs ps, que du point de vue des collisions coulombiennes relativistes qui imposent un surcoût en temps de calcul. Seuls deux codes ont été développés à cette fin à ce jour : le code explicite collisionnel, PICLS [31], fondé sur une fonction d'interpolation d'ordre 4 et l'introduction d'une densité seuil au-delà de laquelle seuls les effets collisionnels sont traités précisément ; et le code LSP qui tire parti de la dissipation apportée par un schéma implicite pour résoudre le système de Vlasov-Maxwell [32, 33, 34]. A ce jour, deux approches ont été imaginées pour cela : la méthode dite directe et celle dite des moments.

Les premiers algorithmes implicites, dits directs, furent proposés par Cohen, Langdon et Friedman [35, 36, 37] dans le cas électrostatique, puis étendus par Hewett et Langdon [38] au régime électromagnétique. Une extension relativiste a été formulée peu après [39], mais implémentée seulement récemment, et dans une forme simplifiée, dans le code LSP. Cette approche implicite présente un double intérêt. D'abord, libérée des contraintes de stabilité inhérentes aux codes PIC explicites, elle permet d'utiliser des pas de temps affranchis de la contrainte de Courant électromagnétique et de la nécessité de résoudre la fréquence plasma du système. Ensuite l'amortissement qui la caractérise élimine les modes plasma hautes-fréquences, non-résolus, et physiquement peu significatifs car dissipés par les collisions physiques dans les plasmas de densité solide [40].

Nous proposons dans cette thèse un formalisme nouveau de la méthode directe implicite relativiste, fondé sur la formulation faible de l'équation d'onde, que nous résolvons par un algorithme de Newton. Ce formalisme permet en principe d'effectuer des itérations sur la solution obtenue, mais seul le cas à une itération a été retenu en pratique. Les termes sources de densités de charge et de courant sont d'abord prédits à partir des champs connus. Linéarisé autour de ces valeurs prédites, le système de Vlasov-Maxwell se met sous la forme d'une équation d'onde fonction du champ électrique futur. Une fois celle-ci résolue, les trajectoires des particules sont corrigées. Notre algorithme implicite se caractérise par ailleurs par un amortissement ajustable des ondes plasma électrostatiques comme électromagnétiques. Nous avons, pour cela, généralisé aux équations de Maxwell, un schéma dû à Friedman [41], originellement limité à l'équation de Lorentz. Cette propriété est d'un intérêt capital pour les applications portant sur l'interaction laser-plasma, puisqu'elle permet de propager sans dissipation les ondes électromagnétiques dans le vide et de traiter correctement l'interaction laser-plasma dans les régions de faible densité. Un amortissement élevé n'est appliqué que dans les régions les plus denses de la cible, pour lesquelles les modes plasmas (enclins à déclencher un important chauffage numérique) peuvent être négligés. Cet algorithme a été implémenté dans le code ELIXIRS $2dx-3dv$ ($2D$ en espace et $3D$ en vitesse). Outre les caractéristiques déjà citées, ELIXIRS est pourvu d'une fonction d'interpolation quadratique qui limite plus encore sa sensibilité à l'auto-chauffage numérique.

Cette thèse est organisée en deux parties.

La première partie est axée sur les propriétés des méthodes PIC explicites. Dans le premier chapitre, nous introduisons les propriétés et limitations fondamentales d'un code PIC explicite. Dans le deuxième chapitre, nous effectuons l'analyse linéaire du plasma numérique. Les effets des discrétisations spatiales et temporelles sont traitées d'abord isolément, puis simultanément. Divers effets déstabilisants sont mis en évidence, et les régimes stables sont précisés en fonction de l'ordre des fonctions d'interpolation. Nous étudions ensuite le phénomène de chauffage numérique, inhérent aux simulations PIC mal résolues. D'abord mis en évidence par des simulations, nous le relierons autant que faire se peut aux prédictions de l'analyse linéaire. Nous quantifierons les gains apportés par la montée en ordre de la fonction d'interpolation. L'influence bénéfique des collisions coulombiennes sera également démontrée. Enfin, nous présenterons deux applications en physique de l'interaction laser-plasma relativiste à haute densité tirant particulièrement profit des fonctions d'interpolation d'ordre élevé.

L'adaptation de la méthode implicite directe à l'interaction laser-plasma fait l'objet de la seconde - et principale - partie de cette thèse. Nous présentons dans un premier temps un état de l'art des méthodes alternatives adaptées à l'étude de l'interaction laser-plasma et/ou du transport électronique dans les plasmas denses. Nous expliquerons d'abord comment ce type de problème peut être résolu

en adoptant une modélisation hybride à la fois fluide et particulaire. Puis, nous détaillerons l'extension relativiste de la méthode implicite des moments [42], et mettrons l'accent sur ce qui la distingue de la méthode implicite directe.

Le deuxième chapitre est consacré à la formulation de la méthode implicite directe. Nous abordons d'abord le cas électrostatique, qui nous permet d'introduire la formulation faible ainsi que la méthode de Newton. Un algorithme itératif prenant en compte tous les termes issus des linéarisations est fourni. Ensuite, d'une façon analogue, nous traitons le cas électromagnétique relativiste avec amortissement ajustable. Diverses formulations sont proposées en fonction des conditions initiales retenues pour le schéma itératif. Dans la troisième section, nous présentons la méthode de résolution numérique de l'équation d'onde. L'analyse linéaire de l'algorithme implicite est finalement menée, concernant aussi bien ses propriétés électromagnétiques qu'électrostatiques.

Le troisième chapitre présente diverses validations numériques et physiques du code ELIXIRS. Nous nous intéressons tout d'abord à la propagation d'une onde laser dans le vide, et démontrons notamment l'amortissement ajustable propre à notre algorithme. Nous validons ensuite le fonctionnement du pousseur relativiste, en étudiant le mouvement d'une charge dans une onde plane d'éclairement relativiste. Dans un premier exemple couplant champs et plasma, nous étudions l'effet de la discrétisation spatio-temporelle sur la conservation de l'énergie d'un plasma maxwellien. Nous examinons ensuite l'expansion d'un plasma thermique dans le vide puis, avec à l'esprit un scénario d'accélération ionique induite par une population d'électrons relativistes, nous examinons également le cas de deux températures électroniques. Dans la cinquième et la sixième section, nous reproduisons deux instabilités faisceau-plasma en régime relativiste. Enfin, nous traitons le cas de l'interaction laser-plasma surcritique qui constitue la principale motivation de ce travail. Le bon accord quantitatif avec des simulations explicites finement résolues sera mis en évidence, et les gains en temps de calcul accessibles par l'approche implicite seront précisés.

Première partie

Etude du chauffage numérique dans la méthode explicite

Chapitre 1

Aspects généraux d'une méthode PIC explicite

Étourdi du coup, j'entrai sans en demander davantage en ce lieu où des milliers de chauves-souris effrayées s'envolaient et s'écrasaient les unes contre les autres. [...]"Borunda, Borunda, Borunda.", dirent les chauves-souris, et elles partirent en criant et en riant. "Viens", dit la voix de Borunda. Et j'y suis allé, et il m'a obligé à m'asseoir sur une couche des plus commodes, faite de petits os de chauves-souris. Le lit craqua légèrement et, bien que j'eusse un peu peur, je ne voulus rien dire. Une troupe de chauves-souris entra en un chantant cortège et se dirigea vers Borunda.

Arenas, Le Monde hallucinant

1.1 Résolution de l'équation de Vlasov

Une description exacte de la dynamique du plasma en suivant chaque particule étant impossible, nous allons employer une approche probabiliste. L'état de l'espèce α, formée de N_α particules peut être décrit par un point dans le grand espace des phases Γ_α à $6N_\alpha$ dimensions $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_{N_\alpha}, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \ldots \mathbf{p}_{N_\alpha})$. La probabilité de trouver le système dans la cellule de l'espace des phases centrée en

$(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_{N_\alpha}, \mathbf{p}_1, \ldots \mathbf{p}_{N_\alpha})$ est donnée par :

$$F_\alpha(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_{N_\alpha}, \mathbf{p}_1, \ldots \mathbf{p}_{N_\alpha}) d^3r_1 \ldots d^3r_{N_\alpha} d^3p_1 \ldots d^3p_{N_\alpha} \tag{1.1}$$

On montre que la densité de probabilité F_α obéit à l'équation de Liouville :

$$\Big(\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N_\alpha} \mathbf{v}_i . \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \sum_{i=1}^{N_\alpha} \mathbf{X}_i . \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i}\Big) F_\alpha = \frac{dF_\alpha}{dt} = 0 \tag{1.2}$$

On a donc conservation de F_α le long des orbites suivies par le système dans Γ_α. A partir de l'équation de Liouville, on peut construire une hiérarchie de fonctions de distributions réduites à $(N_\alpha - 1, N_\alpha - 2, \ldots 2, 1)$ particules, et les équations cinétiques auxquelles elles obéissent.

L'évolution de la fonction de distribution à une particule $f_{\alpha 1}$ est régie par :

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha_1} + \mathbf{v} . \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_{\alpha_1} + q_\alpha e(\mathbf{E}_e + \mathbf{v} \times \mathbf{B}_e) . \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_{\alpha_1} = B(f_{\alpha_2}) \tag{1.3}$$

De façon générale l'équation sur f_{α_k} fait intervenir $f_{\alpha_{k+1}}$ au second membre, avec $f_{\alpha_{N_\alpha}} \equiv F_\alpha$. Ceci traduit le fait qu'aucune hiérarchie tronquée d'équations ne contient toute l'information associée à l'équation de Liouville. Pour fermer (1.3), on fait une hypothèse sur la forme du second membre. Cette hypothèse conditionnera la physique que l'on souhaite représenter.

Dans un plasma idéal (*i.e*, non-collisionnel), les forces électromagnétiques sont à longue portée. En conséquence on choisit de négliger les corrélations entre les particules, ce qui s'écrit :

$$f_{\alpha_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = f_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f_{\alpha_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \tag{1.4}$$

On obtient alors l'équation cinétique de Vlasov :

$$\frac{\partial}{\partial t} f_{\alpha_1} + \mathbf{v} . \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_{\alpha_1} + q_\alpha e(\mathbf{E}_e + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) . \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f_{\alpha_1} = 0 \tag{1.5}$$

Ici, $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ désignent les champs qui résultent des interactions sur des distances supérieures à la longueur de Debye λ_D : La décorrélation des électrons, *i.e*, $f_{e_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = f_{e_1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) f_{e_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$ suppose une distance inter-particulaire d_e très inférieure à λ_D.

$$d_e \propto n_e^{-\frac{1}{3}} \ll \lambda_D = \Big(\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}\Big)^{\frac{1}{2}} \tag{1.6}$$

où n_e et T_e dénotent les densités et température électronique. La condition équivalente $n_e \lambda_D^3 \gg 1$ (un grand nombre d'électrons est contenu dans la sphère de Debye) définit un plasma dilué où les interactions binaires sont négligeables.

L'équation (1.5) doit être résolue simultanément avec le système de Maxwell suivant :

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \tag{1.7}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{1.8}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \tag{1.9}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu_0 \mathbf{j} \tag{1.10}$$

Les densités de charge et de courant $(\rho, \mathbf{j})$ sont données par :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_\alpha \int f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \tag{1.11}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \int \mathbf{v} f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p} \tag{1.12}$$

Si on pose,

$$\mathbf{X} = \mathbf{r}; \qquad \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \frac{\mathbf{Y}}{m\sqrt{1 - \frac{\mathbf{Y}^2}{m^2 c^2}}} \tag{1.13}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{p}; \qquad \frac{d\mathbf{Y}}{dt} = q_\alpha(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \tag{1.14}$$

L'équation de Vlasov de l'espèce α s'écrit (avec $f_\alpha \equiv f_{\alpha_1}$) :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{d\mathbf{X}}{dt} . \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{X}} + \frac{d\mathbf{Y}}{dt} . \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{Y}} = 0 \tag{1.15}$$

Cette équation indique que f_α est conservée le long des courbes $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$. La méthode PIC (pour Particle-In-Cell) exploite cette invariance en animant une assemblée de macroparticules, chacune représentant un grand nombre d'ions ou d'électrons obéissant aux équations du mouvement (1.13). On rappelle que les champs qui interviennent dans l'équation de Vlasov sont moyennés et ne rendent pas compte des fluctuations de type collisionnel qui interviennent à une échelle inférieure à λ_D. Par ailleurs pour le calcul des sources $(\rho, \mathbf{j})$ sur la grille, les particules ne sont pas considérées ponctuelles, mais étalées en un nuage de dimension caractéristique de l'ordre du pas spatial Δx.

L'algorithme de principe du code particulaire peut être schématisé par :

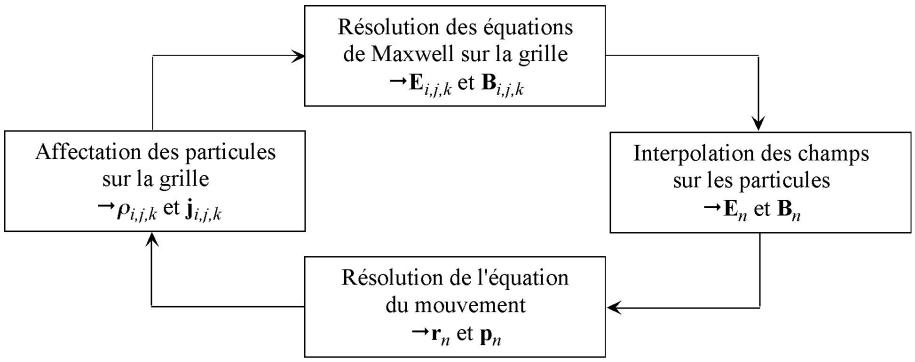


FIGURE 1.1 – Algorithme de principe d'une méthode PIC

1.2 Assignation des charges et interpolation des champs

Il s'agit des deux étapes clés d'une méthode particulaire qui relient l'état des grandeurs discrétisées sur la grille aux grandeurs associées aux particules.
L'étape d'assignation (dite aussi de projection) consiste à déterminer le couple $(\rho, \mathbf{j})$ pour un noeud j du maillage. On peut écrire pour une particule de coordonnées $\mathbf{x}_i$ et une maille de coordonnées $\mathbf{X}_j$

$$\begin{cases} \rho(\mathbf{X}_j) & = \sum_\alpha \sum_{i=1}^{N} q_\alpha S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) \\ \mathbf{j}(\mathbf{X}_j) & = \sum_\alpha \sum_{i=1}^{N} q_\alpha \mathbf{v}_i S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) \end{cases} \tag{1.16}$$

où S désigne le facteur de forme appliqué à la macro-particule d'espèce α de charge q_α située en $\mathbf{x}_i$ se déplaçant à la vitesse $\mathbf{v}_i$, et N dénote le nombre de particules. Nous expliquerons dans la prochaine section la construction du facteur de forme.

Inversement, l'étape d'interpolation consiste à déterminer le couple $(\mathbf{E}(\mathbf{x}_i), \mathbf{B}(\mathbf{x}_i))$ vu par une macro-particule quelconque. On a :

$$\begin{cases} \mathbf{E}(\mathbf{x}_i) & = \sum_{j=1}^{N_g} \mathbf{E}(\mathbf{X}_j) S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}_i) & = \sum_{j=1}^{N_g} \mathbf{B}(\mathbf{X}_j) S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) \end{cases} \tag{1.17}$$

où N_g désigne le nombre de points de la grille.

Il est possible de choisir un facteur de forme d'extension arbitraire, sous réserve que le même facteur de forme soit employé lors de l'assignation et de l'interpolation, sous peine de faire apparaître une autoforce [21]. Le facteur de forme le

plus simple est la fonction créneau

$$S^0(\xi) = \begin{cases} 1 & \text{, si } -\frac{1}{2} \leq \xi \leq \frac{1}{2} \\ 0 & \text{, sinon} \end{cases} \tag{1.18}$$

où on note ξ la variable réduite $\xi = x/\Delta x$. Avec ce facteur de forme, la charge et

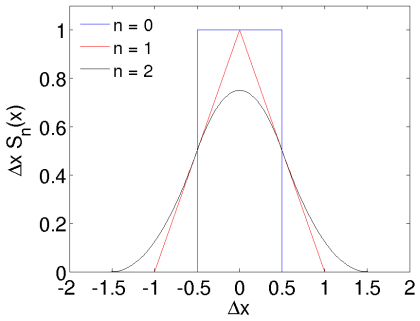


FIGURE 1.2 – Facteurs de forme d'ordre 0 (NGP), 1 et 2.

le courant associés à la particule sont assignés au noeud le plus proche. On parle alors de méthode NGP (pour *Nearest Grid Point*).

Plus généralement, on définit le facteur de forme d'ordre n comme la nième convolution de S^0 avec lui-même :

$$S^n(k) = \underbrace{(S^0 * S^0 * \cdots * S^0)}_{n \text{ convolutions}}(k) \tag{1.19}$$

Ainsi définies, les fonctions S_n sont des polynômes par morceaux d'ordre n.

Le facteur de forme d'ordre 1 correspond à une interpolation linéaire et est défini par :

$$S^1(\xi) = \begin{cases} \xi + 1 & \text{, si } -1 \leq \xi \leq 0 \\ 1 - \xi & \text{, si } 0 \leq \xi \leq 1 \\ 0 & \text{, sinon} \end{cases} \tag{1.20}$$

Le facteur de forme d'ordre 2 correspond à un spline quadratique et est défini par :

$$S^2(\xi) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |\xi|^2 & \text{, si } |\xi| \leq \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(\frac{3}{2} - |\xi|)^2 & \text{, si } \frac{1}{2} \leq |\xi| \leq \frac{3}{2} \\ 0 & \text{, sinon} \end{cases} \tag{1.21}$$

Le facteur de forme d'ordre 3 correspond à un spline cubique et est défini par :

$$S^3(\xi) = \begin{cases} \frac{|\xi|^3}{2} - \xi^2 + \frac{2}{3} & \text{, si } |\xi| \leq 1 \\ \frac{4}{3}(1 - \frac{|\xi|}{2})^3 & \text{, si } 1 \leq |\xi| \leq 2 \\ 0 & \text{, sinon} \end{cases} \tag{1.22}$$

On vérifie que les fonctions S_n satisfont à la conservation de la charge : $\int_{-L_n}^{L_n} S^n(x)dx = 1$, où $[-L_n; L_n]$ désigne le support de S^n. On obtient le facteur de forme d'ordre n multi-dimensionnel par produit tensoriel du facteur de forme monodimensionnel d'ordre n. On a par exemple :

$$S^{2d}(x, y) = S^{1d}(x) \otimes S^{1d}(y) \tag{1.23}$$

et donc

$$\rho_{i,j}^n = qS(X_i - x^n, Y_j - y^n) \tag{1.24}$$

$$= qS_{\Delta x}(X_i - x^n)S_{\Delta y}(Y_j - y^n) \tag{1.25}$$

Un facteur de forme d'ordre n a une influence sur $(n+1)^d$ noeuds du maillage en dimension d. Le premier intérêt d'un facteur de forme d'ordre élevé est la réduction de la variance des grandeurs évaluées, à nombre de particules par maille constant. Le deuxième avantage d'un facteur de forme d'ordre élevé réside dans la réduction du chauffage numérique, comme nous le verrons par la suite.

1.3 Non-conservation de l'énergie

Nous nous plaçons ici dans le cadre d'un algorithme conservatif en impulsion, l'essentiel de cette thèse s'appuyant sur des algorithmes de ce type. Nous présentons ici une preuve montrant que ces algorithmes ne conservent pas l'énergie dans le cas $1D$. L'énergie contenue dans le plasma peut être séparée en énergie électrostatique du champ

$$W_E = \frac{\Delta x}{2} \sum_j E_j^2, \tag{1.26}$$

et énergie cinétique des macro-particules

$$K_E = \sum_s \sum_i \frac{1}{2} m_s v_i^2, \tag{1.27}$$

où i, j et s désignent respectivement l'indice des macro-particules, celui des noeuds du maillage et l'espèce cinétique. Pour que l'énergie soit conservée le taux de variation de l'énergie cinétique doit être exactement compensé par celui de l'énergie électrique. Commençons par exprimer le taux de variation de l'énergie cinétique

$$\frac{dK_E}{dt} = \sum_s m_s \sum_i v_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_s q_s \sum_i v_i E_i, \tag{1.28}$$

$$= q \sum_j E_j \sum_i v_i S(x_j - x_i), \tag{1.29}$$

$$= \sum_j E_j J(x_j), \tag{1.30}$$

où J désigne le courant discrétisé. En utilisant le théorème de Plancherel-Parceval nous avons :

$$\frac{dK_E}{dt} = \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} E(-k)J(k)\frac{dk}{2\pi}. \tag{1.31}$$

La densité de charge continue J_c peut être reliée à la densité de charge discrète (ce résultat est démontré dans la Sec. 2.2.2 ainsi que dans [21])

$$J(k) = \sum_p J_c(k - pk_g). \tag{1.32}$$

En posant le changement de variable $k_1 = k - pk_g$ on obtient

$$\frac{dK_E}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} E(-k,t)J_c(k)\frac{dk}{2\pi}, \tag{1.33}$$

où $E(k,t)$ désigne la transformée de Fourier du champ électrique discrétisé. Le taux de variation de l'énergie électrique est défini par

$$\frac{dW_E}{dt} = \frac{d}{dt}\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x}\frac{dk}{2\pi}\frac{|E(k,t)|^2}{2} = \frac{d}{dt}\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x}\frac{dk}{2\pi}E(k,t)E^*(k,t), \tag{1.34}$$

où E^* désigne la quantité conjuguée, le champ électrique étant réel nous avons en Fourier $E^*(k,t) = E(-k,t)$. La dérivation en temps donne alors

$$\begin{aligned}\frac{dW_E}{dt} = &\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x}\frac{dk}{2\pi}\frac{1}{2}\frac{dE(k,t)}{dt}E(-k,t)\\ &+\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x}\frac{dk}{2\pi}\frac{1}{2}E(k,t)\frac{dE(-k,t)}{dt}.\end{aligned} \tag{1.35}$$

En nous limitant au formalisme électrostatique le champ $E(x,t)$ est obtenu en résolvant

$$\nabla^2\phi = -\rho \text{ et } E = -\partial_x\phi, \tag{1.36}$$

soit sous forme discrétisée

$$\left(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}\right)/\Delta x^2 = -\rho_j, \tag{1.37}$$

et

$$\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} = -E_j. \tag{1.38}$$

On en déduit dans l'espace de Fourier

$$K_1^2(k)\phi(k) = \rho(k), -iK_2(k)\phi(k) \qquad = E(k), \tag{1.39}$$

avec

$$K_1^2(k) = \frac{\sin^2(k\Delta x/2)}{(\Delta x/2)^2} \text{ et } K_2(k) = \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \tag{1.40}$$

Ainsi on peut exprimer le champ électrique en fonction de la densité de charge sous la forme

$$E(k) = \frac{K_2(k)\rho(k)}{iK_1^2(k)}. \tag{1.41}$$

L'équation (1.35) devient alors

$$\begin{aligned}\frac{dW_E}{dt} = &\int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{dk}{2\pi}\frac{1}{2}E(-k)\frac{d}{dt}\left[\frac{K_2(k)\rho(k,t)}{iK_1^2(k)}\right] \\ &+ \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{dk}{2\pi}\frac{1}{2}E(k)\frac{d}{dt}\left[-\frac{K_2(k)\rho(-k,t)}{iK_1^2(k)}\right].\end{aligned} \tag{1.42}$$

Ici $\rho(k,t)$ désigne la transformée de Fourier de la densité de charge discrétisée, qui peut être reliée à la transformée de la densité de charge continue (Sec. 2.2.2)

$$\rho(k) = \sum_p \rho_c(k - pk_g). \tag{1.43}$$

En substituant l'équation (1.43) dans (1.42) puis en posant les changements de variable $k_1 = k - pk_g$ et $k_2 = -k - pk_g$ pour la première et deuxième intégrale intervenant dans (1.42) nous obtenons

$$\frac{dW_E}{dt} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}E(-k)\frac{K_2(k)}{iK_1^2(k)}\frac{\partial\rho_c(k,t)}{\partial t}. \tag{1.44}$$

D'après l'équation de continuité nous avons

$$\frac{\partial\rho_c(k)}{\partial t} = -ikJ_c(k), \tag{1.45}$$

la transformée de Fourier de la force discrétisée est donnée par $F(k) = qE(k)$ on en déduit finalement

$$\frac{dW_E}{dt} = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi}\frac{F(-k)}{q}\frac{K_2(k)}{K_1^2(k)}kJ_c(k). \tag{1.46}$$

Comme on le constate les équations (1.33) et (1.46) ne se compensent pas à cause du facteur $kK_2(k)/K_1^2(k)$ intervenant dans (1.46). Par conséquent l'énergie ne se conserve pas, toutefois cette erreur peut être rendue négligeable. Dans Sec. 2.4, nous analyserons en détail la relation de dispersion des ondes plasma en tenant compte de la discrétisation en espace, ce qui nous donnera l'opportunité de préciser l'influence du facteur $kK_2(k)/K_1^2(k)$.

1.4 Schéma PIC conservatif en énergie

Dans cette section nous examinons brièvement un schéma conservant l'énergie totale dans le cas électrostatique [43, 21]. L'idée essentielle de cette approche consiste à calculer la force électrique F_i exercée sur la particule i à partir d'un potentiel V vérifiant

$$E_i = -\left(\frac{\partial V}{\partial x_i}\right)_{\phi_j}, \tag{1.47}$$

où V est défini par

$$V(x_i) = V_c \sum_j \phi_j S(x_i - X_j). \tag{1.48}$$

Contrairement aux schémas conservatifs en impulsion pour lesquels le champ électrique est calculé par différences finies, le gradient de S est calculé de façon exacte. En substituant (1.48) dans (1.47), on en déduit l'expression de la force

$$F_i = -q_i V_c \sum_j \phi_j \frac{\partial}{\partial x_i} S(x_i - X_j). \tag{1.49}$$

Pour montrer que ce type de schéma conserve l'énergie nous allons calculer le taux de variation de l'énergie totale, somme des énergies cinétique et potentielle. Le taux de variation de l'énergie cinétique E_c s'écrit

$$\frac{dE_c}{dt} = \sum_i m_i v_i \frac{dv_i}{dt}, \tag{1.50}$$

en utilisant (1.50) on en déduit

$$-V_c \sum_j \phi_j \sum_i q_i v_i \frac{\partial}{\partial x_i} S(x_i - X_j), \tag{1.51}$$

en utilisant l'expression différentielle de la vitesse on trouve

$$-V_c \sum_j \phi_j \frac{d}{dt} \sum_i q_i S(x_i - X_j) = -V_c \sum_j \phi_j \rho_j^{'}. \tag{1.52}$$

Le taux de variation de l'énergie potentielle E_p s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{dE_p}{dt} =& \frac{V_c}{2} \frac{d}{dt} \sum_j \rho_j \phi_j \\ =& \frac{V_c}{2} \sum_j \left(\rho_j^{'} \phi_j + \rho_j \phi_j^{'}\right). \end{aligned} \tag{1.53}$$

Soit finalement en sommant (1.52) et (1.53)

$$\frac{dE_{tot}}{dt} = \frac{V_c}{2} \sum_j \left(\rho_j \phi_j^{'} - \rho_j^{'} \phi_j \right). \tag{1.54}$$

Or ρ_j et ϕ_j sont reliés par la formule choisie pour discrétiser le laplacien

$$\rho_j = \sum_k \Delta_{jk} \phi_k, \tag{1.55}$$

la somme sur k dépendant du système de coordonnées employé. On obtient finalement en substituant (1.55) dans (1.54)

$$\frac{dE}{dt} = \frac{V_c}{2} \sum_j \sum_k \Delta_{jk} \left(\phi_k \phi_j^{'} - \phi_k^{'} \phi_j \right). \tag{1.56}$$

En choisissant la discrétisation du laplacien de sorte que $\Delta_{jk} = \Delta_{kj}$, le schéma conserve l'énergie totale discrétisée.

1.5 Résolution des équations de Maxwell

1.5.1 Schéma de Yee

Cette méthode consiste à décaler temporellement et spatialement les discrétisations des champs **E** et **B**, par une méthode de type "saute-mouton" (*leapfrog* en anglais). On met à jour le champ **E** avec l'équation de Maxwell-Ampère, et le champ **B** avec l'équation de Maxwell-Faraday. Dans un système à trois dimensions en espace et en vitesse, on obtient les six équations discrétisées suivantes :

$$
\begin{aligned}
\frac{(E_x)^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j,k}-(E_x)^{n}_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\epsilon_0}(J_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k} \\
&\quad +c^2\left[\frac{(B_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}-(B_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y}-\frac{(B_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}-(B_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z}\right] \\
\frac{(E_y)^{n+1}_{i,j+\frac{1}{2},k}-(E_y)^{n}_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\epsilon_0}(J_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k} \\
&\quad +c^2\left[\frac{(B_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}-(B_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2}}}{\Delta z}-\frac{(B_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}-(B_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}{\Delta x}\right] \\
\frac{(E_z)^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}}-(E_z)^{n}_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= -\frac{1}{\epsilon_0}(J_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \\
&\quad +c^2\left[\frac{(B_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}-(B_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i-\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta x}-\frac{(B_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}-(B_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}{\Delta y}\right] \\
\frac{(B_x)^{n+\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}-(B_x)^{n-\frac{1}{2}}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= -\frac{(E_z)^{n}_{i,j+1,k+\frac{1}{2}}-(E_z)^{n}_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta y}+\frac{(E_y)^{n}_{i,j+\frac{1}{2},k+1}-(E_y)^{n}_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta z} \\
\frac{(B_y)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}-(B_y)^{n-\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= -\frac{(E_x)^{n}_{i+\frac{1}{2},j,k+1}-(E_x)^{n}_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta z}+\frac{(E_z)^{n}_{i+1,j,k+\frac{1}{2}}-(E_z)^{n}_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \\
\frac{(B_z)^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}-(B_z)^{n-\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}{\Delta t} &= -\frac{(E_y)^{n}_{i+1,j+\frac{1}{2},k}-(E_y)^{n}_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\Delta x}+\frac{(E_x)^{n}_{i+\frac{1}{2},j+1,k}-(E_x)^{n}_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\Delta y}
\end{aligned}
\tag{1.57}
$$

Toutes les dérivées étant centrées, le schéma se caractérise par une précision d'ordre 2 en espace et en temps. Sa stablité peut s'apprécier par une analyse de Von Neumann en supposant des champs de la forme $(\mathbf{E},\mathbf{B})(\mathbf{x},t) = (\mathbf{E}_0,\mathbf{B}_0)\exp(i(\mathbf{k}.\mathbf{x}-\omega t))$, par substitution sous forme discrétisée dans (1.57) on obtient :

$$
\left[\frac{\sin(\frac{\omega\Delta t}{2})}{c\Delta t}\right]^2=\left[\frac{\sin(\frac{k_x\Delta x}{2})}{\Delta x}\right]^2+\left[\frac{\sin(\frac{k_y\Delta y}{2})}{\Delta y}\right]^2+\left[\frac{\sin(\frac{k_z\Delta z}{2})}{\Delta z}\right]^2 \tag{1.58}
$$

La stabilité du schéma implique ω réel et donc $\sin^2(\frac{\omega\Delta t}{2}) \leq 1$.
On en déduit la condition de Courant-Friedrich-Levy habituelle :

$$
(c\Delta t)^2\left(\frac{1}{(\Delta x)^2}+\frac{1}{(\Delta y)^2}+\frac{1}{(\Delta z)^2}\right)\leq 1 \tag{1.59}
$$

Cette condition garantit la convergence du schéma.
Une propiété importante de ce schéma est que les opérateurs discrets satisfont encore la propriété : $\nabla\cdot\nabla\times\mathbf{A}$ et $\nabla\times\nabla\varphi = 0\ \forall\mathbf{A},\varphi$. Plus de détails sur la méthode de Yee et la résolution numérique des équations de Maxwell sont donnés dans [44].

1.5.2 Correction de Boris

Le calcul des densités de charge et de courant par (1.16) ne vérifie pas la conservation de la charge $\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{j}=0$. Il s'ensuit que le champs $\mathbf{E}$ solution

de Maxwell-Ampère ne satisfait pas à l'équation de Gauss. Une première façon de s'affranchir de la contrainte de vérification de la charge consiste à ajouter un terme électrostatique au champ électrique, historiquement cette correction a été introduite par Boris [45]. Ainsi, une correction est apportée au champ électrique à chaque pas de temps de la façon suivante :

$$\mathbf{E}_{cor} = \mathbf{E} - \nabla\varphi \tag{1.60}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{cor} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{1.61}$$

soit à résoudre

$$\Delta\varphi = \nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0}. \tag{1.62}$$

Cette méthode est satisfaisante pour effectuer la correction, mais requiert de résoudre un Laplacien à chaque pas de temps.

L'utilisation d'un facteur de forme dans la méthode d'assignation du courant, que chaque particule crée par son déplacement, est caractéristique des méthodes PIC. Cependant cette procédure ne garantit pas un dépôt du courant qui conserve la charge

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t} \neq 0$$

Il s'ensuit que le champ $\mathbf{E}$, solution de Maxwell-Ampère, ne satisfait pas l'équation de Poisson.

1.6 Méthodes conservant la charge

Au lieu de corriger le champ électrique, des méthodes ont été proposées au cours des vingt dernières années, qui permettent d'assurer un dépôt du courant conservant la charge. Les principales méthodes satisfaisant l'équation discrète de conservation de la charge sont dues à Villasenor, Buneman et Esirkepov. La méthode de Villasenor-Buneman [46] est valable pour des facteurs de forme splines d'ordre un et deux ; la méthode d'Esirkepov [47], quant à elle, est adaptable pour des facteurs de forme arbitraires. Un algorithme, qui assure un dépôt du courant conservant la charge, vérifie également les égalités suivantes :

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) = 0 = \nabla \cdot \mathbf{J} + \epsilon_0 \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{E}}{\partial t} \tag{1.63}$$

$$= -\frac{\partial\rho}{\partial t} + \epsilon_0 \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{E}}{\partial t} = \partial_t\big(\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho\big) \tag{1.64}$$

$$\tag{1.65}$$

d'où

$$\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho = (\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho)_{t=0} = 0 \tag{1.66}$$

Dans la prochaine section, nous détaillerons la méthode d'Esirkepov dans sa formulation $2D$, puis nous donnerons sa formulation $3D$.

1.7 Assignation du courant par la méthode d'Esirkepov

1.7.1 Formulation bidimensionnelle

Schématiquement, la méthode d'Esirkepov revient à décomposer la trajectoire en un flux dans la direction x pour calculer la composante J_x et un flux dans la direction y pour calculer la composante J_y.

On définit le vecteur de décomposition de densité $\mathbf{W} = (W_x, W_y)$ par :

$$\begin{aligned} \frac{(J_x)_{i+1/2,j} - (J_x)_{i-1/2,j}}{\Delta x} &= -\frac{q}{\Delta t}(W_x)_{i,j}, \\ \frac{(J_y)_{i,j+1/2} - (J_y)_{i,j-1/2}}{\Delta y} &= -\frac{q}{\Delta t}(W_y)_{i,j}. \end{aligned} \tag{1.67}$$

La conservation de la charge est alors satisfaite si et seulement si :

$$\begin{aligned} (W_x)_{i,j} + (W_y)_{i,j} &= \frac{\rho_{i,j}^{n+1} - \rho_{i,j}^{n}}{q}, \\ &= S_{i,j}(x^{n+1}, y^{n+1}) - S_{i,j}(x^n, y^n), \end{aligned} \tag{1.68}$$

où on a noté : $S_{i,j}(x,y) = S(X_i - x, Y_j - y)$ avec S un facteur de forme.
Etant donné $x^n = x$, $x^{n+1} = x + \delta x$, $y^n = y$, $y^{n+1} = y + \delta y$, $\forall (x, y, \delta x, \delta y) \in \mathbb{R}^4$,
On considère les fonctions f_1, f_2, f_3, et f_4 de $\mathbb{R}^4$ dans $\mathbb{R}$ définies par :

$$\begin{aligned} f_1(x, y, \delta x, \delta y) &= S_{i,j}(x, y), \\ f_2(x, y, \delta x, \delta y) &= S_{i,j}(x + \delta x, y), \\ f_3(x, y, \delta x, \delta y) &= S_{i,j}(x, y + \delta y), \\ f_4(x, y, \delta x, \delta y) &= S_{i,j}(x + \delta x, y + \delta y). \end{aligned} \tag{1.69}$$

Esirkepov montre que ces fonctions sont linéairement indépendantes (2005, [44]) pourvu que la fonction S soit à support compact.

On introduit les hypothèses suivantes :
(H1) W_x et W_y sont combinaison linéaire des fonctions f_1, f_2, f_3, f_4,
(H2) L'équation de continuité (1.68) est satisfaite,
(H3) Si $\delta x = 0$, alors $(W_x)_{i,j} = 0$ et si $\delta y = 0$, alors $(W_y)_{i,j} = 0$,
(H4) Si S est symétrique en ses deux variables et $\delta x = \delta y$ alors $W_x = W_y$.

Esirkepov montre qu'il existe une unique combinaison linéaire des fonctions f_1, f_2, f_3, f_4 qui satisfait (H1)-(H4). Pour chaque composante de la décomposition de densité cette combinaison est donnée par :

$$\begin{aligned}(W_x)_{i,j} &= \frac{1}{2}(S_{i,j}(x^{n+1},y^{n+1}) - S_{i,j}(x^n,y^{n+1})) + \frac{1}{2}(S_{i,j}(x^{n+1},y^n) - S_{i,j}(x^n,y^n)),\\ (W_y)_{i,j} &= \frac{1}{2}(S_{i,j}(x^{n+1},y^{n+1}) - S_{i,j}(x^{n+1},y^n)) + \frac{1}{2}(S_{i,j}(x^n,y^{n+1}) - S_{i,j}(x^n,y^n)).\end{aligned} \tag{1.70}$$

Une fois le vecteur de décomposition de densité calculé à partir de (1.70), la méthode d'Esirkepov consiste à reconstruire le courant $\mathbf{J}$ avec les égalités (1.67). En pratique, on calcule le courant associé à chaque particule sur un segment. Ainsi seuls les points du maillage qui voient le flux de densité créé par le déplacement de la macroparticule sont pris en compte. Puis l'ensemble des courants élémentaires sont agrégés afin de déterminer le courant total $\mathbf{J}$ sur le maillage complet. Une fois le calcul de $\mathbf{J}$ effectué correctement, les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont mis à jour via les équations de Maxwell Ampère et de Maxwell Faraday.

Pour un facteur de forme d'ordre un et une particule ayant reculé d'une maille suivant x et avancé d'une maille suivant y, nous avons :

$$S_i(x^n) = \begin{bmatrix} 0 \\ X_{i+1} - x^n \\ 1 - X_{i+1} + x^n \\ 0 \end{bmatrix}, S_i(x^{n+1}) = \begin{bmatrix} X_i - x^{n+1} \\ 1 - X_i + x^{n+1} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$S_j(y^n) = \begin{bmatrix} 0 \\ Y_{j+1} - y^n \\ 1 - Y_{j+1} + y^n \\ 0 \end{bmatrix}, S_j(y^{n+1}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ Y_{j+2} - y^{n+1} \\ 1 - Y_{j+2} + y^{n+1} \end{bmatrix},$$

En utilisant la propriété (1.23), les formules (1.70) peuvent être simplifiées sous la forme :

$$\begin{aligned}(W_x)_{i,j} &= \tfrac{1}{2}(S_i(x^{n+1}) - S_i(x^n)) \otimes (S_j(y^{n+1}) + S_j(y^n)),\\ (W_y)_{i,j} &= \tfrac{1}{2}(S_j(y^{n+1}) - S_j(y^n)) \otimes (S_i(x^{n+1}) + S_i(x^n)).\end{aligned} \tag{1.71}$$

On en déduit une formulation générique de la composante J_x. La contribution de la macro-particule au courant en $i - 3/2$ est nulle, d'où

$$(J_x)_{i-1/2,.} = -\frac{q\Delta x}{\Delta t}(W_x)_{i-1,.}, \tag{1.72}$$

En considérant l'extension spatiale de la trajectoire suivant y on obtient :

$$(J_x)_{i-1/2,j} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(x^{n+1} - X_i)(Y_{j+1} - y^n), \tag{1.73}$$

$$(J_x)_{i-1/2,j+1} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(x^{n+1} - X_i)(y^n - y^{n+1} - Y_j + Y_{j+2}), \tag{1.74}$$

$$(J_x)_{i-1/2,j+2} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(x^{n+1} - X_i)(y^{n+1} - Y_{j+1}). \tag{1.75}$$

La contribution au courant en $i + 1/2$ est donnée par

$$(J_x)_{i+1/2,.} = (J_x)_{i-1/2,.} - \frac{q\Delta x}{\Delta t}(W_x)_{i,.}, \tag{1.76}$$

De même que précédemment, l'extension spatiale du mouvement suivant y nous donne

$$(J_x)_{i+1/2,j} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(X_i - x^n)(Y_{j+1} - y^n), \tag{1.77}$$

$$(J_x)_{i+1/2,j+1} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(X_i - x^n)(y^n - y^{n+1} - Y_j + Y_{j+2}), \tag{1.78}$$

$$(J_x)_{i+1/2,j+2} = \frac{q\Delta x}{2\Delta t}(X_i - x^n)(y^{n+1} - Y_{j+1}). \tag{1.79}$$

On vérifie que $(J_x)_{i+3/2} = 0$. La même démarche nous permet d'obtenir le courant J_y. La contribution de la macro-particule au courant en $j - 1/2$ est nulle, d'où

$$(J_y)_{.,j+1/2} = -\frac{q\Delta y}{\Delta t}(W_y)_{.,j}, \tag{1.80}$$

En prenant en compte la trajectoire suivant x on trouve

$$(J_y)_{i-1,j+1/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(X_i - x^{n+1})(Y_{j+1} - y^n), \tag{1.81}$$

$$(J_y)_{i,j+1/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(x^{n+1} - X_{i-1} + X_{i+1} - x^n)(Y_{j+1} - y^n), \tag{1.82}$$

$$(J_y)_{i+1,j+1/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(x^n - X_i)(Y_{j+1} - y^n). \tag{1.83}$$

Le courant déposé en $j + 3/2$ par la macro-particule vaut

$$(J_y)_{.,j+3/2} = (J_y)_{.,j+1/2} - \frac{q\Delta y}{\Delta t}(W_y)_{.,j+1}, \tag{1.84}$$

Et nous avons longitudinalement

$$(J_y)_{i-1,j+3/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(X_i - x^{n+1})(y^{n+1} - Y_{j+1}), \tag{1.85}$$

$$(J_y)_{i,j+3/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(x^{n+1} - X_{i-1} + X_{i+1} - x^n)(y^{n+1} - Y_{j+1}), \tag{1.86}$$

$$(J_y)_{i+1,j+3/2} = \frac{q\Delta y}{2\Delta t}(x^n - X_i)(y^{n+1} - Y_{j+1}). \tag{1.87}$$

On vérifie par ailleurs que $(J_y)_{.,j+5/2} = 0$. On peut obtenir par des calculs similaires les contributions au courant apportées par les autres trajectoires possibles : $(X+1;Y+1)$, $(X+1;Y+0)$, $(X+1;Y-1)$, $(X+0;Y+1)$, $(X+0;Y+0)$, $(X+0;Y-1)$, $(X-1;Y+0)$, $(X-1;Y-1)$. En outre, rappelons que l'algorithme d'Esirkepov s'applique uniquement aux particules ne franchissant pas plus d'une maille par pas de temps (*i.e* $c\Delta t \leq \Delta x$ et $c\Delta t \leq \Delta y$).

1.7.2 Formulation tridimensionnelle

La généralisation au cas 3D a été menée dans [44, 47], en reprenant les hypothèses du cas 2D détaillé précédemment. En 3D le vecteur de décomposition de densité est défini par :

$$\frac{(J_x)_{i+1/2,j,k} - (J_x)_{i-1/2,j,k}}{\Delta x} = -\frac{q}{\Delta t}(W_x)_{i,j,k} \tag{1.88}$$

$$\frac{(J_y)_{i,j+1/2,k} - (J_y)_{i,j-1/2,k}}{\Delta y} = -\frac{q}{\Delta t}(W_y)_{i,j,k} \tag{1.89}$$

$$\frac{(J_z)_{i,j,k+1/2} - (J_z)_{i,j,k-1/2}}{\Delta z} = -\frac{q}{\Delta t}(W_z)_{i,j,k} \tag{1.90}$$

La conservation de la charge est alors satisfaite si et seulement si :

$$\begin{aligned}(W_x)_{i,j,k} + (W_y)_{i,j,k} + (W_z)_{i,j,k} &= \frac{\rho^{n+1}_{i,j,k} - \rho^{n}_{i,j,k}}{q}, \\ &= S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^n),\end{aligned} \tag{1.91}$$

où on note : $S_{i,j,k}(x,y,z) = S(X_i - x, Y_j - y, Z_k - z)$. Esirkepov montre qu'il existe un unique vecteur décomposition de densité $W = (W_x, W_y, W_z)$ solution de l'équation de continuité (1.91). La composante suivant x de cette solution est donnée par :

$$\begin{aligned}(W_x)_{i,j,k} =& \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^{n+1})) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^{n+1})) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^n) - S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^n)) \\ &+ \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^n) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^n)),\end{aligned} \tag{1.92}$$

la composante suivant y s'écrit

$$\begin{aligned}(W_y)_{i,j,k} =& \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^{n+1})) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^{n+1})) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^n) - S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^n)) \\ &+ \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^n) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^n)),\end{aligned} \tag{1.93}$$

et nous avons pour la composante suivant z

$$\begin{aligned}(W_z)_{i,j,k} = \quad & \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^{n+1}, z^n)) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^{n+1}, y^n, z^n)) \\ &+ \frac{1}{6}(S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^{n+1}, z^n)) \\ &+ \frac{1}{3}(S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^{n+1}) - S_{i,j,k}(x^n, y^n, z^n)).\end{aligned}$$

1.7.3 Incertitude sur le calcul de la partie transverse du courant

On peut décomposer le courant $\mathbf{J}$ de la façon suivante

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{//} + \mathbf{J}_{\perp},$$

où $\mathbf{J}_{//}$ et $\mathbf{J}_{\perp}$ désignent respectivement les parties longitudinale et transverse du courant. La divergence du courant s'écrit

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{J} &= \nabla \cdot \mathbf{J}_{//} + 0, \\ &= -\frac{\partial \rho}{\partial t}.\end{aligned} \tag{1.94}$$

La méthode d'Esirkepov ne permet pas de maîtriser la partie rotationnelle du courant : $\nabla \times \mathbf{J}_{\perp} \neq 0$. Ainsi une erreur sur $\mathbf{J}_{\perp}$ peut se répercuter sur le champ $\mathbf{E}$ par l'équation de Maxwell-Ampère, puis sur $\mathbf{B}$ par l'équation de Maxwell-Faraday. Toutefois dans les simulations, ce comportement n'est pas observé.

1.7.4 Validation numérique : Plasma maxwellien à l'équilibre

Après avoir validé le fonctionnement de l'algorithme avec un électron mobile seul, nous avons mesuré les quantités $\nabla \cdot \mathbf{J} + \partial_t \rho$ et $\nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0$ avec une boîte

de simulation contenant un plasma en deux dimensions d'espace et de vitesse. La boîte considérée contient un fond d'ions fixes et des électrons à la température $T_e = 1$ keV. La simulation dure $500\omega_p^{-1}$ avec un pas de temps $\Delta t = 0.025\omega_p^{-1}$ (où ω_p est la pulsation plasma). On considère un maillage 100×100 tel que $\Delta x = \Delta y = \lambda_D$, où λ_D est la longueur de Debye. Cet algorithme a été parallélisé dans le code Calder, dans les simulations qui suivent le maillage a été partitionné en 50 sous-domaines.

Les résultats présentés sur les Figs. 1.3-1.5 (gauche) montrent que l'écart à la vérification de $\nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0$ évolue linéairement quel que soit le facteur de forme. Ce résultat n'est pas surprenant car nous ne vérifions pas exactement l'équation (1.66). Nous sommes limités par la précision machine, celle-ci introduit une erreur ϵ_{err} de l'ordre de 10^{-14} en double précision. L'équation de Poisson n'étant plus directement résolue, l'erreur de précision commise sur l'équation de conservation de la charge se répercute sur l'écart à la vérification de l'équation de Poisson. En supposant ϵ_{err} constante, nous avons

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho) = \epsilon_{err}, \tag{1.95}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} + \frac{\epsilon_{err}}{\epsilon_0}(t - t_0). \tag{1.96}$$

On peut donc s'attendre à une croissance linéaire en fonction du temps du terme $\nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\rho}{\epsilon_0}$. Néanmoins, comme nous le montrons dans cette section cette erreur reste tout à fait négligeable, l'équation de Maxwell-Gauss étant généralement satisfaite à $10^{-13} - 10^{-12}$ près. Plus quantitativement, l'erreur en fin de simulation est de l'ordre de 10^{-12} avec le facteur de forme d'ordre un et de l'ordre de 10^{-13} avec les facteurs de forme d'ordre deux et trois. On gagne donc six ordres de grandeur par rapport à la correction de Boris pour laquelle $\nabla \cdot \mathbf{E} - \rho/\epsilon_0 \approx 10^{-6}$. Par ailleurs la conservation de la charge est vérifiée aux erreurs d'arrondi près quel que soit l'ordre du facteur de forme.

En règle générale les temps de calcul avec la correction de Boris ou avec le dépôt du courant par la méthode d'Esirkepov sont comparables en $1D$, en revanche les temps de calcul sont facilement allongés de 50% en $2D$. Pour chacune des simulations ci-dessus nous avons mesuré le temps de calcul total par processeur (tableau 1.1), et le temps de calcul par processeur par particule par itération (tableau 1.2). Le temps total inclut les opérations sur les particules, les différences finies sur le maillage et les communications. On note un surcroît de temps de calcul variant de 10% à 50% entre la méthode d'Esirkepov et celle de Boris pour un facteur de forme d'ordre donné, la variation relative étant d'autant plus grande que l'ordre est élevé.

Dans ce chapitre d'ouverture, nous avons introduit quelques notions essentielles d'un schéma PIC explicite dont l'algorithme de principe, la fonction de forme et le schéma de Yee, utilisé pour résoudre les équations de Maxwell. Par

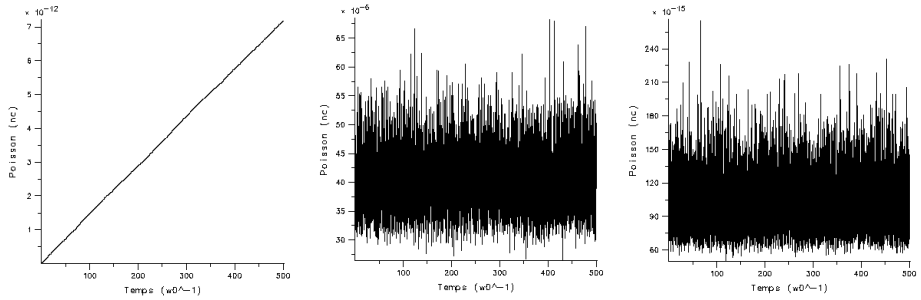


FIGURE 1.3 – Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation linéaire, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce.

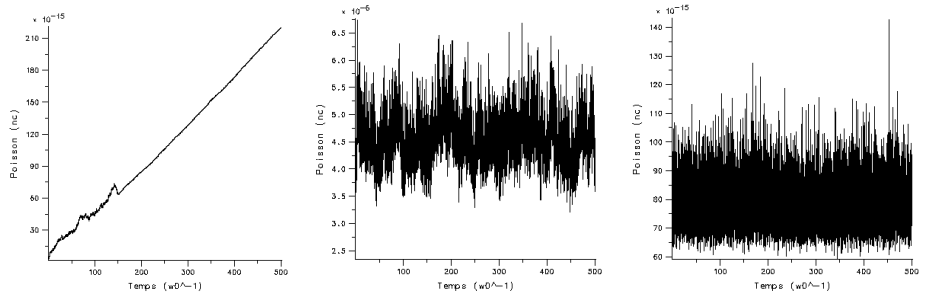


FIGURE 1.4 – Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation quadratique, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce.

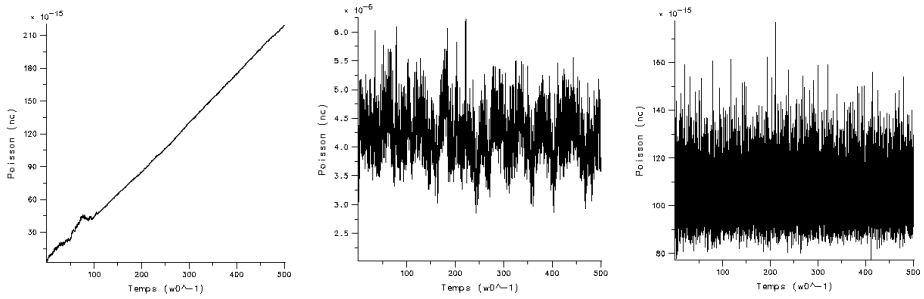


FIGURE 1.5 – Erreur sur l'équation de poisson avec la méthode d'Esirkepov (gauche) et la correction de Boris (milieu), conservation de la charge avec la méthode d'Esirkepov (droite). Simulation $2D$ avec une fonction d'interpolation cubique, $\Delta x = \lambda_D$ et 10 particules par maille et par espèce.

	Boris	Esirkepov	Variation
ordre 1	140	161	+15%
ordre 2	147	202	+37%
ordre 3	174	273	+57%
variation ordre 2 à 1	+5%	+25%	
variation ordre 3 à 1	+24%	+70%	

TABLE 1.1 – Comparaison des temps de calcul totaux par processeur en secondes avec les méthodes d'Esirkepov et de Boris.

	Correction de Boris	Méthode d'Esirkepov
ordre 1	3.5×10^{-8}	4.03×10^{-8}
ordre 2	3.68×10^{-8}	5.05×10^{-8}
ordre 3	4.35×10^{-8}	6.83×10^{-8}

TABLE 1.2 – Comparaison des temps de calcul par processeur, par particule et par itération en secondes.

ailleurs, nous avons rappelé que les schémas PIC standards, conservatifs en impulsion, ne conservent pas l'énergie. Le facteur de forme employé dans un schéma PIC joue un rôle important pour juguler la non-conservation de l'énergie, il conditionne un phénomène important dit de "chauffage numérique" qui intervient dans les plasmas discrétisés dés que $\Delta x/\lambda_D \gg 1$. L'analyse détaillée de ce problème constituera l'objet du prochain chapitre. L'algorithme d'Esirkepov présenté dans ce chapitre a été validé pour des plasmas maxwelliens, et sur des problèmes d'instabilité faisceau-plasma. Néanmoins cet algorithme n'apporte aucune plus-value physique sur ce type de problème, et le surcoût en temps de calcul ne justifie pas son usage.

Chapitre 2

Etude de la relation de dispersion du plasma numérique et du chauffage numérique

2.1 Introduction

Ce chapitre est dédié à l'analyse linéaire du plasma numérique, que nous relierons au phénomène de chauffage numérique inhérent au schéma PIC explicite. Dans un premier temps, la relation de dispersion prenant en compte la seule influence du pas d'espace nous permettra d'expliquer dans quelles conditions une instabilité dite d'*aliasing* peut survenir. Nous considèrerons ensuite la relation de dispersion du plasma électrostatique discrétisé en temps, et déterminerons un seuil d'instabilité propre aux ondes plasma électroniques. Finalement, nous traiterons le problème spatio-temporel et mettrons en lumière les propriétés de stabilité du plasma numérique pour de grands pas de temps et diverses valeurs du pas en espace. Nous nous attacherons en particulier à identifier les régimes respectivement dominés par les effets des discrétisations spatiale et temporelle.

Les trois sections suivantes de ce chapitre sont consacrées à l'étude du chauffage numérique. Dans la quatrième section, nous présenterons une étude paramétrique du chauffage numérique affectant dans différentes géométries (de $1D$ à $3D$) un plasma Maxwellien en fonction de la discrétisation spatiale et du facteur de forme. Dans la cinquième section nous montrerons que l'on peut distinguer des régimes de croissance exponentielle et linéaire dans ce processus. La phase de chauffage exponentiel sera interprétée sur la base des résultats de l'analyse linéaire présentés dans les premières sections. Puis nous fournirons des estimations du taux de chauffage dans la phase linéaire. Dans une sixième section, nous examinerons l'effet stabilisateur des collisions coulombiennes dans le régime exponentiel. En nous appuyant sur ces résultats, nous démontrerons dans la dernière

section l'amélioration apportée par les facteurs de forme d'ordre élevé dans un cas d'accélération d'ions par laser. Nous mettrons également l'accent sur des résultats novateurs obtenus dans le contexte de l'allumage rapide et du chauffage isochore grâce à cette technique.

2.2 Analyse de la discrétisation spatiale

Dans cette section, nous étudions l'influence du maillage spatial sur la relation de dispersion du plasma numérique décrit par un schéma PIC explicite. Le développement présenté ici, reprend le formalisme proposé par Langdon [Chap. 8 de la Réf. [21]] associé à un modèle 1D purement électrostatique. L'hypothèse électrostatique sera justifiée numériquement a posteriori par des simulations montrant que l'énergie des champs électromagnétiques est essentiellement associée à des fluctuations électrostatiques.

2.2.1 Définition du problème et calculs préliminaires

Le système est supposé périodique de longueur $L = N_g \Delta x$, avec N_g le nombre de mailles de la grille. Les fonctions attachées aux particules vérifient $P(x) = P(x + L)$ et chaque grandeur discrétisée vérifie $G_j = G_{j+N_g}$. On en déduit les transformées de Fourier suivantes :

$$P(k_n) = \int_0^L P(x) e^{-ik_n x} dx \tag{2.1}$$

$$G(k_n) = \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} G_j e^{-ik_n X_j}, \text{ avec } k_n = 2\pi n / L, \tag{2.2}$$

de même que les transformées inverses :

$$P(x) = \frac{1}{L} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} P(k_n) e^{ik_n x}, \tag{2.3}$$

$$G(X_j) = \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N_g - 1} G(k_n) e^{ik_n X_j}. \tag{2.4}$$

La densité de charge projetée sur le maillage ρ_j et la force subie par une particule (située en x_i) dépendent du facteur de forme S_n selon

$$\rho_j = \rho(X_j) = \sum_i q_i S(X_j - x_i), \tag{2.5}$$

$$F_i = q_i \Delta x \sum_j E_j S(X_j - x_i). \tag{2.6}$$

La transformée de Fourier de la force continue $F(x) = \sum_j E_j S(X_j - x)$ est donnée par

$$\begin{aligned} F(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} F(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \big(q\Delta x \sum_j E_j S_n(X_j - x) e^{ik(X_j - x)}\big) e^{-ikX_j} \\ &= q\Delta x \sum_j E_j \big(\int_{-\infty}^{\infty} dx S_n(X_j - x) e^{ik(X_j - x)}\big) e^{-ikX_j} \\ &= qE(k) S_n(-k), \end{aligned} \tag{2.7}$$

avec

$$S_n^2(k) = \left(\frac{\sin(\frac{k\Delta x}{2})}{\frac{k\Delta x}{2}} \right)^{2(n+1)}. \tag{2.8}$$

Les quantités sur la grille ayant pour période $N_g \Delta x$, on a donc pour $E(k)$:

$$E(k - pk_g) = \sum_j E_j e^{-i(k - p\frac{2\pi}{\Delta x})X_j} = E(k), \tag{2.9}$$

avec $k_g = 2\pi/\Delta x$. Par ailleurs ρ vérifie :

$$\rho(k_n) = \Delta x \sum_{j=0}^{N_g - 1} \rho_j e^{-ik_n X_j} \tag{2.10}$$

$$\rho_j = \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} \frac{dk}{2\pi} \rho(k) e^{ik_n X_j}, \tag{2.11}$$

$$= \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N_g - 1} \rho(k) e^{ik_n X_j}. \tag{2.12}$$

L'équation de Poisson sous forme discrétisée s'écrit :

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = -\rho_j, \tag{2.13}$$

qui devient

$$K_1^2(k)\phi(k) = \rho(k), \tag{2.14}$$

avec

$$K_1(k) = \frac{\sin(\frac{k\Delta x}{2})}{\Delta x/2}. \tag{2.15}$$

Le champ électrique discrétisé se déduit du potentiel selon

$$-\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} = E_j, \tag{2.16}$$

qui devient dans l'espace de Fourier,

$$-iK_2(k)\phi(k) = E(k), \tag{2.17}$$

avec

$$K_2(k) = \frac{\sin(k\Delta x)}{\Delta x}. \tag{2.18}$$

2.2.2 Couplage de répliques sur la densité

Soit ρ_c la densité de charge continue d'un nuage de particules de densité particulaire n, on définit $\rho_c(x)$ par :

$$\rho_c(x) = q \int dx' S_n(x - x') n(x'). \tag{2.19}$$

L'intégrale précédente n'est autre qu'un produit de convolution, d'où :

$$\rho_c(k) = q S_n(k) n(k). \tag{2.20}$$

La densité de charge discrétisée vaut alors

$$\begin{aligned}
\rho_j &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \rho_c(k) e^{ikX_j} && (2.21)\\
&= \sum_{p=-\infty}^{\infty} \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}+pk_g}^{\frac{\pi}{\Delta x}+pk_g} \frac{dk}{2\pi} \rho_c(k) e^{ikX_j} && (2.22)\\
&= \sum_{p} \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} \frac{dk}{2\pi} \rho_c(k - pk_g) e^{i(k - p\frac{2\pi}{\Delta x})j\Delta x} && (2.23)\\
&= \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikX_j} \sum_{p} \rho_c(k - pk_g) && (2.24)\\
&= \int_{-\frac{\pi}{\Delta x}}^{\frac{\pi}{\Delta x}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikX_j} \rho(k). && (2.25)
\end{aligned}$$

On en déduit :

$$\rho(k) = \sum_{p} \rho_c(k - pk_g) = q \sum_{p} S_n(k_p) n(k_p), \tag{2.26}$$

où $k_p = k - pk_g$. Ainsi, la sommation sur les répliques avec $|k_p|\Delta x > \pi$ contribue à la densité $\rho(k)$ pour $k\Delta x < \pi$. Ce phénomène d'*aliasing* est typique de l'échantillonnage d'un signal continu sur une grille. On constate qu'il peut être minimisé grâce à un facteur de forme d'ordre élevé puisque $S^n(k) = O(\frac{1}{k^{n+1}})$.

2.2.3 Détermination de la relation de dispersion

Nous disposons à présent de tous les éléments nécessaires pour établir la relation de dispersion du plasma numérique, en négligeant à ce stade de l'analyse l'influence du pas de temps Δt. On part de l'équation de Vlasov en supposant une perturbation de la fonction de distribution $f(x,v,t) = f^{(0)}(v) + f^{(1)}(x,v,t)$, d'où :

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + v\frac{\partial f^{(1)}}{\partial x} + \frac{F^{(1)}(x,t)}{m}\frac{\partial f^{(0)}}{\partial v} = 0. \tag{2.27}$$

On obtient dans l'espace de Fourier :

$$f^{(1)}(k,v,\omega) = -\frac{F(\omega,k)\partial f^{(0)}/\partial v}{i(kv-\omega)m}, \tag{2.28}$$

d'où

$$n^{(1)}(k,v,\omega) = n_0 \int dv f^{(1)}(k,v,\omega), \tag{2.29}$$

$$= -\frac{in_0 F(k,\omega)}{m}\int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - kv}. \tag{2.30}$$

La densité discrétisée s'écrit donc :

$$\rho^{(1)}(k,\omega) = q\sum_p S_n(k_p)n(k_p) \tag{2.31}$$

$$= -\frac{in_0 q}{m}\sum_p S_n(k_p)F(k_p)\int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - k_p v}. \tag{2.32}$$

Par ailleurs d'après les résultats précédents, nous avons :

$$\begin{aligned} F(k_p) &= qE(k_p)S_n(-k_p) \\ &= -iqS_n(-k_p)K_2(k_p)\phi(k_p). \end{aligned} \tag{2.33}$$

La densité s'exprime donc par :

$$\rho(k) = -\frac{qn_0^2}{m}\sum_p S_n(k_p)S_n(-k_p)K_2(k_p)\phi(k_p)\int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - k_p v} \tag{2.34}$$

$$= -\frac{qn_0^2}{m}\phi(k)\sum_p |S_n(k_p)|^2 K_2(k_p)\int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - k_p v}. \tag{2.35}$$

Remarquons que $\phi(k_p) = \phi(k)$ car ϕ est défini sur la grille. L'équation de Poisson (2.14) donne par ailleurs :

$$K_1^2(k) = -\frac{n_0 q^2}{m\epsilon_0}\sum_p S_n^2(k_p)K_2(k_p)\int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - k_p v} \tag{2.36}$$

La relation de dispersion du plasma numérique s'écrit finalement :

$$\epsilon(k,\omega) = 1 + \frac{K_2(k)\omega_p^2}{K_1^2(k)} \sum_p S_n^2(k_p) \int dv \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{\omega - k_p v} = 0, \tag{2.37}$$

avec la pulsation plasma $\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m\epsilon_0}}$ et en exploitant $K_2(k_p) = K_2(k)$. On remarque au travers de cette relation de dispersion l'influence déterminante du facteur de forme sur le couplage entre le mode fondamental (ω, k) et ses répliques (ω, k_p).

2.2.4 Modifications pour un schéma conservatif en énergie

L'analyse précédente peut être transposée dans le cas d'un algorithme conservatif en énergie [21]. La transformée de Fourier de la force continue donnée par l'équation (2.33) conserve la même forme mais nous avons maintenant

$$K_2(k) = k.$$

De même, l'équation de Poisson conserve la même forme que (2.36) avec maintenant [21]

$$K_1^2(k) = \sum_p k_p^2 S_n^2(k_p).$$

La relation de dispersion résultante, formellement identique à (2.37), nous sera utile pour l'analyse des fluctuations électrostatiques dans la Sec. 2.6. Nous nous replaçons maintenant dans le cas d'un schéma conservatif en impulsion afin d'analyser la relation de dispersion (2.37).

2.2.5 Couplage de répliques et instabilité numérique

Si l'on suppose que les électrons ont une distribution de vitesse maxwellienne $f^{(0)}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}v_t} \exp\left(-\frac{v^2}{2v_t^2}\right)$ de vitesse thermique v_t, la relation de dispersion (2.37) devient :

$$\epsilon(\omega,k) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2K_1^2(k)v_t^2} \sum_p S_n^2(k_p) \frac{K_2(k_p)k_p}{k_p^2} \mathcal{Z}'\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}|k_p|v_t}\right) = 0, \tag{2.38}$$

où $\mathcal{Z}'$ est la dérivée de la fonction de Fried et Conte [48], définie par :

$$\mathcal{Z}(\xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt \exp(-t^2)}{t - \xi} \text{ avec } \Im(\xi) > 0 \tag{2.39}$$

$$= 2i \exp\left(-\xi^2\right) \int_{-\infty}^{i\xi} dt \exp(-t^2), \forall \xi. \tag{2.40}$$

On a $\mathcal{Z}' = -2(1+\xi\mathcal{Z})$. Quand $\Delta x \leq \lambda_D$, le terme principal de la somme présente dans (2.38) correspond à $k_p = k_0 = k$. On peut supposer dans ce cas que les effets de couplage interviennent peu. Tout se passe alors comme si on avait un nuage de particules étendues mais sans grille, et la relation de dispersion approchée devient :

$$\epsilon_0(k,\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2k^2v_t^2} S_n^2(k) \frac{kK_2}{K_1^2} \mathcal{Z}'\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}|k|v_t}\right). \tag{2.41}$$

Dans le cas général, après simplification, la relation (2.38) s'écrit :

$$\epsilon(\omega,k) = 1 - \frac{\sin(k\Delta x)}{2K_1^2(k)\lambda_D^2} \sum_p \frac{|S_n(k_p)|^2}{k_p\Delta x} \mathcal{Z}'\left(\frac{\omega}{\sqrt{2}|k_p|v_t}\right). \tag{2.42}$$

Afin de comprendre simplement les propriétés de la relation de dispersion (2.42) et l'origine de l'instabilité d'*aliasing*, nous effectuons un développement asymptotique de la fonction $\mathcal{Z}'$ pour les ondes dont la vitesse de phase est grande devant la vitesse thermique, *i.e*, dans la limite $|\xi| \gg 1$. On trouve [49]

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}'(\xi) &= -2(1+\xi\mathcal{Z}), \\ &\sim \frac{1}{\xi^2} - 2i\pi^{1/2}\xi \exp\left(-\xi^2\right). \end{aligned} \tag{2.43}$$

D'où

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega,k) \approx 1 &- \frac{\sin(k\Delta x)}{K_1^2(k)\lambda_D^2\Delta x} \sum_p \frac{S_n^2(k_p)}{k_p} \frac{k_p^2v_t^2}{\omega^2} \\ &+ \frac{i\pi^{1/2}\sin(k\Delta x)}{K_1^2(k)\lambda_D^2\Delta x} \sum_p \frac{S_n^2(k_p)}{k_p} \frac{\omega}{\sqrt{2}|k_p|v_t} \exp\left(-\frac{\omega^2}{2k_p^2v_t^2}\right) \end{aligned} \tag{2.44}$$

En multipliant Eq. (2.44) par ω^2, on obtient dans l'hypothèse où $|\omega_r| \gg |\omega_i|$,

$$\omega^2 \approx \omega_r^2 + 2i\omega_r\omega_i \approx \frac{\sin(k\Delta x)\omega_p^2}{K_1^2(k)\Delta x} \sum_p S_n^2(k_p)k_p \tag{2.45}$$

$$-\frac{i\pi^{1/2}\sin(k\Delta x)}{\sqrt{2}K_1^2(k)\lambda_D^2\Delta x v_t} \sum_p \frac{S_n^2(k_p)}{k_p} \frac{\omega_r^3}{|k_p|} \exp\left(-\frac{\omega_r^2}{2k_p^2v_t^2}\right). \tag{2.46}$$

On en déduit par identification les parties réelle

$$\omega_r^2 \sim \frac{\sin(k\Delta x)\omega_p^2}{K_1^2(k)\Delta x} \sum_p S_n^2(k_p)k_p, \tag{2.47}$$

et imaginaire

$$\omega_i \sim \frac{-\pi^{1/2}\sin(k\Delta x)}{2\sqrt{2}K_1^2(k)\lambda_D^2\Delta x v_t} \sum_p \frac{S_n^2(k_p)\omega_r^2}{k_p|k_p|} \exp\left(-\frac{\omega_r^2}{2k_p^2v_t^2}\right). \tag{2.48}$$

L'Eq. (2.48) révèle que les contributions des répliques $p \leq -1$ et $p \geq 1$ sont de signes opposés, correspondant respectivement à un amortissement et à une croissance. Au final, l'effet net de toutes les répliques peut être déstabilisant comme nous allons le voir dans la prochaine section.

2.2.6 Résolution numérique : influence du facteur de forme

Nous avons résolu exactement la relation de dispersion (2.42) pour $k \in [0, \frac{\pi}{\Delta x}$ réel et ω complexe. Nous avons exploité pour cela le solveur d'équations non-linéaires STRSCNE développé par Bellavia *et al.* [50] ainsi que l'algorithme mis au point par Wiedeman [51] pour calculer la fonction $\mathcal{Z}$.
Les figures suivantes représentent l'évolution de la fréquence réelle et du taux de croissance en fonction du vecteur d'onde pour différentes valeurs de $\frac{\Delta x}{\lambda_D}$ et de l'ordre du schéma. Ces résultats viennent enrichir ceux de Langdon obtenus à l'ordre zéro [21]. Notons que sur ces figures $\omega = \Re(\omega)$ et $\Gamma = \Im(\omega)$.

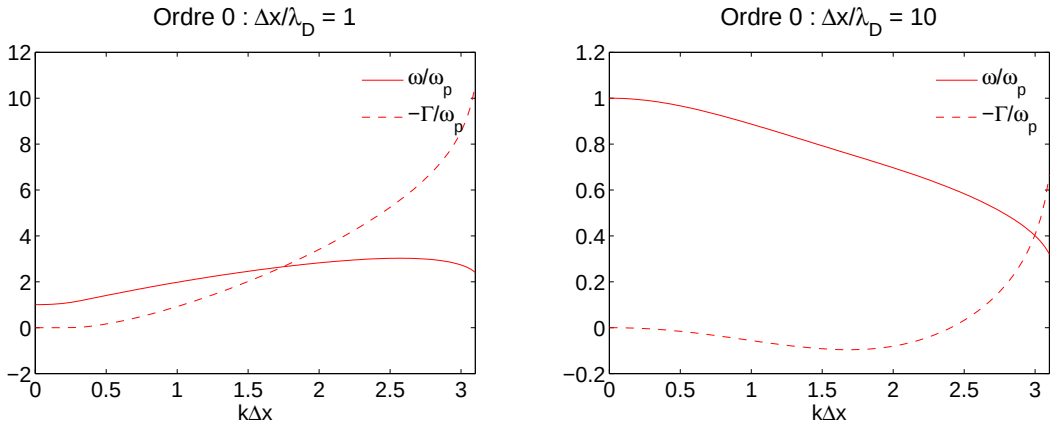


FIGURE 2.1 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 0 (NGP) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite).

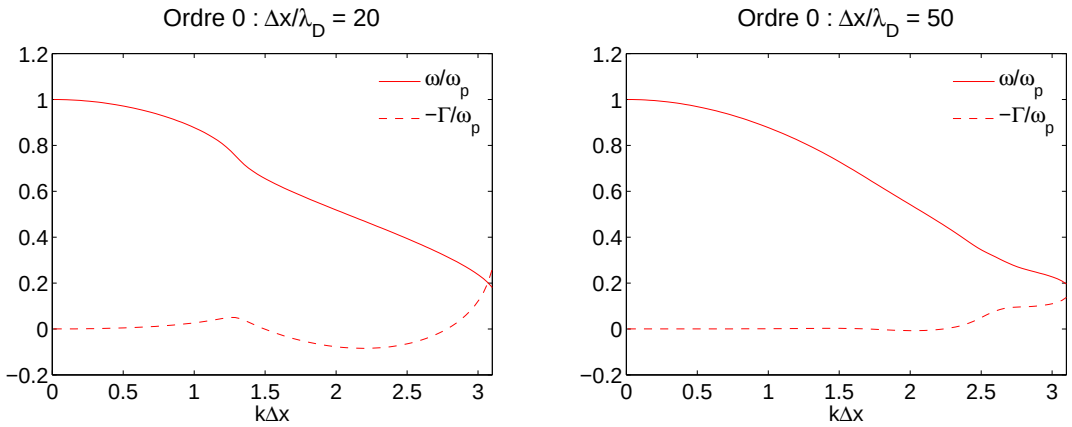


FIGURE 2.2 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 0 (NGP) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite).

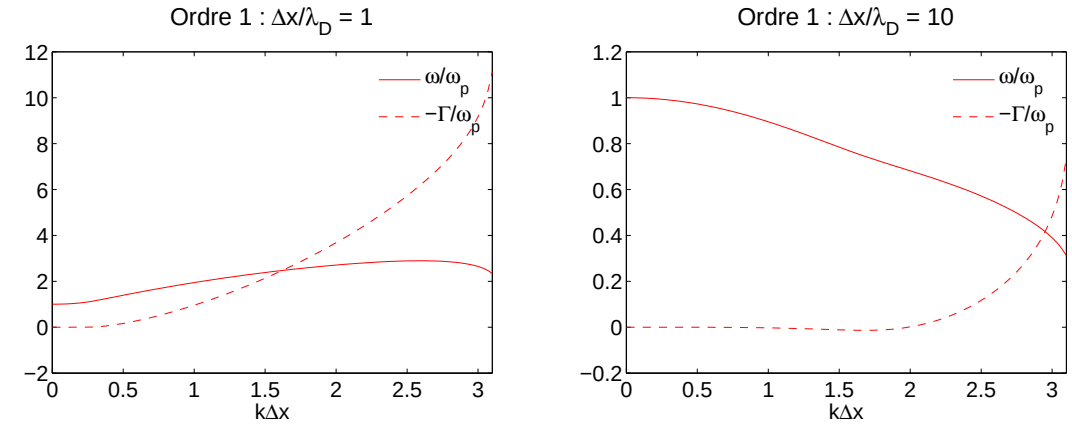


FIGURE 2.3 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 1 (PIC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite).

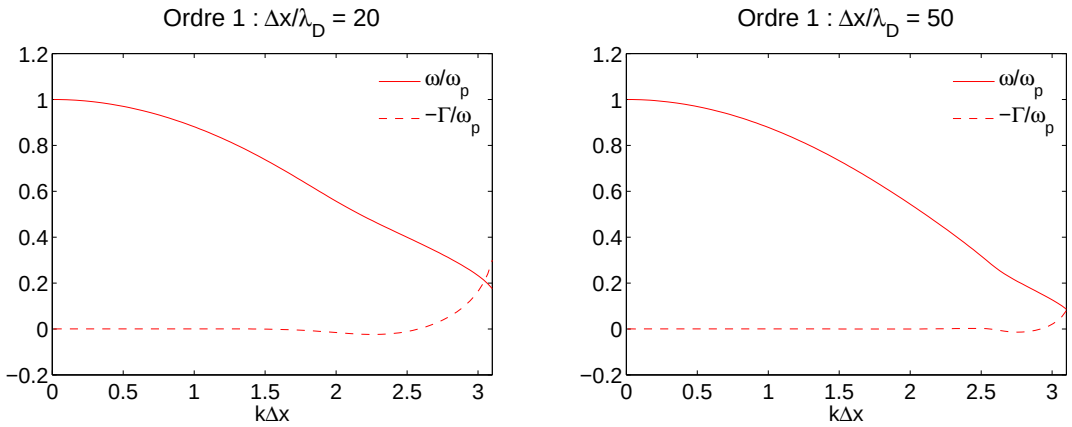


FIGURE 2.4 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 1 (PIC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite).

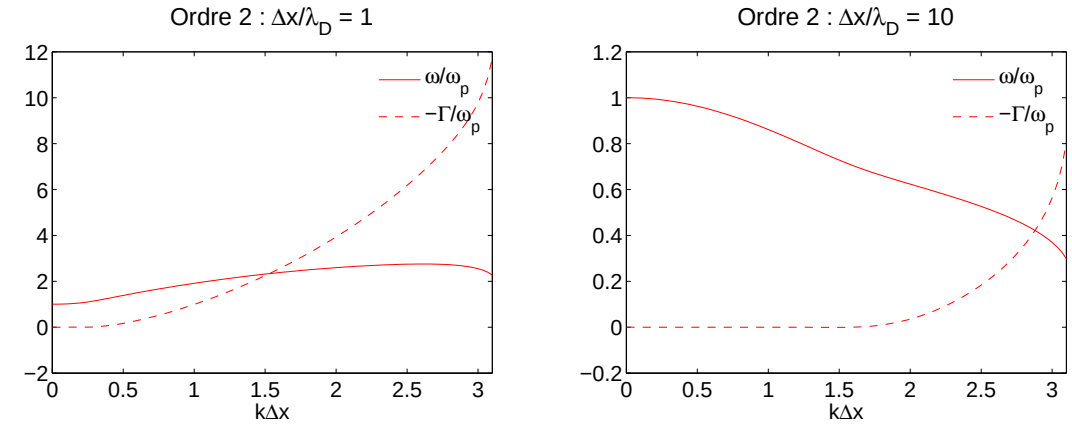


FIGURE 2.5 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 2 (TSC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ (droite).

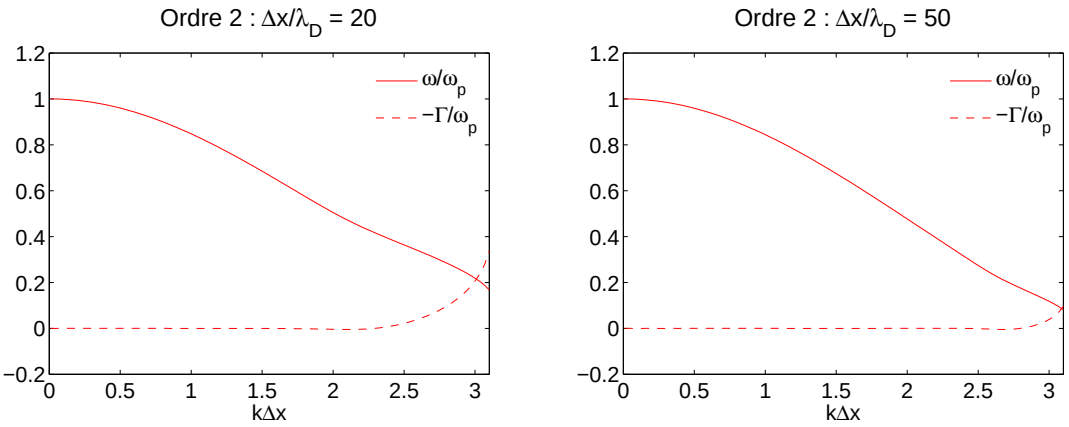


FIGURE 2.6 – Solutions de l'Eq. (2.42) à l'ordre 2 (TSC) pour $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 20$ (gauche) et $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 50$ (droite).

Dès lors que $\Delta x/\lambda_D \gtrsim 1$, la partie réelle de la pulsation présente une décroissance non-physique (*i.e*, une vitesse de groupe négative) aux grands k, l'écart à la loi de Bohm-Gross $\omega_r = (\omega_p^2 + 3k^2v_t^2)^{1/2}$ (pour $k\lambda_D \leq 0.3$) se produisant de plus en plus tôt quand $\Delta x/\lambda_D$ augmente. Notons que l'ordre du facteur de forme n'influence pas de façon significative cette dépendance anormale de ω_r. Au-delà d'une valeur seuil de $\frac{\Delta x}{\lambda_D}$ fonction du facteur de forme, ces courbes font toutes apparaître une région instable pour $k\Delta x$ modéré, avant de recouvrer l'amortissement Landau caractéristique des ondes plasma à k élevé. Cette zone instable est, comme nous l'avons montré plus haut de façon approximative, la conséquence du couplage du mode fondamental avec les répliques générées par la grille. Pour un ordre donné, l'instabilité croît d'abord avec le rapport $\Delta x/\lambda_D$ jusqu'à un maximum (fonction décroissante de l'ordre), puis diminue quand $\Delta x/\lambda_D$ continue d'augmenter (Tabs. 2.1-2.2). Ce dernier comportement dans la limite $\Delta x/\lambda_D \gg 1$ témoigne tout simplement de la stabilité d'un plasma froid en l'absence de champ extérieur. La valeur $\Delta x/\lambda_D$ maximisant l'instabilité du système est une fonction croissante de l'ordre comme l'illustre la Fig. 2.7 (et les Tabs. 2.1-2.1) : elle vaut respectivement $\Delta x/\lambda_D = 12, 19, 31, 52$ à l'ordre $0, 1, 2$ et 3.

L'instabilité numérique mise en évidence par cette analyse s'avère, en effet, d'autant plus forte que l'ordre est faible et que $\Delta x/\lambda_D$ est élevé ; mais pas trop élevé, car on converge alors, dans tous les cas (Fig. 2.7), vers un plasma froid, notoirement stable. Ce comportement tient à ce que l'instabilité résulte du couplage entre différentes composantes de Fourier de la densité du plasma (de vecteur d'onde $k_p = k - pk_g$), couplage dont la force, proportionnelle à $S^2(k_p)$, décroît avec l'ordre du schéma d'interpolation.

$\Delta x/\lambda_D$	10	15	20	25	30	35
ordre 0	0.096 (1.68)	0.096 (1.99)	0.084 (2.21)	1.4×10^{-3} (0.66)	5.6×10^{-3} (1.16)	7.5×10^{-3} (1.47)
ordre 1	0.014 (1.68)	0.023 (2.02)	0.024 (2.27)	0.023 (2.42)	0.021 (2.51)	0.019 (2.61)
ordre 2	8×10^{-4} (1.47)	3×10^{-3} (1.87)	4.8×10^{-3} (2.11)	5.6×10^{-3} (2.27)	5.8×10^{-3} (2.39)	5.7×10^{-3} (2.48)
ordre 3	10^{-5} (1.28)	2×10^{-4} (1.65)	5×10^{-4} (1.9)	8×10^{-4} (2.08)	1.1×10^{-3} (2.21)	1.2×10^{-3} (2.3)

TABLE 2.1 – Valeur maximale du taux de croissance Γ_{max}/ω_p (et mode k_{max} associé) pour quelques valeurs de $\Delta x/\lambda_D$ en fonction de l'ordre.

$\Delta x/\lambda_D$	40	45	50	60	70	100
ordre 0	8.1×10^{-3} (1.71)	8×10^{-3} (1.9)	7.8×10^{-3} (2.02)	7×10^{-3} (2.21)	6×10^{-3} (2.36)	5×10^{-3} (2.6)
ordre 1	0.017 (2.67)	0.015 (2.73)	0.014 (2.76)	0.012 (2.82)	0.01 (2.85)	7.4×10^{-3} (2.95)
ordre 2	5.5×10^{-3} (2.58)	5.2×10^{-3} (2.64)	4.9×10^{-3} (2.67)	4.3×10^{-3} (2.76)	3.8×10^{-3} (2.79)	2.7×10^{-3} (2.92)
ordre 3	1.3×10^{-3} (2.39)	1.4×10^{-3} (2.45)	1.4×10^{-3} (2.51)	1.4×10^{-3} (2.61)	1.3×10^{-3} (2.67)	10^{-3} (2.82)

TABLE 2.2 – Valeur maximale du taux de croissance Γ_{max}/ω_p (et mode k_{max} associé) pour quelques valeurs de $\Delta x/\lambda_D$ en fonction de l'ordre.

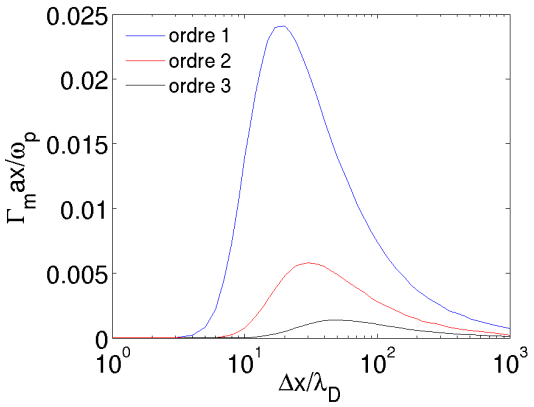


FIGURE 2.7 – Taux de croissance maximal de l'instabilité d'aliasing en fonction de $\Delta x/\lambda_D$ pour différentes valeur de l'ordre de la fonction d'interpolation.

2.3 Analyse de la discrétisation en temps

De même que nous venons d'étudier l'influence du seul pas spatial, il est possible d'établir une relation de dispersion ne prenant en compte que le pas de temps. Nous présentons ici les principales étapes de ce calcul développé dans [21]. Combinés à ceux de la précédente, les résultats fournis dans cette section nous permettront de déterminer par la suite une relation de dispersion incluant l'influence des discrétisations en espace et en temps.

Soient les équations du mouvement discrétisées selon un schéma de type "saute-mouton" :

$$v_{n+1/2} - v_{n-1/2} = a_n \Delta t, \tag{2.49}$$

$$x_{n+1} - x_n = v_{n+1/2} \Delta t, \tag{2.50}$$

où x, v et a désignent respectivement la position, la vitesse et l'accélération d'une particule. Ces quantités peuvent être perturbées au premier ordre autour d'une orbite initiale :

$$x_n = x_n^{(0)} + x_n^{(1)} \text{ avec } x_n^{(0)} = x_0^{(0)} + v_0^{(0)} t_n.$$

Les équations (2.49) et (2.50) peuvent être sommées à chaque instant pour obtenir

$$\sum_{s=1}^{\infty} \left(x_{n-s+1}^{(1)} - x_{n-s}^{(1)} - v_{n-s+1/2}^{(1)} \Delta t \right) = 0, \tag{2.51}$$

$$\sum_{s=1}^{\infty} s \left(v_{n-s+1/2}^{(1)} - v_{n-s-1/2}^{(1)} - a_{n-s}^{(1)} \Delta t \right) = 0. \tag{2.52}$$

En supposant de plus les perturbations nulles à l'origine des temps (*i.e*, $x_{n-\infty}^{(1)} = 0$ et $v_{n-\infty}^{(1)} = 0$), on en déduit

$$x_n^{(1)} = \sum_{s=1}^{\infty} v_{n-s+1/2}^{(1)} \Delta t, \tag{2.53}$$

puis finalement

$$x_n^{(1)} = \Delta t^2 \sum_{s=1}^{\infty} s a_{n-s}^{(1)}. \tag{2.54}$$

Supposons que la perturbation du champ électrique admette la forme suivante

$$E^{(1)}(x,t) = E(k) e^{i(kx - \omega t)}, \tag{2.55}$$

où k est un vecteur d'onde réel et ω une pulsation complexe. On en déduit

$$a_n^{(1)} = \frac{qE}{m} e^{i(k x_n^{(0)} - \omega t_n)}, \tag{2.56}$$

puis

$$x_n^{(1)} = \Delta t^2 \frac{qE}{m} \sum_{s=1}^{\infty} s e^{i(kx_{n-s}^{(0)} - \omega t_{n-s})}. \tag{2.57}$$

On pose $x_n^{(0)} \equiv x^{(0)}$ et $v^{(0)} \equiv v$. Après quelques développements, (2.57) peut s'écrire sous la forme

$$x^{(1)}\left(x^{(0)}, v^{(0)}, t_n\right) = \Delta t^2 \frac{qE}{m} e^{i(kx^{(0)} - \omega t_n)} \sum_{s=1}^{\infty} s e^{i(\omega - kv)s\Delta t}. \tag{2.58}$$

On introduit la polarisation P définie par

$$P(x,t) = n_0 q \int dv f^{(0)}(v) x^{(1)}(x,v,t). \tag{2.59}$$

La perturbation de densité de charge continue est donnée par $\rho^{(1)} = -\nabla \cdot \mathbf{P}$. Une transformation de Fourier en espace donne $\rho^{(1)}(k) = -ikP(k)$, soit

$$\rho^{(1)}(k) = -ikE(k) \frac{n_0 q^2}{m} \Delta t^2 e^{i(kx^{(0)} - \omega t_n)} \int dv f_0(v) \sum_{s=1}^{\infty} s e^{i(\omega - kv)s\Delta t}. \tag{2.60}$$

On en déduit la relation de dispersion

$$\epsilon(\omega, k) = 1 + \omega_p^2 \Delta t^2 \int dv f_0(v) \sum_{s=1}^{\infty} s e^{i(\omega - kv)s\Delta t} = 0. \tag{2.61}$$

Après une intégration par parties, (2.61) peut se mettre sous la forme

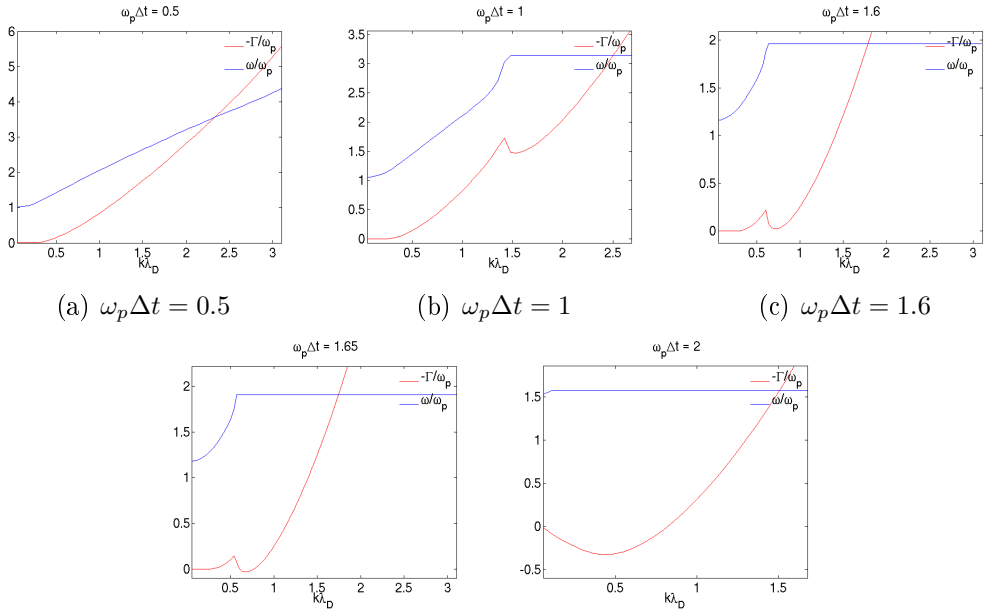
$$\epsilon(\omega, k) = 1 + \omega_p^2 \Delta t^2 \int \frac{\partial f^{(0)}/\partial v}{ik\Delta t} \sum_{s=1}^{\infty} e^{i(\omega - kv)s\Delta t} dv. \tag{2.62}$$

Pour une distribution f_0 maxwellienne de vitesse thermique $v_t = (T/m)^{1/2}$ on obtient

$$\epsilon(\omega, k) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2k^2 v_t^2} \sum_{q=-\infty}^{\infty} \mathcal{Z}'\left(\frac{\omega_q}{\sqrt{2}|k|v_t}\right) \tag{2.63}$$

où $\omega_q = \omega - q\omega_g$ et $\omega_g = 2\pi/\Delta t$.

La résolution numérique de (2.63) illustrée sur les Figs. 2.8(a)-2.8(e) fait apparaître deux effets de la discrétisation temporelle : d'abord, l'existence d'un palier pour ω_r, associé aux grandes valeurs de $k\lambda_D$, et survenant de plus en plus tôt au fur et à mesure que $\omega_p \Delta t$ croît. Par exemple, pour $\omega_p \Delta t \sim 1.65$, un palier $\frac{\omega_r}{\omega_p} \approx 1.9$ est atteint pour $k\lambda_D \geq 0.6$. Ensuite comme déjà révélé dans [21], une instabilité se déclenche au-delà de $\omega_p \Delta t = 1.62$ [Figs. 2.8(d)-2.8(e) et Tab. 2.3]. Ce seuil est plus contraignant que celui obtenu à partir de l'analyse du mouvement d'une particule soumise à un champ électrique harmonique ($\omega_p \Delta t \leq 2$). L'analyse suivante, mêlant effets des discrétisations en temps et en espace, nous amènera néanmoins à le réviser.



(a) $\omega_p \Delta t = 0.5$ (b) $\omega_p \Delta t = 1$ (c) $\omega_p \Delta t = 1.6$

(d) $\omega_p \Delta t = 1.65$ (e) $\omega_p \Delta t = 2$

FIGURE 2.8 – Solutions de la relation de dispersion (2.63) pour différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$.

$\omega_p \Delta t$	1.6	1.62	1.63	1.65	1.7
Γ_{max}	0	0	0.011	0.033	0.086
k_{max}	0.08	0.08	0.7	0.67	0.64

TABLE 2.3 – Taux de croissance maximal Γ_{max}/ω_p et nombre d'onde $k_{max}\lambda_D$ associé pour diverses valeurs de $\omega_p \Delta t$.

2.4 Analyse couplant la discrétisation en temps et en espace

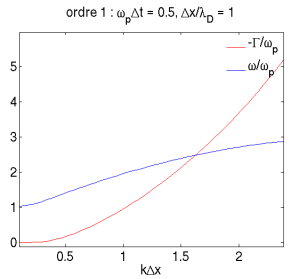
Considérons maintenant la relation de dispersion complète incluant les effets des discrétisations en temps et en espace. Nous prendrons soin d'examiner un régime mixte où la stabilité du plasma maxwellien est très dépendante du choix du facteur de forme et des discrétisations. Le calcul de la relation de dispersion complète est détaillé dans l'Annexe A dans le cas du schéma implicite traité en 4.1. L'expression obtenue fait apparaître deux termes correspondant respectivement au schéma explicite "saute-mouton" ici considéré, et à la contribution propre au

schéma implicite. La relation de dispersion explicite s'écrit :

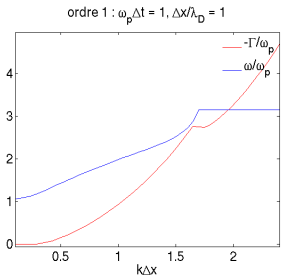
$$\epsilon(\omega,k) = 1 + \frac{(\Delta x/\lambda_D)^2 \sin(k\Delta x)}{(k\Delta x)^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}{\frac{k\Delta x}{2}}\right)^2} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \frac{S_n^2(k_p)}{k_p \Delta x} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \left[1 + \xi_{pq} \mathcal{Z}(\xi_{pq})\right], \qquad (2.64)$$

où l'on a défini $\xi_{pq} = \frac{\omega_q}{\sqrt{2} k_p v_t}$.

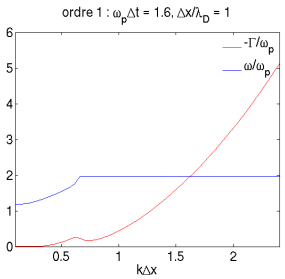
Les Figs. 2.9(a)-2.9(e) représentent les solutions $\omega(k)$ de (2.64) obtenues à l'ordre un pour $\Delta x/\lambda_D = 1$ et des valeurs croissantes de $\omega_p \Delta t$. On constate une transition vers un comportement instable au voisinage de $\omega_p \Delta t \approx 1.7$, un seuil légèrement supérieur à celui prédit par l'approche purement temporelle. Ce seuil n'est quasiment pas affecté par l'ordre de la fonction d'interpolation comme le prouvent les Figs. 2.10(a)-2.10(c), obtenues à l'ordre trois.



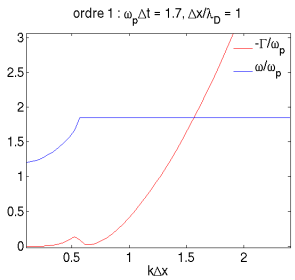
(a) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 0.5$



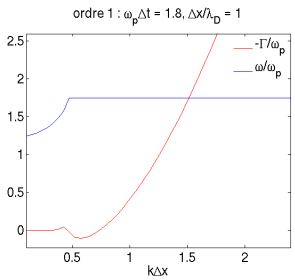
(b) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1$



(c) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.6$



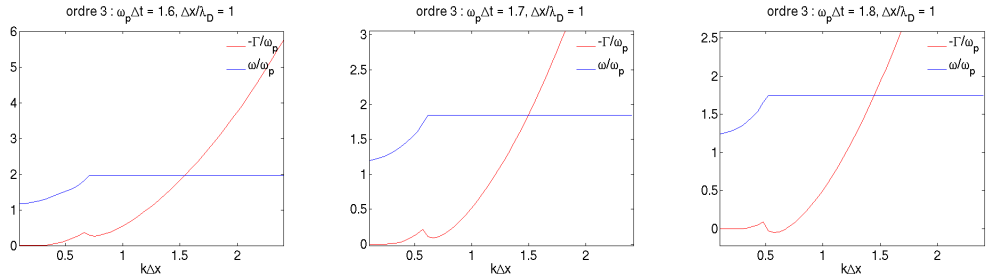
(d) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.7$



(e) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.8$

FIGURE 2.9 – Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\Delta x/\lambda_D = 1$, un schéma d'interpolation d'ordre 1, et différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$.

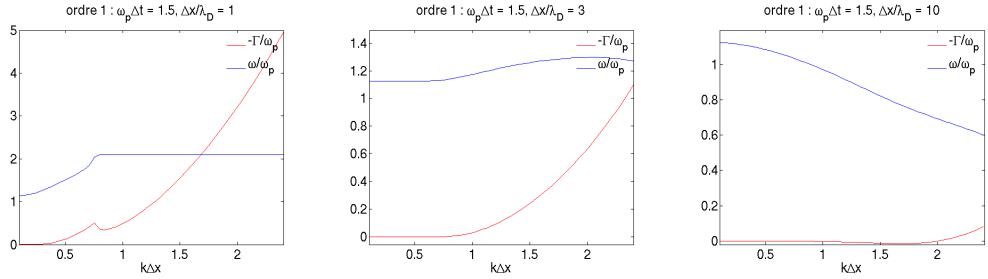
Examinons à présent l'influence d'une augmentation du pas spatial sur la fréquence imaginaire. Pour $\omega_p \Delta t = 1.5$, ω_r/ω_p présente trois visages distincts : pour $\Delta x/\lambda_D = 1$, elle atteint un palier non-physique autour de 2, caractéristique de la discrétisation temporelle comme montré précédemment ; pour $\Delta x/\lambda_D = 3$ en dépit d'une valeur dépassant la pulsation plasma en $k = 0$ la vitesse de groupe reste positive pour les modes faiblement amortis, pour $\Delta x/\lambda_D = 10$,



(a) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.6$ (b) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.7$ (c) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.8$

FIGURE 2.10 – Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\Delta x/\lambda_D = 1$, un schéma d'interpolation d'ordre 3, et différentes valeurs de $\omega_p \Delta t$.

la pulsation décroît d'une manière analogue à l'analyse purement spatiale. La stabilité numérique du plasma est assurée dans les cas $\Delta x/\lambda_D = 1$ et 3 [Figs. 2.11(a)-2.11(b)] ; en revanche l'effet d'*aliasing* est déstabilisant pour $\Delta x/\lambda_D = 10$ [comme on le devine dans Fig. 2.11(c)].

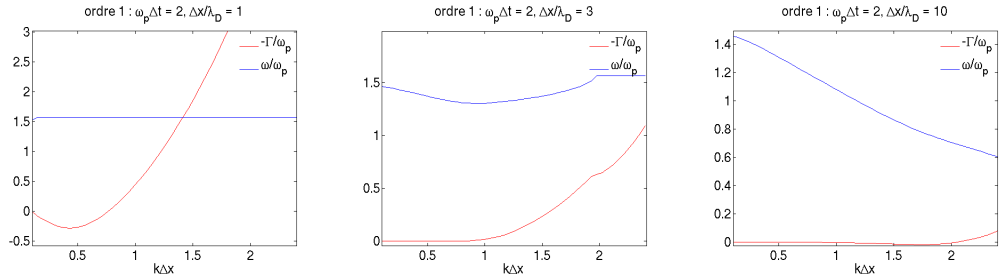


(a) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 1.5$ (b) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 3$ et $\omega_p \Delta t = 1.5$ (c) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ et $\omega_p \Delta t = 1.5$

FIGURE 2.11 – Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 1.5$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$.

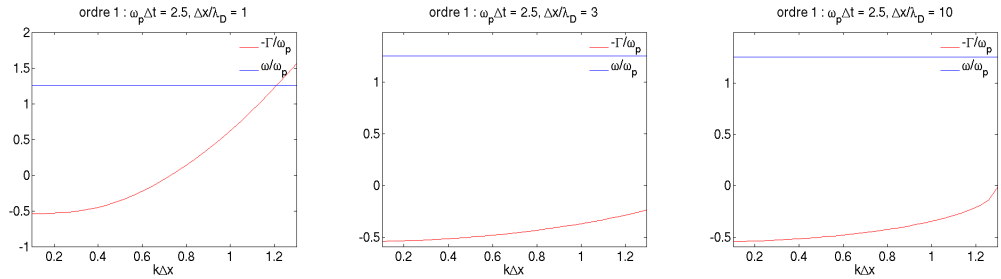
Considérons maintenant un pas de temps $\omega_p \Delta t = 2$, supposé correspondre à un régime instable d'après l'analyse temporelle. La Fig. 2.12(a), correspondant à $\Delta x/\lambda_D = 1$, met en évidence un mode instable dominant caractérisé par $(k\Delta x, \Gamma_{max}/\omega_p) = (0.43, 0.27)$ principalement associé à la discrétisation temporelle que l'on obtiendrait en résolvant (2.63). La Fig. 2.12(c), relative à $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$, révèle quant à elle, une instabilité maximale en $(k\Delta x, \Gamma_{max}/\omega_p) = (1.74, 0.018)$, imputable à l'*aliasing*. Plus surprenant, la Fig. 2.12(b) atteste de la stabilité potentielle du schéma PIC explicite pour une valeur intermédiaire $\Delta x/\lambda_D = 3$. Sans surprise, l'instabilité à grand $\Delta x/\lambda_D$ est d'autant plus faible que le facteur de forme est d'ordre élevé. Ainsi, à l'ordre trois, pour $\omega_p \Delta t = 2$ et $\Delta x/\lambda_D = 10$, nous obtenons $(k\Delta x, \Gamma_{max}/\omega_p) = (1.37, 4 \times 10^{-5})$. Dans la limite $\Delta x/\lambda_D \gg 1$ et

pour un facteur de forme d'ordre élevé, l'instabilité provenant de la discrétisation en temps ne se produit que pour $\omega_p \Delta t \geq 2$. Pour $\omega_p \Delta t > 2$ et $\Delta x/\lambda_D \leq 10$, le plasma est sujet à une forte instabilité, culminant en $k = 0$. Les figs. 2.13(a)-2.13(c) illustrent, pour $\omega_p \Delta t = 2.5$, ce comportement dû à une discrétisation temporelle trop grossière. La prise en compte de la discrétisation spatiale conduit ainsi à déplacer la condition de stabilité du plasma numérique de $\omega_p \Delta t \leq 1.62$ (pour $\Delta x = 0$) vers $\omega_p \Delta t \lesssim 2$ (pour $\Delta x/\lambda_D = 3$). Dans le même temps, pour des valeurs toujours croissantes de $\Delta x/\lambda_D$, l'instabilité temporelle, d'abord présente pour $k\Delta x \leq 1$, glisse progressivement vers les grands k, indiquant la domination de l'instabilité d'*aliasing* caractéristique de la discrétisation en espace.



(a) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 2$ (b) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 3$ et $\omega_p \Delta t = 2$ (c) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ et $\omega_p \Delta t = 2$

FIGURE 2.12 – Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 2$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$.



(a) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 1$ et $\omega_p \Delta t = 2.5$ (b) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 3$ et $\omega_p \Delta t = 2.5$ (c) $\frac{\Delta x}{\lambda_D} = 10$ et $\omega_p \Delta t = 2.5$

FIGURE 2.13 – Solutions de la relation de dispersion (2.64) pour $\omega_p \Delta t = 2.5$, un schéma d'interpolation d'ordre un, et différentes valeurs de $\Delta x/\lambda_D$.

L'algorithme PIC conservant la quantité de mouvement totale mais pas l'énergie totale (Sec. 1.3), on peut s'attendre à ce que l'instabilité du plasma s'accompagne non seulement de la croissance des fluctuations électrostatiques (et plus généralement électromagnétiques) mais aussi de l'énergie cinétique. Nous allons quantifier l'ampleur de ce phénomène en fonction de l'ordre du schéma d'inter-

polation/projection et du nombre de macroparticules par maille, en mesurant la variation de l'énergie totale.

2.5 Variation de l'énergie totale en fonction du pas spatial, du nombre de particules par maille et de l'ordre

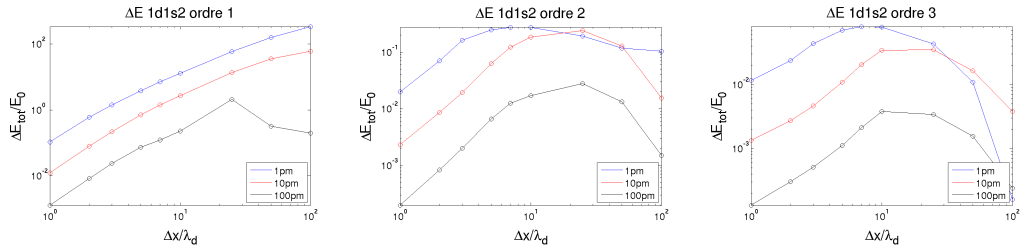
Pour un facteur de forme et une durée de simulation (normalisée à la période plasma) donnés, et pour un pas de temps suffisamment petit, l'écart à la conservation de l'énergie dépend essentiellement du rapport $\Delta x/\lambda_D$ et du nombre de macroparticules par maille. Les prédictions de la théorie linéaire, présentées dans les Sec. 2.2 -2.4, ne peuvent prétendre modéliser précisément le chauffage numérique inhérent aux simulations PIC puisqu'elles supposent une fonction de distribution continue, c'est-à-dire un nombre infini de macro-particules. Elle permettent cependant d'entrevoir l'intérêt d'accroître l'ordre du facteur de forme. La première étude paramétrique sur le sujet, menée par Okuda [52], a mis en évidence l'intérêt d'utiliser des facteurs de forme d'ordre élevé, un résultat confirmé plus avant par Abe *et al.* [53] pour des facteurs de forme atteignant l'ordre 5 et des valeurs de $\Delta x/\lambda_D$ allant jusqu'à 1000. Cependant, à notre connaissance, aucune étude n'a été conduite en $1D$, $2D$ et $3D$ avec des facteurs de forme d'ordre un à trois, et corrélée aux propriétés linéaires du schéma PIC. Afin d'apprécier le gain apporté par la montée en ordre des facteurs de forme, nous avons mesuré la non-conservation de l'énergie en fonction du pas spatial $\Delta x/\lambda_D$, du nombre de particules par maille, de la dimensionnalité ($1D$, $2D$ ou $3D$) et de l'ordre de l'interpolation. Nous avons simulé pour cela l'évolution d'un plasma maxwellien (physiquement stable) de températures électronique et ionique $T_e = T_i = 1$ keV (soit une vitesse thermique $v_t/c = 0.044$), en l'absence de tout champ extérieur. Le pas de temps est maintenu constant à la valeur $\Delta t = 0.025\omega_p^{-1}$. Pour chaque simulation nous mesurons l'écart à la conservation de l'énergie totale (de nature électrostatique et cinétique) :

$$\frac{\Delta E_{tot}}{E_0} = \frac{E_{tot}(t_{fin}) - E_{tot}(t_0)}{E_{tot}(t_0)}, \tag{2.65}$$

au bout de $500\omega_p^{-1}$ pour $\Delta x/\lambda_D \in \{1, 2, 3, 5, 7, 10, 25, 50, 100\}$. Compte tenu de la durée, relativement courte, de ces simulations nous prendrons comme critère de conservation satisfaisante de l'énergie totale une variation inférieure à 5%. Notons de plus que dans les applications impliquant une source externe d'énergie, telle qu'un laser, l'énergie initiale du plasma devient en général minoritaire, ce qui permet de tolérer un chauffage numérique modéré. L'observable (2.65) dissimule néanmoins des nuances dans l'évolution du chauffage, comme le révélera l'analyse plus fine de la Sec. 2.6.

Les résultats des simulations $1D$, $2D$ et $3D$ sont représentés sur les figures 2.14, 2.15 et 2.16 respectivement. Le système est composé de 10000, 100×100 et $30 \times 30 \times 30$ mailles respectivement en $1D$, $2D$ et $3D$. La comparaison des simulations avec la théorie linéaire qui suppose une fonction de distribution continue en (x, v) est, notons-le, d'autant plus pertinente que le nombre de macroparticules est élevé. Elle l'est plus encore au vu de la domination de l'énergie électrique sur l'énergie magnétique prévue par les simulations, ce qui valide l'approximation électrostatique du modèle linéaire. Dans cette approximation où seul importe le rapport $\Delta x/\lambda_D$, accroître Δx est strictement équivalent à décroître λ_D, c'est à dire à refroidir (ou à densifier) le plasma, d'où la réduction du chauffage observée dans chaque figure sauf à l'ordre un lorsque le nombre de particules par maille est trop faible.

Tous paramètres égaux par ailleurs, le passage à l'ordre deux réduit en moyenne le chauffage d'un ordre de grandeur. Avec 100 particules par maille, la courbe à l'ordre un présente un maximum assez bien défini autour de $\Delta x/\lambda_D = 25$. Ce comportement, confirmé à plus haute dimensionnalité, est en accord avec la réduction de l'instabilité numérique dans la limite froide ($\Delta x/\lambda_D \gg 1$) [Tabs. 2.1-2.2]. Néanmoins la variation relative de l'énergie ne permet pas de vérifier que la valeur de $\Delta x/\lambda_D$ qui maximise l'instabilité est une fonction croissante de l'ordre comme prédit par la théorie linéaire ; en effet, aussi bien à l'ordre 2 qu'à l'ordre 3, le chauffage du plasma est maximal pour $\Delta x/\lambda_D \sim 20$ [Figs. 2.14-2.16]. De façon générale, quel que soit l'ordre et le nombre de particules par maille, on observe l'écart le plus important à la conservation de l'énergie dans l'intervalle $7 \leq \Delta x/\lambda_D \leq 50$. Or, c'est précisément dans cet intervalle que l'instabilité d'*aliasing* se manifeste préférentiellement (Fig. 2.7). Pour $\Delta x/\lambda_D \geq 50$, on observe une diminution du chauffage numérique quel que soit le nombre de particules par maille, une tendance accentuée à l'ordre trois.



(a) $1dx2dv$ à l'ordre un (b) $1dx2dv$ à l'ordre deux (c) $1dx2dv$ à l'ordre trois

FIGURE 2.14 – $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $1dx2dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3.

A titre d'exemple, considérons le cas $1dx2dv$ [Figs. 2.14 et Tab. 2.4]. Passer de l'ordre un à l'ordre deux équivaut environ, pour une même discrétisation, à décupler le nombre de particules par maille (Figs. 2.14(a)-2.14(b)). Avec 100

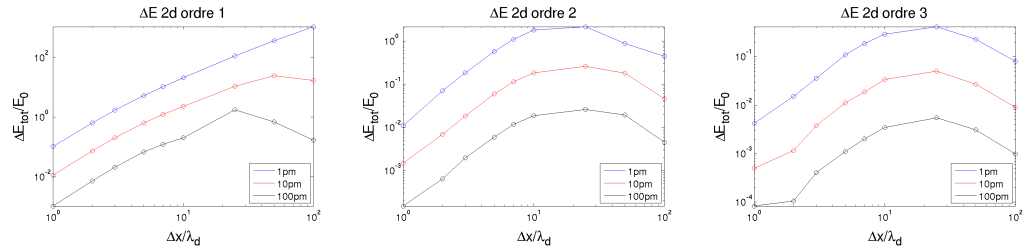
	ordre 1	ordre 2	ordre 3
1 pm	$\varnothing$	≈ 1	3 et $\gtrsim 25$
10 pm	≈ 1	5 et $\gtrsim 80$	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$
100pm	3	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$

TABLE 2.4 – Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $1dx2dv$.

	ordre 1	ordre 2	ordre 3
1 pm	$\varnothing$	≈ 1	3
10 pm	≈ 1	5 et $\gtrsim 100$	10 et $\gtrsim 50$
100pm	5	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$

TABLE 2.5 – Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $2dx2dv$.

particules par maille à l'ordre deux le chauffage numérique reste faible, atteignant au plus $\approx 5\%$. Dans les cas de 10 et 100 particules par maille le passage de l'ordre deux à l'ordre trois se caractérise par un gain d'un facteur 5 ou 6 sur $\Delta E_{tot}/E_0$. Avec une seule particule par maille, le chauffage numérique est systématiquement réduit entre l'ordre deux et l'ordre trois mais le gain n'est pas significatif. L'ordre trois permet de multiplier par ~ 3 le pas spatial tout en conservant une précision équivalente. On peut noter qu'à l'ordre trois le chauffage numérique est inférieur ou égal à 3% quel que soit $\Delta x/\lambda_D$ pour 10 et 100 particules par maille.



(a) $2dx2dv$ à l'ordre un (b) $2dx2dv$ à l'ordre deux (c) $2dx2dv$ à l'ordre trois

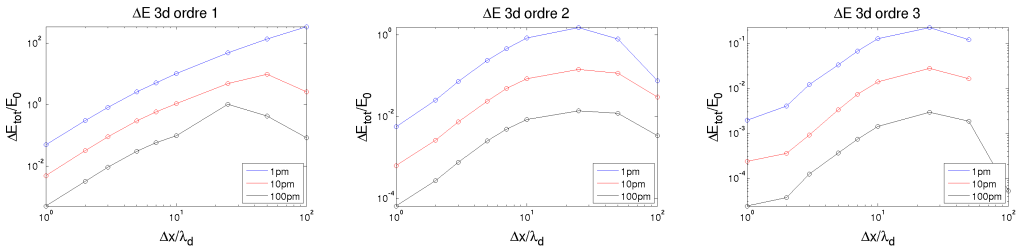
FIGURE 2.15 – $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $2dx2dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3.

Les résultats obtenus en $2D$ (Figs. 2.15 et Tab. 2.5) sont proches de ceux obtenus en $1D$, à l'exception d'un moindre gain entre les ordres deux et trois qu'entre les ordres un et deux. A l'ordre trois, d'après la Fig. 2.15(c), le chauffage

	ordre 1	ordre 2	ordre 3
1 pm	1	3	5 et $\gtrsim 100$
10 pm	3	7 et $\gtrsim 80$	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$
100pm	7	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$	$\forall \frac{\Delta x}{\lambda_D}$

TABLE 2.6 – Valeur de $\Delta x/\lambda_D$ autorisant une conservation de l'énergie à 5% près en fonction du nombre de particules par maille et de l'ordre du facteur de forme. Résultats en géométrie $3dx3dv$.

numérique ne dépasse pas 5% quel que soit $\frac{\Delta x}{\lambda_D}$ pour 10 et 100 particules par maille.



(a) $3dx3dv$ à l'ordre un (b) $3dx3dv$ à l'ordre deux (c) $3dx3dv$ à l'ordre trois

FIGURE 2.16 – $\Delta E_{tot}/E_0$ cas $3dx3dv$ et comparaison des ordres 1, 2 et 3.

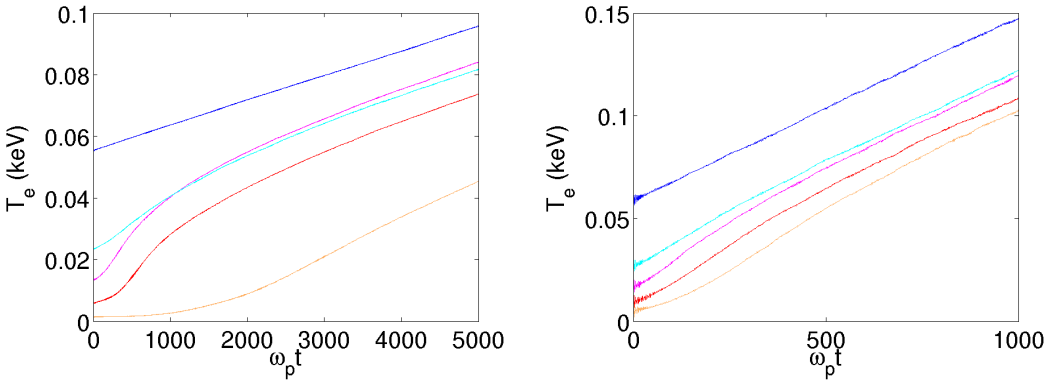
Enfin dans le cas $3D$ (Figs. 2.16 et Tab. 2.6), les propriétés du chauffage numérique sont similaires à celles mesurées à plus faible dimensionnalité. A l'ordre deux, il est nécessaire d'utiliser 100 particules par maille pour que le chauffage numérique n'excède pas 1% [Fig. 2.16(b)]. A l'ordre trois, le chauffage numérique ne dépasse pas 3% quel que soit $\Delta x/\lambda_D$ pour 10 et 100 particules par maille. Ajoutons que pour $\Delta x/\lambda_D = 100$, la variation d'énergie totale est alors quasi-nulle quel que soit le nombre de particules par maille [Fig. 2.16(c)]. D'un point de vue quantitatif, on peut obtenir une précision équivalente entre ordre deux et trois en réduisant le nombre de particules par maille d'un facteur 7 ou 8.

Les estimations obtenues dans cette section donnent un premier aperçu quantitatif du phénomène de chauffage numérique sans en préciser les mécanismes. En particulier, nous n'avons pas relié la croissance de l'énergie cinétique aux fluctuations du champ électromagnétique. C'est ce lien que nous allons dans une certaine mesure éclairer dans la prochaine section.

2.6 Régimes d'auto-chauffage linéaire et exponentiel

Les résultats numériques précédents révèlent une corrélation (qualitative à tout le moins) avec les prédictions de l'analyse linéaire. Nous n'avons toutefois considéré qu'une observable moyennée, sans prêter atention à la dynamique temporelle du chauffage. Nous allons voir que celle-ci peut présenter deux régimes distincts, caractérisés respectivement par une croissance linéaire et exponentielle de l'énergie cinétique, dont l'un vient d'un processus stochastique lié aux fluctuations quasi-stationnaites du champ électrique et l'autre de l'instabilité d'*aliasing*.

Afin de mettre en évidence ces régimes de chauffage, nous avons simulé l'évolution $1D$ et électrostatique d'un plasma maxwellien, discrétisé avec un pas d'espace $\Delta x = 0.1c/\omega_p$ (où ω_p désigne la pulsation plasma) et un pas de temps $\omega_p \Delta t = 0.05$. Les ions constituent un fond immobile neutralisant. Les conditions aux limites sont prises périodiques aussi bien pour les champs que pour les particules. Plusieurs températures initiales sont considérées, qui correspondent à $\Delta x/\lambda_D = 10$, 15, 20, 30 et 50. Nous nous restreignons ici à une fonction d'interpolation linéaire.



(a) 500 particules par maille

(b) 50 particules par maille

FIGURE 2.17 – Évolution temporelle de la température pour diverses températures initiales.

L'évolution temporelle de la température du plasma est représentée sur la Fig.2.17(a) avec 500 macro-particules par maille. Deux régimes d'auto-chauffage apparaissent : le plasma initialisé à 55 eV (*i.e*, $\Delta x/\lambda_D = 10$) chauffe linéairement en temps ; en revanche, pour des températures initiales inférieures on distingue une phase transitoire de croissance quasi-exponentielle (à taux variable selon la température initiale), suivie d'une évolution linéaire dont la pente est identique à celle obtenue d'emblée à 55 eV.

L'évolution temporelle de l'énergie électrique (Fig. 2.18) est corrélée à celle de l'énergie cinétique. Dans le cas d'un chauffage linéaire ($\Delta x/\lambda_D = 10$), l'énergie électrique croît faiblement (*i.e*, plus lentement que l'énergie cinétique). En revanche, une phase initiale de croissance exponentielle survient pour $\Delta x/\lambda_D = 20$ et 30 et, dans une moindre mesure, pour $\Delta x/\lambda_D = 50$. Dans tous ces cas, l'énergie électrique finit par saturer et retomber à un niveau proche de celui observé pour $\Delta x/\lambda_D = 10$. Cet instant marque une reprise du chauffage linéaire. Un résultat remarquable est que la température alors atteinte ~ 50eV est indépendante de la température initiale et correspond à $\Delta x/\lambda_D \sim 10$.

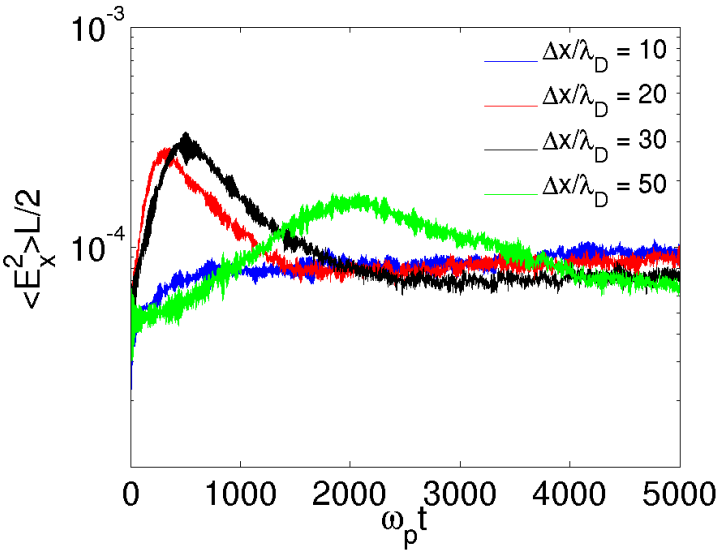
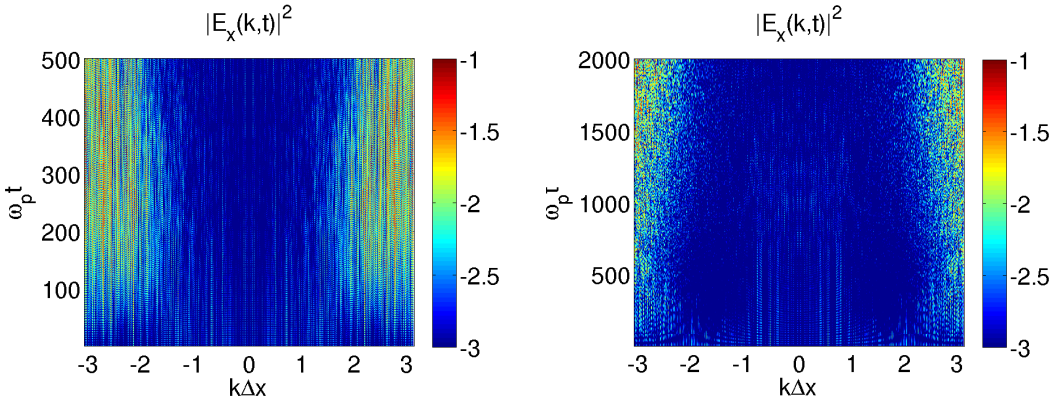


FIGURE 2.18 – Évolution temporelle de l'énergie électrique longitudinale totale pour diverses températures initiales. Simulations avec 500 macro-particules par maille.

L'évolution des spectres de l'énergie électrique pendant la phase de croissance quasi-exponentielle du champ est représentée sur les Figs. 2.19. La position des modes dominants obtenus pour $\Delta x/\lambda_D = 20$ [Fig. 2.19(a)] et 50 [Fig. 2.19(b)] est conforme aux prédictions théoriques de l'instablité d'*aliasing* (Fig. 2.4). On note en particulier un déplacement de ces modes vers $k\Delta x \sim 3$ pour $\Delta x/\lambda_D = 50$. Les taux de croissance maximaux calculés à partir de ces simulations ($\sim 10^{-2}\omega_p$) sont toutefois inférieurs à ceux prédits par la théorie linéaire d'un facteur ~ 2.

Pour se manifester clairement, l'instabilité d'*aliasing* requiert un niveau de fluctuations numériques suffisamment faible, et donc un nombre élevé de particules par maille de façon à vérifier au mieux l'hypothèse théorique d'une fonction de distribution continue. La fig. 2.17(b), obtenue pour 50 particules par maille, montre ainsi pour les mêmes températures que précédemment des régimes de



(a) $\Delta x/\lambda_D = 20$ (b) $\Delta x/\lambda_D = 50$

FIGURE 2.19 – Évolution temporelle du spectre de l'énergie électrique. Simulations avec 500 macro-particules par maille.

chauffage essentiellement linéaires.

La littérature révèle quelques tentatives pour déterminer analytiquement le taux de chauffage dans la phase linéaire [54, 53, 55]. Ueda *et al.* [55], inspirés par Hockney [54], attribuent le régime d'auto-chauffage linéaire à un écart d'origine stochastique (noté $\delta\mathbf{E}$) entre les fluctuations du champ électrique obtenues par les simulations et celles prédites analytiquement dans un plasma maxwellien conservatif en énergie. L'erreur $\delta\mathbf{v}$ produite en un pas de temps pour une macro-particule de masse m et de charge q est donnée par

$$\delta\mathbf{v} = \frac{q}{m}\Delta t\delta\mathbf{E} \tag{2.66}$$

La variation de l'énergie cinétique moyenne par pas de temps est donnée par

$$\Delta K_E = \frac{< K_E(t+\Delta t) > - < K_E(t) >}{\Delta t} \tag{2.67}$$

$$= \frac{1}{2}nm < \delta\mathbf{v}^2 > /\Delta t \tag{2.68}$$

$$= \omega_p^2\Delta t\frac{\epsilon_0}{2}\left\langle\delta\mathbf{E}^2\right\rangle \tag{2.69}$$

où $<\quad>$ indique une opération de moyenne d'ensemble, équivalente dans le cas du système stationnaire considéré ici à une moyenne temporelle. Nous supposons de plus que $< \delta\mathbf{v} >=< \delta\mathbf{E} >= 0$. En notant $\delta F_E = \frac{\epsilon_0}{2} < \delta\mathbf{E}^2 >$ l'erreur sur l'énergie du champ électrique, on en déduit l'expression du taux de chauffage théorique $< r >_{th}$ défini comme la variation relative (par rapport à l'énergie initiale $K_{E,0}$) de l'énergie cinétique par pas de temps

$$< r >_{th} = \frac{\Delta K_E}{K_{E,0}} = \omega_p^2\Delta t\frac{\delta F_E}{K_{E,0}}. \tag{2.70}$$

Dans l'hypothèse où les erreurs sur le champ sont de nature stochastique, l'énergie cinétique croît donc linéairement en temps, comme observé dans les simulations. Par ailleurs, cette formule prévoit un taux de chauffage proportionnel à l'erreur δF_E commise sur l'énergie du champ électrique, c'est-à-dire la variation entre spectre simulé et spectre théorique d'un plasma discrétisé conservatif en énergie. Hockney et Eastwood [54] montrent que cette erreur résulte essentiellement de la composante non-potentielle (*i.e*, non invariante par translation) de la force interparticulaire. Dans ce qui suit, nous allons jauger la validité de la formule (2.70) en la confrontant aux mesures du taux de chauffage simulé $< r >$.

Pour cela, nous avons besoin d'une expression analytique du "vrai" spectre. Il se trouve que dans le cas d'un plasma numérique conservatif en énergie, qui nous sert de référence, cette expression existe. Celle-ci procède, comme montré par Langdon [56], de l'application (valable uniquement dans le cas conservatif en énergie) du théorème fluctuation-dissipation

$$W(k,\omega) = \frac{T}{\omega}\Im\left[\frac{1}{\epsilon(k,\omega)}\right] \tag{2.71}$$

où $T = mv_t^2$ désigne la température, $\Im$ la partie imaginaire, et ϵ la relation de dispersion du plasma discrétisé Eq. (2.42) (en utilisant les expressions de K_1 et K_2 fournies dans 2.2.4). Après intégration par la méthode des résidus [56], on obtient

$$W(k) = \frac{T}{2}\left[1 - \frac{1}{\epsilon(k,0)}\right], \tag{2.72}$$

d'où le spectre d'un plasma maxwellien conservatif en énergie

$$W(k) = \frac{T}{2}\left[\frac{1}{1+(k\lambda_D)^2 M(k)}\right], \tag{2.73}$$

avec

$$M(k) = \left[\frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2}\right]^2 \Bigg/ \sum_p S_n^2(k_p)\ . \tag{2.74}$$

Notons que le spectre d'un plasma maxwellien continu s'écrit

$$W(k) = \frac{T}{2}\left[\frac{1}{1+(k\lambda_D)^2}\right]. \tag{2.75}$$

La formule (2.70) se met ainsi finalement sous la forme

$$< r >_{th} = \omega_p^2 \Delta t \sum_k \left[\frac{\Delta x}{N_x K_{E,0}}\frac{|E_k|^2}{2} - \frac{1}{N_p\left[1+k^2\lambda_D^2 M(k)\right]}\right], \tag{2.76}$$

où N_x et N_p désignent respectivement le nombre de mailles et de particules, et E_k est la transformée de Fourier discrète du champ électrique simulé. Cette formule

diffère sensiblement de celle d'Ueda *et al.* qui ont considéré comme spectre de référence celui d'un plasma maxwellien *continu* d'énergie électrique totale F_E, et ont récrit le taux de chauffage comme

$$< r >= \omega_p^2 \Delta t \frac{F_E}{K_E} \frac{\delta F_E}{F_E},$$

pour ensuite exploiter l'expression analytique

$$\frac{F_E}{K_E} = (2n\lambda_D)^{-1} = \frac{1}{2}\frac{N_x}{N_p}\frac{\Delta x}{\lambda_D}.$$

Cette approche nous paraît criticable en ce que la comparaison avec le spectre d'un plasma continu donne lieu, pour des valeurs $\Delta x/\lambda_D \sim 1$, à une variation $\delta F_E < 0$ incompatible avec le chauffage observé. Cet effet est renforcé pour un facteur de forme d'ordre supérieur à un de par l'atténuation des modes à grand k qu'il entraîne.

Les spectres simulé et théorique de l'énergie électrique normalisée sont comparés sur les Figs. 2.20 et 2.21 pour deux types de facteur de forme et un nombre variable de particules par maille. Ils mettent clairement en évidence une dépendance en $1/N_p$. Aussi bien à l'ordre un qu'à l'ordre deux, les spectres issus des simulations avec $\Delta x/\lambda_D = 1$ surestiment très légèrement (aux grands k) le spectre (2.73). Comme évoqué précédemment le spectre du plasma continu (2.75) surestime la mesure et ne peut donc servir à quantifier l'erreur sur les fluctuations responsables du chauffage. L'écart entre spectres analytiques (supposant un plasma infini) et spectre simulé aux petits k résulte de la limite de résolution imposée par la taille finie de la boîte de simulation. Lorsqu'on fait croître $\Delta x/\lambda_D > 1$, l'écart entre spectres simulé et théorique conservatif se creuse pour $|k\Delta x| \gtrsim 1$ comme l'attestent les Figs. 2.21.

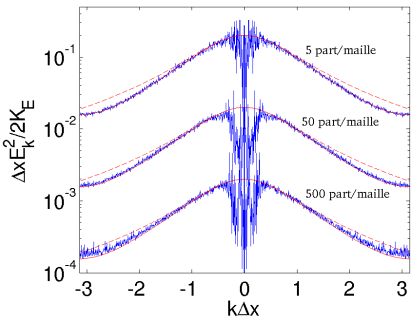
Pour quantifier $< r >_{th}$, nous avons mesuré $\delta F_E/K_{E,0}$ aux ordres 1 et 2, pour $1 \leq \Delta x/\lambda_D \leq 10$ et pour un nombre variable de particules par maille (allant de 5 à 500). Les résultats obtenus, qui confrontent les taux de chauffage $< r >$ et $< r >_{th}$, sont regroupés dans les Figs. 2.22(a-c). Les deux mesures sont en bon accord quantitatif à l'ordre un où la somme (2.76) est calculée pour $|k\Delta x| > 1$ [Fig. 2.22(a)]. En effectuant un *fit* en fonction des paramètres N_p/N_x et $\Delta x/\lambda_D$, on obtient les taux de chauffage suivant :

$$\frac{< r >}{\omega_p} \sim 3.3 \times 10^{-4} \left(\frac{\Delta x}{\lambda_D}\right)^{2.6} \left(\frac{N_p}{N_x}\right)^{-1}, \tag{2.77}$$

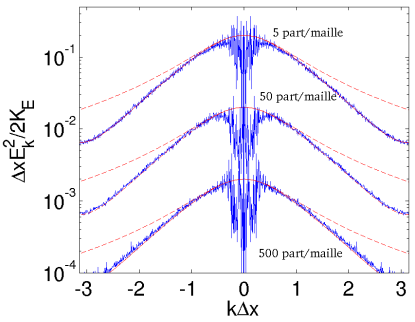
et

$$\frac{< r >_{th}}{\omega_p} \sim 2.5 \times 10^{-4} \left(\frac{\Delta x}{\lambda_D}\right)^{2.6} \left(\frac{N_p}{N_x}\right)^{-1}. \tag{2.78}$$

L'accord entre ces deux mesures est bon, ce qui permet de relier les fluctuations du champ électrique au taux de chauffage numérique dans le régime linéaire. Nos

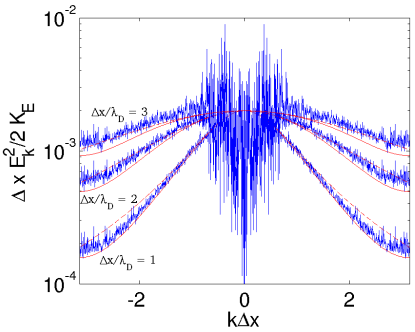


(a) Interpolation linéaire

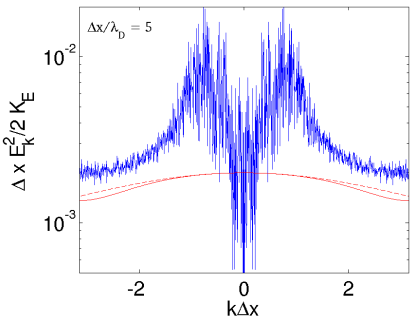


(b) Interpolation quadratique

FIGURE 2.20 – Densité spectrale du champ électrique normalisée par l'énergie cinétique initiale pour diverses valeurs du nombre de macro-particules par maille et $\Delta x/\lambda_D = 1$. Spectre théorique du plasma continu (pointillé rouge), spectre théorique du plasma discrétisé conservatif en énergie (trait plein rouge) et spectre obtenu à partir des simulations (bleu).



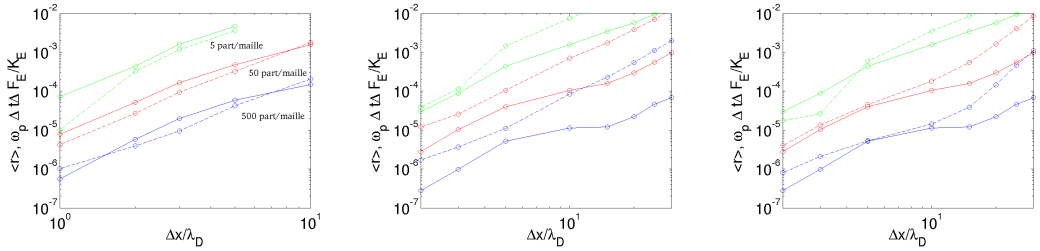
(a) $\Delta x/\lambda_D = 1, 2$ et 3



(b) $\Delta x/\lambda_D = 5$

FIGURE 2.21 – Densité spectrale du champ électrique normalisée par l'énergie cinétique initiale pour diverses valeurs de $\Delta x/\lambda_D$, 500 macro-particules par maille et une interpolation linéaire. Spectre théorique du plasma continu (pointillé rouge), spectre théorique du plasma discrétisé conservatif en énergie (trait plein rouge) et spectre obtenu à partir des simulations (bleu).

estimations de $< r >$ diffèrent aussi bien de celles de Hockney que de Ueda, le premier proposant une dépendance en $(\Delta x/\lambda_D)^2$ et le second en $(\Delta x/\lambda_D)^3$, alors que nous obtenons $(\Delta x/\lambda_D)^{2.6}$.



(a) $\frac{\delta F_E}{K_E}(|k\Delta x| > 1)$, ordre 1 (b) $\frac{\delta F_E}{K_E}(|k\Delta x| > 1)$, ordre 2 (c) $\frac{\delta F_E}{K_E}(|k\Delta x| > 2)$, ordre 2

FIGURE 2.22 – Taux de chauffage calculé à partir de l'énergie cinétique (trait plein), et à partir de l'écart entre spectres simulé et théorique discrétisé (pointillés).

La comparaison est moins probante à l'ordre deux, comme le montrent les Figs. 2.22(b)-2.22(c) associées respectivement à une somme sur $|k\Delta x| > 1$ et $|k\Delta x| > 2$. Cette deuxième mesure semble mieux adaptée pour l'ordre deux [Fig. 2.20(b)]. De même, les résultats obtenus à l'ordre deux peuvent être synthétisés par les *fits* suivant $(|k\Delta x| > 2)$:

$$\frac{< r >}{\omega_p} \sim 3 \times 10^{-5} \left(\frac{\Delta x}{\lambda_D}\right)^{2.4} \left(\frac{N_p}{N_x}\right)^{-1}, \tag{2.79}$$

et

$$\frac{< r >_{th}}{\omega_p} \sim 3.5 \times 10^{-5} \left(\frac{\Delta x}{\lambda_D}\right)^{2.7} \left(\frac{N_p}{N_x}\right)^{-1} \tag{2.80}$$

Avec une fonction d'interpolation quadratique l'accord devient plus qualitatif concernant la dépendance en fonction de $\Delta x/\lambda_D$. Les taux de chauffage $< r >$ et $< r >_{th}$ présentent néanmoins les mêmes tendances pour $\Delta x/\lambda_D < 10$ comme révélé par Fig. 2.22(c).

Les *fits* de $\Delta x/\lambda_D$ sont peu affectés par l'ordre de la fonction de forme. En outre, on retrouve un facteur dix au niveau de la constante intervenant dans ces *fits* entre ordres un et deux, ce qui est cohérent avec les résultats de Sec. 2.5. En définitive, le modèle semi-analytique de Ueda *et al.* corrigé par la mesure (2.76), qui fait intervenir spectres simulé et analytique discrétisé conservatif en énergie, permet de relier avec un bon accord le taux chauffage mesuré par l'énergie cinétique $< r >$ à celui issu des fluctuations du champ électrique $< r >_{th}$.

2.7 Atténuation du chauffage numérique par les collisions

Dans cette section, nous mettons en évidence le rôle stabilisateur des collisions physiques sur le chauffage numérique.

Le modèle Monte-Carlo de collisions binaires proposé par Nanbu [57, 58] a été introduit dans le code Calder. Ce modèle, qui perfectionne un algorithme originellement dû à Takizuka & Abe [59], suppose que le couple de particules chargées (α, β) considéré comme interagissant au sein d'une même maille ait subi un grand nombre de collisions physiques élémentaires pendant l'intervalle de temps Δt. La fonction de distribution de l'angle de déflection cumulé χ pendant Δt est donnée par :

$$f(\chi) = \frac{A}{4\pi \sinh A} \exp(A \cos \chi), \tag{2.81}$$

où le paramètre A est solution de l'équation non-linéaire

$$\coth(A) - 1/A = \exp\left(-s_{\alpha\beta}\Delta t\right). \tag{2.82}$$

Dans le cas d'un nombre moyen de N collisions élémentaires pendant Δt, le paramètre $s_{\alpha\beta}$ intervenant dans (2.82) est défini par :

$$s_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} N < \theta^2 > . \tag{2.83}$$

Le paramètre $\theta \ll 1$ représente la variance angulaire associée à une collision élémentaire entre deux particules α et β. Cette dernière est définie par :

$$< \theta^2 >= \frac{1}{\sigma_{tot}} \int \theta^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \tag{2.84}$$

où $\sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$. Dans Calder la section efficace de collision élémentaire $d\sigma/d\Omega$ associée à l'angle solide $d\Omega = 2\pi \sin\chi d\chi$ est calculée avec la formule relativiste due à Frankel [60]. On peut montrer [61] que

$$N = \min(n_\alpha, n_\beta) \Delta t \sigma_{tot} |v^*_{rel}| \frac{\gamma^*_\alpha \gamma^*_\beta}{\gamma_\alpha \gamma_\beta}.$$

où nous notons les masses m_α, m_β, les facteurs de Lorentz $\gamma_\alpha, \gamma_\beta$ et les impulsions p_α, p_β. n_α, n_β désignent les densités de l'espèce associée à la particule α ou β. La notation $*$ indique une grandeur calculée dans le référentiel du centre de masse se déplaçant à la vitesse

$$v_{CM} = \frac{\frac{m_\alpha}{m_\beta} p_\alpha + p_\beta}{\frac{m_\alpha}{m_\beta} \gamma_\alpha + \gamma_\beta}. \tag{2.85}$$

v^*_{rel} désigne ainsi la vitesse relative entre les particules α et β dans le centre de masse. Le travail effectué sur ce module de collisions est présenté en détail dans la thèse de F. Perez [61].

Dans la limite classique, la fréquence de collision (*i.e* de transfert d'impulsion) électron-ion s'écrit [62] :

$$\frac{\nu_{ei}}{\omega_p} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\omega_p}{c}\right) r_e \left(\frac{c}{v_t}\right)^3 Z \ln\Lambda, \tag{2.86}$$

où $r_e = \frac{e^2}{m_e c^2}$ désigne le rayon classique de l'électron. On s'attend à une inhibition de l'instabilité d'*aliasing* quand la fréquence de collision ν_{ei} devient de l'ordre du taux de croissance $\Gamma_{max}(T)$ prédit par la théorie linéaire de Sec. 2.2.

Afin d'apprécier la validité de cette prédiction dans le cas d'une simulation $1Dx3Dv$, le caractère électrostatique du chauffage numérique nous invite à mesurer l'évolution du rapport T_x/T_0 (où $T_x = \int m v_x^2 f(v) dv$), plutôt que celle de l'énergie cinétique totale du plasma. Pour le vérifier, on considère un plasma d'Aluminium ($A = 27$) de densité électronique 100 n_c et d'ionisation (Z) variable. Les discrétisations en espace et en temps valent respectivement $\omega_0 \Delta x/c = 0.1$ et $\omega_0 \Delta t = 0.02$. La boîte numérique comporte 1000 mailles avec 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique. La température initiale est prise égale à 100 eV ($\Delta x/\lambda_D \approx 71$) pour les électrons et les ions.

L'évolution temporelle du rapport T_x/T_0 aux ordres un et deux est représentée respectivement sur les Figs. 2.23(a)-2.23(b). En l'absence de collisions et à l'ordre un le régime exponentiel se déclenche rapidement et dure jusqu'à ce que $T_x/T_0 \sim 60$, soit $\Delta x/\lambda_D \sim 10$, en bon accord avec les résultats de la Sec. 2.6. En présence de collisions et pour un degré d'ionisation $Z = 1$, la collisionnalité du plasma est initialement assez élevée pour inhiber l'instabilité d'*aliasing* puisque

$$\frac{\nu_{ei}}{\omega_p} \sim 0.03 > \frac{\Gamma_{max}}{\omega_p} \approx 0.01. \tag{2.87}$$

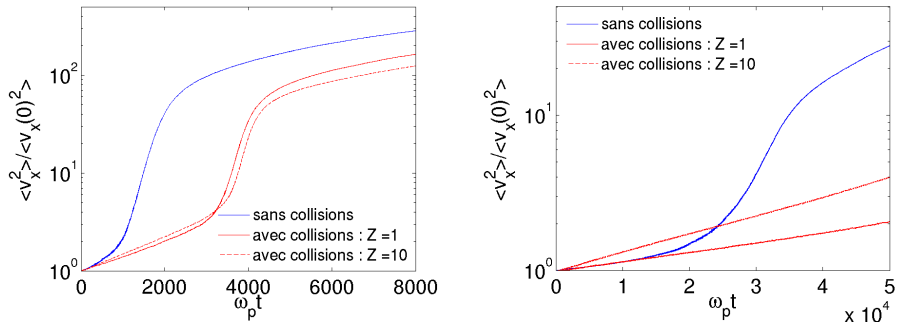
L'auto-chauffage évolue linéairement jusqu'à ce que $T_x/T_0 \sim 3$ (*i.e* $\Delta x/\lambda_D \sim 41$). Nous avons alors

$$\frac{\nu_{ei}}{\omega_p} \sim 0.006 < \frac{\Gamma_{max}}{\omega_p} \approx 0.017. \tag{2.88}$$

Succède à ce régime une croissance exponentielle jusqu'à ce que $T_x/T_0 \sim 60$ comme dans le cas sans collisions. Par la suite la température évolue linéairement avec une pente égale à celle observée sans collisions. Avec un degré d'ionisation $Z = 10$, le régime exponentiel se déclenche à partir de $T_x/T_0 \sim 6$ (*i.e* $\Delta x/\lambda_D \sim 29$). On a alors

$$\frac{\nu_{ei}}{\omega_p} \sim 0.02 \sim \frac{\Gamma_{max}}{\omega_p}, \tag{2.89}$$

d'où une instabilité d'*aliasing* en mesure de se déclencher. Sa saturation se produit pour la même température que dans le cas sans collisions, la pente finale du chauffage étant inchangée.



(a) Interpolation linéaire (b) Interpolation quadratique

FIGURE 2.23 – Evolution de la température longitudinale normalisée $T_x/T_x(0)$ avec prise en compte ou non des collisions pour les facteurs de forme d'ordre un 2.23(a) et deux 2.23(b). La densité du plasma vaut $n_e = 100n_c$ et $T(0) = 100\text{eV}$ ($\Delta x/\lambda_D = 71$).

2.8 Applications en physique de l'interaction laser-plasma surcritique

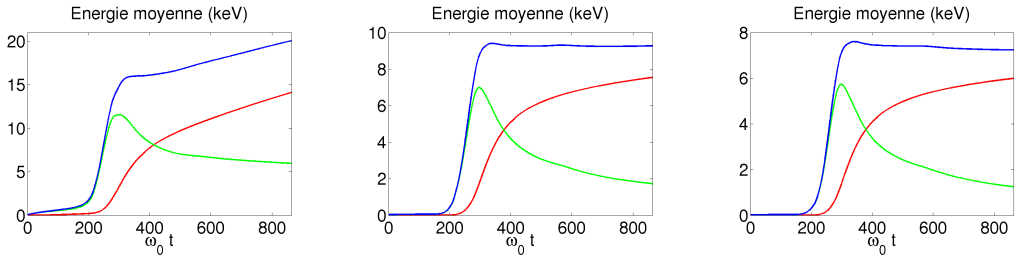
2.8.1 Accélération de protons par laser

Parmi les divers phénomènes caractéristiques de l'interaction laser-plasma relativiste, l'accélération de faisceaux d'ions fait l'objet de nombreux travaux de par ses multiples applications allant de la radiographie par protons [12], au chauffage isochore [13] et à la proton thérapie [14]. Nous montrerons, dans ce contexte, les améliorations apportées par la montée en ordre de la fonction de forme.

Considérons pour cela un plasma maxwellien composé d'une espèce électronique et d'une espèce ionique initialisées respectivement à $T_e = T_i = 1$ eV et $n_e = n_i = 150n_c$. La cible mesure 375 nm d'épaisseur et occupe 60×2048 mailles, avec une discrétisation spatiale $\Delta x/\lambda_D \approx 340$, $\Delta y/\lambda_D \approx 690$ et temporelle $\omega_0 \Delta t = 0.027$. La face avant de la cible, de gradient raide, est irradiée pendant 38 fs par un laser d'amplitude normalisée $a_0 \approx 2.2$. Entre 20 et 100 particules par mailles sont utilisées.

L'évolution temporelle des énergies cinétiques du système est tracée sur les Figs. 2.24(a)-2.24(c) pour trois types de facteur de forme. A l'ordre un, les élec-

trons chauffent avant même l'arrivée du laser. Ce chauffage prématuré est jugulé aux ordres 2 et 3. De la même façon, l'interaction laser-plasma conduit à un pic d'énergie électronique décroissant avec l'ordre. Outre l'auto-chauffage se produisant pendant l'irradiation laser, une faible détente du plasma avant l'arrivée du laser - modifiant la longueur de gradient au voisinage de la région d'absorption - peut contribuer à ces variations. L'accélération des protons démarre un peu avant le pic de chauffage électronique. Cette accélération procède du champ de séparation de charge induit lors du débouché des électrons rapides dans le vide. Il est qualifié de TNSA acronyme anglais de "Target Normal Sheath Acceleration" [63]. Comme pour les électrons, la croissance de l'énergie ionique est amplifiée à l'ordre un. Dans ce cas, après l'extinction du laser, l'énergie cinétique totale [Fig. 2.24(a)] n'en finit pas d'augmenter, preuve manifeste d'un important auto-chauffage numérique. A l'inverse, aux ordres supérieures à un [Fig. 2.24(b)] celle-ci reste constante, voire décroît lentement à l'ordre trois [Fig. 2.24(c)] du fait de la thermalisation d'une faible fraction des électrons aux bords de la boîte. Pour quantifier plus avant la précision du calcul, nous représentons sur les Figs. 2.25 l'évolution temporelle du bilan d'énergie (dont la détermination est expliquée en annexe D) avec 100 particules par maille, et le Tab. 2.7 récapitule les différents bilans finaux.

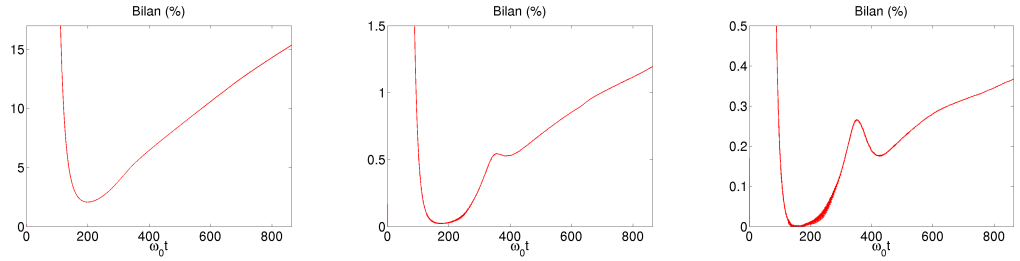


(a) Ordre 1 (b) Ordre 2 (c) Ordre 3

FIGURE 2.24 – Energies cinétiques moyennes totale par maille (bleu), électronique (verte) et ionique (rouge) obtenues pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique.

particules par maille / ordre	20	100
1	120%	15%
2	15%	1%
3	5%	0.4%

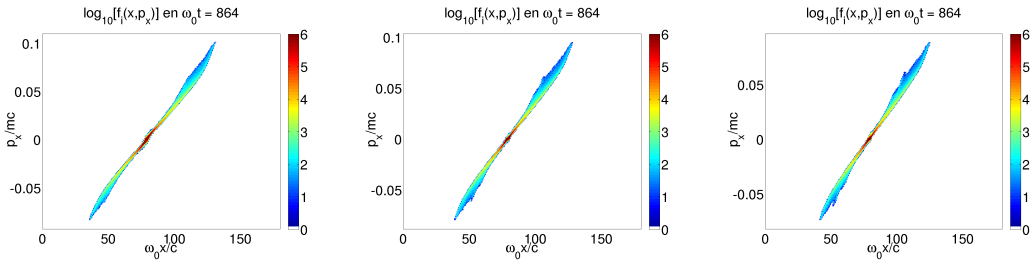
TABLE 2.7 – Ecart à la conservation de l'énergie en fonction de l'ordre et du nombre de macro-particules par maille à la fin de la simulation ($t = 864\omega_0^{-1}$).



(a) Ordre 1 (b) Ordre 2 (c) Ordre 3

FIGURE 2.25 – Bilan d'énergie pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique.

Une vision spatiale de l'accélération ionique est donnée par les espaces des phases (x, p_x) des Figs. 2.26. Du fait de la brièveté de l'impulsion laser et de la finesse de la cible, les ions se détendent de façon quasi-symétrique de part et d'autre de la cible avec une vitesse proportionnelle à leur position. Conformément aux mesures globales des Figs. 2.26, leur énergie maximale, fonction croissante de l'énergie électronique, diminue avec la montée en ordre. Elle vaut respectivement 4.7, 4.3 et 3.7 MeV aux ordres un, deux et trois, suivant en cela qualitativement la tendance donnée par Fig. 2.24. La montée en ordre se révèle donc cruciale pour une description précise du chauffage électronique et, partant, de l'accélération ionique.



(a) Ordre 1 (b) Ordre 2 (c) Ordre 3

FIGURE 2.26 – Espace des phases ionique à la fin de la simulation pour divers facteurs de forme et 100 macro-particules par maille et par espèce cinétique.

2.8.2 Génération d'électrons rapides pour le chauffage isochore

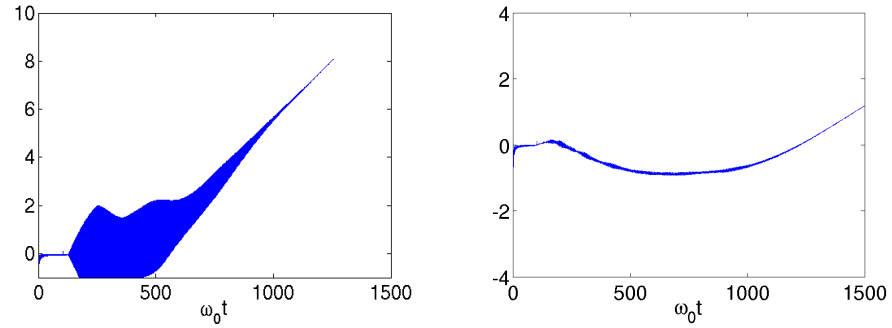
Autre débouché important de l'interaction laser-plasma relativiste, le chauffage isochore de cibles solides pourrait servir à valider des modèles de physique

atomique dans des conditions physiques jusque-là inaccessibles. Une simulation complète (de la génération des électrons rapides à leur ralentissement dans la cible) de ce problème impose, pour être quantitativement confrontée aux expériences, une géométrie $3D$ hors de portée des calculateurs modernes. Toutefois, même restreinte à une géométrie $2D$, elle se révèle très contrainte par la prise en compte des effets collisionnels (à l'origine du chauffage) dans un système très dense. Nous présentons ici les calculs réalisés pour interpréter une expérience récente [61], montrant l'intérêt des impulsions laser à fort contraste (obtenues par doublage en fréquence) pour le chauffage de petites cibles (de diamètre $\sim 50\mu$m et d'épaisseur $\sim 10\mu$m). La cible simulée consiste en un plasma de Cu^{15+} de densité maximale 400 n_c et de dimension $8 \times 50\mu\text{m}^2$. Dans le cas d'une impulsion laser non doublée en fréquence ($\lambda_0 = 1.06\mu$m), le profil de densité initial de la cible est modifié par un préplasma (produit par le piédestal à bas flux du laser) calculé avec le code hydrodynamique DUED [64].

Les discrétisations en espace et en temps sont données par $\Delta x = \Delta y = 0.05c/\omega_0$ et $\omega_0 \Delta t = 0.03$. Le maillage est constitué de 6500×8000 mailles, avec 100 particules par maille et par espèce cinétique. Les collisions (électron-électron) et e-i sont modélisées à l'aide de la méthode Monte-Carlo de Nanbu [58]. Le laser de longueur d'onde 1μm (déterminant la pulsation de référence ω_0) a une intensité maximale $I_{max} = 1.6 \times 10^{19}\text{W/cm}^2$, sa durée correspondant à la largeur à mi-hauteur de l'enveloppe vaut $\tau_L = 350\text{fs} = 620\omega_0^{-1}$, et le diamètre de la tâche focale vaut $D_L = 12\mu\text{m} = 70c/\omega_0$. Dans le cas du laser doublé en fréquence nous prenons $I_{max} = 2.3 \times 10^{19}\text{W/cm}^2$, $\tau_L = 250$fs et $D_L = 8\mu$m, soit une énergie incidente réduite de moitié conformément à l'expérience. Un court préplasma exponentiel de longueur caractéristique 0.1μm, est ajouté devant la cible pour tenir compte de la réduction importante (mais sans doute incomplète) du piédestal laser.

Le bilan d'énergie est donné par Fig. 2.27, on constate que l'énergie totale est conservée à 1% près ce qui est essentiel pour décrire convenablement le chauffage collisionnel de la cible par les électrons rapides. Notons que dans ce cas la conservation de l'énergie tire profit aussi bien du facteur de forme d'ordre trois que des collisions conformément aux résultats de Sec. 2.7.

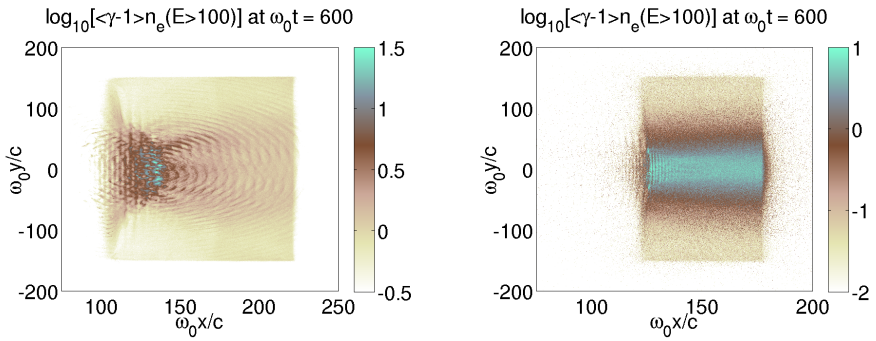
Les Figs. 2.28 représentent les densités d'énergie $\frac{n_e}{n_c} < \gamma - 1 >$ des électrons d'énergie supérieure à 100 keV. Le caractère modulé de leur génération (à la longueur d'onde laser) apparaît clairement dans le cas à $1\omega_0$ [65, 66, 67]. Si le taux de conversion de l'énergie laser en énergie cinétique est bien plus élevé à $1\omega_0$ (80%) qu'à $2\omega_0$ (30%), il correspond aussi à une divergence accrue des électrons rapides. Cet effet, couplé au déplacement de la région d'émission électronique (*i.e* la surface critique) par rapport à la position initiale de la cible, conduit à une plus grande dilution des électrons dans la région dense. S'ensuit un moindre chauffage comme l'illustrent les Figs. 2.29, qui représentent l'énergie moyenne ($\sim 3T_e/2$) des électrons thermiques (d'énergie inférieure à 10 keV). D'autres facteurs concourent dans une moindre mesure à cette dégradation du chauffage : l'augmentation de



(a) $1\omega_0$ (b) $2\omega_0$

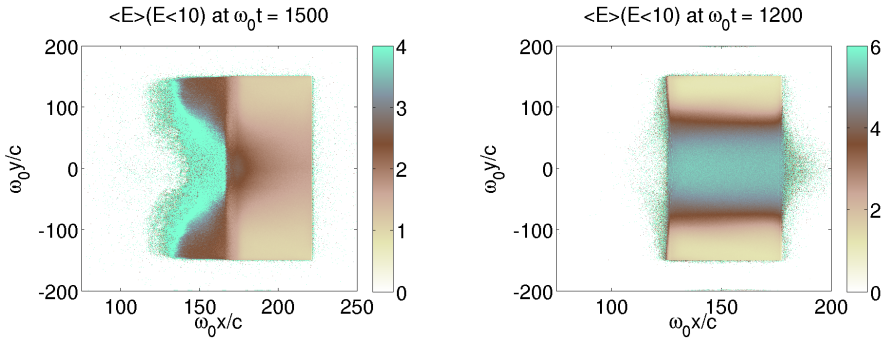
FIGURE 2.27 – Evolution de l'écart à la conservation de l'énergie en pourcents : irradiations à $1\omega_0$ et $2\omega_0$.

l'énergie moyenne des électrons rapides ($\sim$ 1.5 MeV à $1\omega_0$ contre $\sim$ 0.4 MeV à $2\omega_0$) qui diminue légèrement le pouvoir d'arrêt, et un mécanisme de piégeage survenant dans la région fortement magnétisée du préplasma [61]. Quoique limitées à une géométrie $2D$ et une durée inférieure au temps de ralentissement total des électrons dans la matière ($\sim$10 ps), ces simulations reproduisent qualitativement les principales observations expérimentales.



(a) $1\omega_0$, grand pré-plasma (b) $2\omega_0$, petit pré-plasma

FIGURE 2.28 – Densité d'énergie cinétique (normalisée par $m_e c^2 n_c$) des électrons rapides (*i.e* d'énergie supérieure à 100 keV) au moment de l'extinction du laser.



(a) $1\omega_0$, grand pré-plasma (b) $2\omega_0$, petit pré-plasma

FIGURE 2.29 – Energie moyenne en keV des électrons thermiques (*i.e* d'énergie inférieure à 10 keV) environ 0.6 ps après extinction du laser.

2.9 Conclusions

Les premières sections de ce chapitre, dédiées à l'analyse de la relation de dispersion du plasma numérique électrostatique, ont permis d'identifier les différences apportées par la discrétisation spatio-temporelle par rapport au plasma physique continu. La discrétisation spatiale est responsable de l'instabilité d'*aliasing*, susceptible de se manifester pour $\Delta x/\lambda_D \gg 1$ et $k\Delta x \gtrsim 2$, tandis que l'analyse purement temporelle fait apparaître un seuil de stabilité $\omega_p \Delta t \leq 1.62$. L'analyse de la relation de dispersion incluant les effets des discrétisations en espace et en temps prévoit un plasma stable tant que $\omega_p \Delta t \leq 2$ pour $\Delta x/\lambda_D \gtrsim 3$. Dans les scénarios intéressant l'interaction laser-plasma à densité élevée, nous sommes confrontés à des rapports $\Delta x/\lambda_D \sim 50 - 100$, et nous nous limitons en pratique à $\omega_p \Delta t \lesssim 0.5$. Dans ce régime les résultats, issus de la relation de dispersion complète, montrent clairement la domination de l'effet dû à la discrétisation en espace. Dans ces conditions, l'instabilité d'*aliasing* peut entraîner la croissance exponentielle des fluctuations électrostatiques. Cette instabilité peut toutefois être grandement réduite par l'emploi de facteurs de forme d'ordre élevé.

Il n'est pas évident théoriquement de relier la croissance de ces fluctuations à celle de l'énergie cinétique. Pour estimer l'ampleur du phénomène de chauffage numérique nous avons mené, en première approche, une étude paramètrique $1D$, $2D$ et $3D$ du chauffage numérique d'un plasma maxwellien en mesurant la variation relative de l'énergie totale. Nous avons ainsi montré que le chauffage est inversement proportionnel au nombre de macro-particules par maille et, que la montée en ordre permet de réduire le chauffage d'environ un ordre de grandeur par rapport à l'ordre directement inférieur.

Le chauffage numérique peut se manifester par une croissance linéaire ou exponentielle de l'énergie cinétique. Ce dernier régime, associé à une forte instabilité

d'*aliasing*, ne se manifeste clairement que pour un faible niveau de fluctuations, et donc un grand nombre de particules par maille. Le cas échéant, il se produit jusqu'à une température du plasma associée à une réduction substantielle du taux de croissance de l'instabilité. Lui succède un régime de chauffage linéaire (ou stochastique), correspondant à des valeurs modérées (fonctions de l'ordre et du nombre de particules par maille) du rapport $\Delta x/\lambda_D$.

En nous appuyant sur le modèle de Hockney et de Ueda *et al*, nous avons proposé une façon simple de quantifier ce taux de chauffage, fondée sur l'écart entre le spectre du champ électrique simulé et celui, analytique, d'un plasma discrétisé conservatif en énergie. Un bon accord est obtenu avec les mesures d'auto-chauffage pour les fonctions d'interpolation linéaire et quadratique. Nous montrons également que l'influence bénéfique de la montée en ordre sur la conservation de l'énergie est renforcée par l'inclusion des collisions coulombiennes.

Fortes de ces développements numériques, les études menées dans notre groupe sur l'interaction laser-plasma surcritique ont pu atteindre des régimes longtemps inaccessibles aux simulations PIC du fait de leur grande sensibilité au chauffage numérique. Outre les deux exemples illustrés en Sec. 2.8, il a été possible de simuler la génération et le transport des électrons rapides dans des cibles coniques afin d'interpréter des résultats expérimentaux récents [65]. De même, plusieurs travaux portant sur l'accélération de protons par laser, et plus précisément sur l'influence de la longueur de gradient en face avant comme en face arrière de la cible, ont bénéficié de l'introduction de facteurs de forme d'ordre supérieur à un [68, 69].

En outre, le domaine de l'accélération d'électrons par sillage laser dans des plasmas fortement sous-denses tire également profit de la montée en ordre du facteur de forme [5]. En effet, même faible, le chauffage numérique associé aux fluctuations du champ électrique, lorsqu'une fonction d'interpolation linéaire est utilisée, suffit pour qu'une fraction de la population électronique se retrouve artificiellement piégée dans l'onde de sillage [70].

Deuxième partie

Développement d'un code implicite relativiste

Chapitre 3

Approximations physiques et schémas numériques en simulation PIC

On pouvait croire que cette tête désespérée n'avait jailli que pour jeter un dernier regard sur les objets environnants et faire mentalement ses adieux à tous les plaisirs de ce monde. Mais cette tête n'eut pas le temps de mettre son intention en pratique : le crocodile concentra toutes ses forces, avala et, en une seconde, la tête disparut, et, cette fois, à tout jamais.[...] - Maintenant, il est kaputt, notre Ivan Matvéïtch !

Dostoïevski, Le Crocodile

Les codes PIC sont devenus des moyens de simulation incontournables pour décrire le comportement cinétique d'un plasma. Cependant, comme nous l'avons vu au Chap. 1, l'algorithme PIC standard utilise un schéma de différences finies explicite en temps, et par conséquent doit vérifier des contraintes de stabilité sur le pas de temps, l'obligeant à résoudre les modes haute-fréquence (électrostatiques comme électromagnétiques) du système [21]. De plus, la taille d'une maille doit être de l'ordre de la longueur de Debye afin d'éviter l'instabilité due à l'aliasing [21]. La simulation de systèmes physiques caractérisés par des densités élevées et/ou de grandes dimensions ne peut se faire ainsi qu'au moyen de codes massivement parallèles [71]. Au cours des dernières décennies de nom-

breuses variantes ont été développées pour relâcher les contraintes pesant sur la discrétisation spatiale et temporelle, afin que celle-ci soit guidée davantage par des considérations physiques plutôt que des conditions de stabilité numérique. On peut distinguer deux approches, selon que l'on touche au modèle physique lui-même ou à la méthode de résolution. Nous allons dans ce qui suit détailler plus avant ces deux approches. La première approche consiste à supprimer les sources haute-fréquence du modèle mathématique lui-même. Les codes fondés sur l'approximation de Darwin [72, 73, 74, 75], les équations gyro-cinétiques [76] ou les modèles hybrides fluide-particules [77, 24, 23, 25, 27] s'appuient précisément sur cette hypothèse. Dans le contexte de l'allumage rapide, nous nous contenterons de présenter la modélisation hybride fluide-particules et dirons quelques mots sur l'approximation de Darwin des équations de Maxwell, fréquemment utilisée dans les études axées sur le transport électronique et négligeant la modélisation de l'interaction laser-plasma.

3.1 Modèle hybride fluide-particule

Dans le schéma d'allumage rapide d'une cible fusible un faisceau d'électrons relativistes, produit par une impulsion laser ultra-intense, se propage dans un plasma thermique de densité supérieure à celle du faisceau, ce qui autorise une description fluide des électrons et des ions du milieu, tout en conservant un modèle cinétique pour les particules rapides. Celle-ci présente de nombreux avantages. D'une part, les espèces fluides n'étant décrites que par trois grandeurs eulériennes (la densité volumique, la vitesse et la température), le coût mémoire associé à la seule description cinétique des électrons du faisceau est considérablement allégé par rapport à une description complètement particulaire. D'autre part, le modèle fluide permet de s'affranchir des restrictions provenant de l'instabilité d'aliasing susceptibles de contraindre la discrétisation spatiale dans le modèle PIC ($\Delta x \sim 10\lambda_D$). La modélisation des espèces fluides s'appuie dans le cas général sur les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, et de l'énergie [73] :

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \mathbf{v}_e \cdot \nabla n_e = -n_e \nabla \cdot \mathbf{v}_e, \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_e}{\partial t} + \mathbf{v}_e \cdot \nabla \mathbf{v}_e = -\frac{e}{m_e}\left(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}\right) - \frac{1}{m_e n_e}\nabla P_e - \nu_{ei}(\mathbf{v}_e - \mathbf{v}_i), \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial P_e}{\partial t} + \mathbf{v}_e \cdot \nabla P_e = -\Gamma_e P_e \nabla \cdot \mathbf{v}_e, \tag{3.3}$$

où n_e, $\mathbf{v}_e$, P_e, $\mathbf{v}_i$ désignent respectivement la densité, la vitesse, la pression cinétique des électrons thermiques et la vitesse des ions. ν_{ei} et Γ_e désignent la fréquence de collision électron-ion et le rapport de chaleur spécifique pour le fluide

électronique. m_e et e représentent la masse électronique et la charge élémentaire. Dans le contexte de l'allumage rapide où le plasma est dense et fortement collisionnel, les termes magnétiques et de gradient de pression dans (3.2) sont généralement négligeables [27]. Il est également courant de supposer un fluide électronique sans inertie afin de supprimer les oscillations plasma [23, 25, 19, 78].

Examinons à présent l'aspect électromagnétique de ces modèles. Dans le cas d'une résolution complète du système d'équations de Maxwell à l'aide d'un schéma explicite, la résolution des équations fluides autorise un pas d'espace plus grand d'où, une discrétisation temporelle moins fine via la contrainte CFL ($c\Delta t/\Delta x \leq 1$). A la différence de Liljo et al. [27] qui retient une modélisation complètement électromagnétique capable de décrire l'interaction laser-plasma, il est possible de s'en tenir à la limite non-radiative des équations de Maxwell (approximation dite de Darwin [79]) si l'on choisit d'injecter directement les électrons du faisceau dans le plasma sans traiter l'interaction laser-plasma. Cette limite est obtenue en ignorant la partie solénoïdale du courant de déplacement dans l'équation de Maxwell-Ampère qui devient :

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{E}_{//}}{\partial t}, \tag{3.4}$$

où $\nabla \times \mathbf{E}_{//} = 0$. On montre alors [74, 75] qu'il est possible de reformuler les lois d'Ampère et de Faraday comme un système d'équations elliptiques

$$\nabla^2 \mathbf{B} = -\nabla \times \mathbf{J}, \tag{3.5}$$

$$\nabla^2 \mathbf{E}_{\perp} = \frac{\partial \mathbf{J}_{\perp}}{\partial t}, \tag{3.6}$$

$\mathbf{E}_{//}$ et $\mathbf{E}_{\perp}$ désignant respectivement les parties à rotationnel et divergence nuls du champ électrique. Cette formulation des équations de Maxwell ne propage pas les ondes électromagnétiques et n'est donc pas sujette à la contrainte CFL de stabilité numérique. Les ondes plasmas électroniques, quant à elles, ne sont pas affectées.

Un modèle plus simple encore, de nature magnétohydrodynamique, consiste à négliger tout le courant de déplacement $\left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0\right)$ et à représenter les électrons du milieu par un fluide sans inertie [23, 25]. Le fluide électronique à l'équilibre donne alors

$$0 = -e\left(\mathbf{E} + \mathbf{v}_e \times \mathbf{B}\right) - \frac{\nabla P_e}{n_e} - \nu_{ei}\mathbf{v}_e. \tag{3.7}$$

En définissant le courant $\mathbf{j}_e = -en_e\mathbf{v}_e$ on en déduit la loi d'Ohm suivante

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{j}_e}{en_e} \times \mathbf{B} - \frac{\nabla P_e}{en_e} + \frac{\nu_{ei}\mathbf{j}_e}{e^2 n_e} \approx \eta \mathbf{j}_e, \tag{3.8}$$

où $\eta = \frac{\nu_{ei}}{e^2 n_e}$ désigne la résistivité. L'équation d'Ampère simplifiée est réduite à

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{j}_b + \mathbf{j}_e), \tag{3.9}$$

d'où $\mathbf{j}_e = \frac{\nabla\times\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{j}_b$.

En substituant cette expression du courant de retour dans (3.8), l'équation de Maxwell-Faraday peut s'écrire

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \frac{1}{\mu_0}\nabla \times (\eta \nabla \times \mathbf{B}) - \nabla \times (\eta \mathbf{j}_b) = 0, \tag{3.10}$$

qui correspond à une équation de diffusion du champ magnétique.

Toutefois le domaine de validité physique limité, imposé par les hypothèses de base de chacun des modèles précédents, ne se prête pas à l'étude de scénari multi-échelle. Pour ce faire une autre catégorie de méthodes, numériquement plus exigeante car fondée sur une formulation implicite des équations du mouvement et de Maxwell (ou Poisson dans la limite électrostatique), permet de ne plus résoudre les modes électromagnétique et plasma haute-fréquence tout en conservant une modélisation physique complète. C'est l'approche que nous allons présenter dans la prochaine section.

3.2 La méthode implicite des moments

La principale caractéristique-et difficulté-d'un schéma PIC complètement implicite est de prédire les densités de charge et de courant futures associées aux particules en fonction du champ électromagnétique futur. Historiquement, deux approches ont été imaginées à cette fin. La première publiée, dite des moments, est due à Denavit, Mason, Brackbill et Forslund. Elle utilise les équations fluides pour prédire les termes sources [80, 81, 82, 83, 84, 85]. Elle a été récemment étendue au régime relativiste [42]. Nous allons établir les équations essentielles de cette méthode pour comprendre ce qui la différencie de la méthode implicite directe qui est l'objet de cette thèse. Dans un premier temps nous rappellerons comment les termes sources de densité de charge et de courant sont linéarisés dans le cadre d'un formalisme relativiste. Enfin, nous établirons l'équation d'onde donnant le champ électrique futur permettant de déplacer les macro-particules.

Linéarisation des termes sources

Le mouvement d'une particule p de l'espèce s dans le champ électromagnétique $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ est régi par

$$\frac{d\mathbf{x}_p}{dt} = \frac{\mathbf{u}_p}{\gamma_p} \tag{3.11}$$

$$\frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \frac{q_s}{m_s}\left(\mathbf{E}_p + \frac{\mathbf{u}_p}{\gamma_p} \times \mathbf{B}_p\right) \tag{3.12}$$

où q_s, m_s, $\mathbf{x}_{sp}$ et $\mathbf{u}_{sp}$ désignent respectivement la charge, la masse, la position et l'impulsion (normalisée par m_s) de la particule. La discrétisation des équations du mouvement est donnée par

$$\mathbf{x}_p^{n+1} = \mathbf{x}_p^n + \bar{\mathbf{v}}_p \Delta t, \tag{3.13}$$

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{u}_p^n + \frac{q_s \Delta t}{m_s} \left[\mathbf{E}_p^{n+\theta}(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) + \bar{\mathbf{v}}_p \times \mathbf{B}_p^n(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) \right] \tag{3.14}$$

où la vitesse moyenne $\bar{\mathbf{v}}_p$ est définie par

$$\bar{\mathbf{v}}_p = \frac{\mathbf{u}_p^{n+1} + \mathbf{u}_p^n}{\gamma_p^{n+1} + \gamma_p^n}, \tag{3.15}$$

avec $\gamma_p^n = (1 + (\mathbf{u}_p^n/c)^2)^{1/2}$. Pour toute grandeur Y on définit : $Y^{n+\theta} = \theta Y^{n+1} + (1-\theta)Y^n$ avec $0 \leq (\theta) \leq 1$. On définit $\beta_s = \frac{q_s \Delta t}{2 m_s}$.

En multipliant scalairement (3.14) par $\bar{\mathbf{v}}_p$ on obtient

$$\Delta \gamma_p = \gamma_p^{n+1} - \gamma_p^n = \frac{2\beta_s}{c^2} \mathbf{E}_p^{n+\theta}(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) \cdot \bar{\mathbf{v}}_p. \tag{3.16}$$

En substituant (3.15) dans (3.14) on obtient

$$(\gamma_p^{n+1} + \gamma_p^n)\bar{\mathbf{v}}_p - 2\mathbf{u}_p^n = 2\beta_s \left[\mathbf{E}_p^{n+\theta}(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) + \bar{\mathbf{v}}_p \times \mathbf{B}_p^n(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) \right]. \tag{3.17}$$

En utilisant (3.16) pour obtenir une estimation de γ_p^{n+1}, il vient

$$\left(\frac{2\beta_s}{c^2} \mathbf{E}_p^n(\mathbf{x}_p^n) \cdot \mathbf{v}_p^n + 2\gamma_p^n \right) \bar{\mathbf{v}}_p - 2\mathbf{u}_p^n = 2\beta_s \left[\mathbf{E}_p^{n+\theta}(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) + \bar{\mathbf{v}}_p \times \mathbf{B}_p^n(\mathbf{x}_p^{n+1/2}) \right]. \tag{3.18}$$

Avant de poursuivre définissons les quantités suivantes

$$\Gamma_p = \frac{\beta_s}{c^2} \mathbf{E}_p^n \cdot \mathbf{v}_p^n + \gamma_p^n \tag{3.19}$$

$$D_p^n = \Gamma_p \left[1 + (\beta_s \mathbf{B}^n / \Gamma_p)^2 \right], \tag{3.20}$$

$$\alpha_p^n = \frac{1}{D_p^n} \left(\mathbf{I} + \frac{\beta_s^2}{\Gamma_p^2} \mathbf{B}^n \otimes \mathbf{B}^n - \frac{\beta_s}{\Gamma_p} \mathbf{B}^n \times \mathbf{I} \right), \tag{3.21}$$

$$\widehat{\mathbf{j}}_s^n = \alpha_s^n \mathbf{j}_s^n, \tag{3.22}$$

$$\widehat{\mathbf{v}}_p = \alpha_p^n (\gamma_p^n \mathbf{v}_p^n), \tag{3.23}$$

$$\widehat{\mathbf{E}}_p^{n+\theta} = \alpha_p^n \mathbf{E}_p^{n+\theta}, \tag{3.24}$$

où nous ne précisons pas l'espèce s des quantités particulaires indicées p. La vitesse $\bar{\mathbf{v}}_p$ peut ainsi s'exprimer sous la forme

$$\bar{\mathbf{v}}_p = \hat{\mathbf{v}}_p + \frac{\beta_s}{\Gamma_p} \widehat{\mathbf{E}}_p^{n+\theta}(\mathbf{x}_p^{n+1/2}). \tag{3.25}$$

A l'inverse du cas classique ($\Gamma_p = 1$), dans le cas relativiste le tenseur de rotation α_p^n, fonction du facteur de Lorentz Γ_p, devient une grandeur particulaire et doit être calculé pour chaque particule.

La discrétisation des équations de Maxwell adimensionnées est donnée par

$$\nabla \times \mathbf{E}^{n+\theta} = -\frac{\mathbf{B}^{n+1} - \mathbf{B}^n}{\Delta t}, \tag{3.26}$$

$$\nabla \times \mathbf{B}^{n+\theta} = \mathbf{j}^{n+1/2} + \frac{\mathbf{E}^{n+1} - \mathbf{E}^n}{\Delta t}, \tag{3.27}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}^n = 0, \tag{3.28}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^{n+\theta} = \rho^{n+\theta} \tag{3.29}$$

Pour mettre à jour les champs électrique et magnétique nous devons linéariser les termes sources, donnés par

$$\rho_s^{n+\theta}(\mathbf{x}) = q_s \sum_p S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+\theta}), \tag{3.30}$$

$$\mathbf{j}_s^{n+1/2}(\mathbf{x}) = q_s \sum_p \mathbf{v}_{sp}^{n+1/2} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+1/2}). \tag{3.31}$$

Un développement limité de (3.30) autour de $\mathbf{x}_{sp}^n$ donne

$$\rho_s^{n+\theta}(\mathbf{x}) \approx q_s \sum_p \left[S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n) - (\mathbf{x}_{sp}^{n+\theta} - \mathbf{x}_{sp}^n) \cdot \nabla S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n) \right]. \tag{3.32}$$

En utilisant Eq. (3.13) et les définitions (3.30)-(3.31) on en déduit

$$\rho_s^{n+\theta}(\mathbf{x}) = \rho_s^n(\mathbf{x}) - \theta \Delta t \nabla \cdot \left(\sum_{p=1}^{N_s} q_s \bar{\mathbf{v}}_p S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n) \right), \tag{3.33}$$

$$\approx \rho_s^n(\mathbf{x}) - \theta \Delta t \nabla \cdot \left(\sum_{p=1}^{N_s} q_s \bar{\mathbf{v}}_p S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+1/2}) \right). \tag{3.34}$$

Un développement de Taylor de Eq. (3.31) autour de $\hat{\mathbf{v}}_p^n$ donne à l'ordre un

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}_s^{n+1/2} &\approx q_s \sum_p \bar{\mathbf{v}} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+1/2}) \\
&= \sum_p \hat{v} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+1/2}) + \sum_p \beta_s \alpha_p \mathbf{E}_p^{n+\theta} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^{n+1/2}) \\
&\approx \sum_p \hat{v} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n) - \frac{\Delta t}{2} \sum_p \hat{\mathbf{v}} \otimes \bar{\mathbf{v}}_p \nabla S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n) \\
&+ \sum_p \beta_s \alpha_p \mathbf{E}_p^{n+\theta} S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{sp}^n).
\end{aligned} \tag{3.35}$$

On introduit ici l'approximation explicite $\bar{\mathbf{v}}_p \approx \hat{\mathbf{v}}_p$. Comme souligné par Brackbill et Forslund [82] cette pression explicite introduit la limite de stabilité $kc_s\Delta t < 2\pi$, où c_s est la vitesse du son. On en déduit l'expression du courant en fonction du champ électrique à déterminer

$$\mathbf{j}_s^{n+1/2}(\mathbf{x}) = \widehat{\mathbf{j}}_s(\mathbf{x}) + \frac{\mu_s^n}{\theta\Delta t}\mathbf{E}^{n+\theta} - \frac{\Delta t}{2}\nabla\cdot\widehat{\Pi}_s(\mathbf{x}), \tag{3.36}$$

où nous avons posé

$$\widehat{\mathbf{j}}_s(\mathbf{x}) = q_s\sum_{p=1}^{N_s}\hat{\mathbf{v}}_p S(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p^n), \tag{3.37}$$

$$\widehat{\mathbf{\Pi}}_s(\mathbf{x}) = q_s\sum_{p=1}^{N_s}\hat{\mathbf{v}}_p\otimes\hat{\mathbf{v}}_p S(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p^n), \tag{3.38}$$

et le tenseur diélectrique μ

$$\mu_s^n = \sum_p \frac{q_s\theta\Delta t^2}{2m_s}\alpha_p^n S(\mathbf{x}-\mathbf{x}_p^n). \tag{3.39}$$

Enfin en linéarisant $\bar{\mathbf{v}}$ dans (3.33) on obtient

$$\rho_s^{n+\theta} = \rho_s^n - \theta\Delta t\nabla\cdot\left[\widehat{\mathbf{j}}_s(\mathbf{x}) - \frac{\mu_s^n}{\theta\Delta t}\cdot\mathbf{E}^{n+\theta} - \frac{\Delta t}{2}\nabla\cdot\widehat{\Pi}_s(\mathbf{x})\right], \tag{3.40}$$

ou de façon équivalente

$$\rho^{n+\theta} = \widehat{\rho}(\mathbf{x}) + \nabla\cdot\left[\mu^n\mathbf{E}^{n+\theta}\right], \tag{3.41}$$

$$\widehat{\rho}(\mathbf{x}) = \rho^n - (\theta\Delta t)\nabla\cdot\left[\widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2}\nabla\cdot\widehat{\Pi}(\mathbf{x})\right]. \tag{3.42}$$

Les Eqs. (3.36) et (3.40) nous fournissent une fermeture directe du système d'équations de Maxwell.

Notons que les développements en série de Taylor de (3.30) et (3.31) imposent un pas de temps maximal tel que $v_t\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$ pour garantir une meilleure précision [42]. Lorsqu'une macro-particule parcourt en un pas de temps une distance plus grande que le support de la fonction d'interpolation S la modification de la densité de charge est sous-estimée par (3.30). Cette limitation tient au fait que l'on développe (3.30) et (3.31) autour des positions des particules au début du pas de temps. Si l'on pouvait prédire la position de la particule à une maille près avant de calculer des termes correctifs de densité de charge et de courant, cette limitation serait supprimée. Il s'agit de la différence essentielle entre la méthode des moments et la méthode implicite directe exposée par la suite.

Détermination de l'équation d'onde

Établissons à présent l'équation d'onde à résoudre. En prenant le rotationnel de (3.26) puis en utilisant (3.27), on en déduit pour un pas de temps $\theta\Delta t$:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^{n+\theta} + \frac{\mathbf{E}^{n+\theta} - \mathbf{E}^{n}}{(\theta\Delta t)^2} + \frac{\mathbf{j}^{n+1/2}}{\theta\Delta t} - \frac{\nabla \times \mathbf{B}^{n}}{\theta\Delta t} = 0. \tag{3.43}$$

En remplaçant le courant futur par sa forme linéarisée (3.36) on en déduit :

$$\begin{aligned}(\theta\Delta t)^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^{n+\theta} + \mathbf{E}^{n+\theta}\left(\mathbf{I} - \mu^{n}(\mathbf{x})\right) \\ = \mathbf{E}^{n} + (\theta\Delta t)\nabla \times \mathbf{B}_{n} - (\theta\Delta t)\left(\widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2}\nabla \cdot \widehat{\Pi}(\mathbf{x})\right)\end{aligned} \tag{3.44}$$

Il est possible d'établir une variante de cette expression, en utilisant l'équation de Maxwell Gauss (3.29) et l'Eq. (3.41), on trouve

$$\begin{aligned}(\theta\Delta t)^2\left[\nabla\left(\mu^{n}\mathbf{E}^{n+\theta}\right) - \nabla^2\mathbf{E}^{n+\theta}\right] + \mathbf{E}^{n+\theta}\left(\mathbf{I} - \mu^{n}(\mathbf{x})\right) = \mathbf{E}^{n} + \theta\Delta t\nabla \times \mathbf{B}^{n} \\ -(\theta\Delta t)\left(\widehat{\mathbf{j}}(\mathbf{x}) - \frac{\Delta t}{2}\nabla \cdot \widehat{\Pi}(\mathbf{x})\right) - (\theta\Delta t)^2\nabla\widehat{\rho}(\mathbf{x}),\end{aligned} \tag{3.45}$$

où le symbole ∇^2 désigne le laplacien. Puis on met à jour le champ magnétique via

$$\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^{n} - \Delta t\nabla \times \mathbf{E}^{n+\theta}. \tag{3.46}$$

Il est également nécessaire d'effectuer à chaque pas de temps une correction électrostatique pour satisfaire $\nabla \cdot \mathbf{E}^{n} = \rho^{n}$. La dernière étape consiste à résoudre (3.13)-(3.14) pour déplacer chaque particule. Noguchi et al. [42] ont proposé des méthodes de type prédicteur-correcteur et Newton-Krylov pour résoudre le système couplé (3.13)-(3.14).

3.3 La méthode implicite directe

Nous nous concentrerons par la suite sur l'approche alternative, dite méthode implicite directe, proposée par Langdon, Cohen, Friedman et Hewett [36, 37, 38, 86]. La plupart des mises en oeuvre de cette méthode s'appuient sur la discrétisation dite D_1 de l'équation de Lorentz, introduite pour la première fois par Friedman et al. [35]. La formulation électromagnétique et relativiste, originellement calculée par Langdon et Hewett [39], a été implémentée, quoique dans une forme simplifiée, dans le code LSP [32, 33, 34, 26, 87]. Nous examinerons la méthode implicite directe dans les cas électrostatique, puis électromagnétique et relativiste, en introduisant un formalisme rigoureux dans la prochaine partie. En guise d'introduction à cette méthode et pour terminer cet état de l'art, nous considérons un schéma PIC résolvant le système d'équations couplé de Lorentz-Poisson par la méthode implicite directe.

La méthode directe électrostatique

Cette méthode s'appuie sur les travaux fondateurs de Cohen et Langdon [36, 37], elle est particulièrement bien adaptée pour étudier les phénomènes cinétiques basse-fréquence. Les modes haute-fréquence sont éliminés grâce à la discrétisation D_1 [35] de l'équation de Lorentz, qui supprime par ailleurs la contrainte de stabilité $\omega_p \Delta t < 2$ liée aux ondes plasma électroniques. Afin de nous familiariser avec les méthodes implicites du prochain chapitre, nous expliquons succintement comment les équations du mouvement sont intégrées et le champ électrostatique déterminé.

La discrétisation D_1 des équations du mouvement, en présence d'un champ magnétique externe, est donnée par

$$\mathbf{V}_{n+1/2} = \mathbf{R}_n \mathbf{V}_{n-1/2} + \frac{q\Delta t}{2m} \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_n\right) \bar{\mathbf{E}}_n, \tag{3.47}$$

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \mathbf{V}_{n+1/2}, \tag{3.48}$$

$$\bar{\mathbf{E}}_n = \left(\bar{\mathbf{E}}_{n-1} + \mathbf{E}_{n+1}\right)/2. \tag{3.49}$$

Le tenseur de rotation magnétique est défini par

$$\mathbf{R}_n = \left[(1-\theta_n^2)\mathbf{I} - 2\theta_n \times \mathbf{I} + 2\theta_n \otimes \theta_n\right]/(1+\theta_n^2), \tag{3.50}$$

où $\theta_n = \frac{q_s \mathbf{B}_n \Delta t}{2m_s}$. Les positions et vitesses intermédiaires des particules, fonctions des seuls champs connus, sont données par

$$\widetilde{\mathbf{V}} = \mathbf{R}_n \mathbf{V}_{n-1/2} + \frac{q\Delta t}{4m}(\mathbf{I} + \mathbf{R}_n)\bar{\mathbf{E}}_{n-1}, \tag{3.51}$$

$$\widetilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X}_n + \Delta t \widetilde{\mathbf{V}}. \tag{3.52}$$

En linéarisant (3.47) on obtient un terme correctif noté $\delta\mathbf{V}$ duquel on déduit l'expression des positions et vitesses finales en fonction du champ électrostatique futur

$$\delta\mathbf{V}(\mathbf{X}_n, \widetilde{\mathbf{X}}) = \frac{q\Delta t}{4m}(\mathbf{I} + \mathbf{R}_n)\mathbf{E}_{n+1}(\widetilde{\mathbf{X}}), \tag{3.53}$$

$$\mathbf{V}_{n+1/2} = \widetilde{\mathbf{V}} + \delta\mathbf{V}, \tag{3.54}$$

$$\mathbf{X}_{n+1} = \widetilde{\mathbf{X}} + \Delta t \delta\mathbf{V}. \tag{3.55}$$

On obtient une expression de la densité de charge en fonction de $\mathbf{E}_{n+1}$ par développement limité autour de $\widetilde{\mathbf{X}}_{sp}$:

$$\rho_s^{n+1}(\mathbf{x}) = q_s \sum_p \left[S(\mathbf{x} - \widetilde{\mathbf{X}}_{sp}) - (\mathbf{X}_{sp,n+1} - \widetilde{\mathbf{X}}_{sp})\nabla S(\mathbf{x} - \widetilde{\mathbf{X}}_{sp})\right], \tag{3.56}$$

on pose $\widetilde{\rho}_s(\mathbf{x}) = q_s \sum_p S(\mathbf{x} - \widetilde{\mathbf{X}}_{sp})$ et on en déduit

$$\rho^{n+1} = \widetilde{\rho} - \nabla \cdot (\chi \mathbf{E}_{n+1}) \,, \tag{3.57}$$

où on a introduit le tenseur de susceptibilité

$$\chi = \frac{\Delta t^2}{4} \sum_s \frac{q_s \widetilde{\rho}_s}{m_s} (\mathbf{I} + \mathbf{R}_{s,n}). \tag{3.58}$$

Or nous avons par définition $\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1} = \rho_{n+1}$. En posant $\mathbf{E}_{n+1} = -\nabla \phi_{n+1}$, on obtient finalement

$$\nabla \cdot [(\mathbf{I} + \chi) \nabla \phi_{n+1}] = -\widetilde{\rho}. \tag{3.59}$$

La solution de (3.59) nous permet de calculer (3.54) et (3.55).

Chapitre 4

ELIXIRS : un code électromagnétique relativiste implicite

La méthode implicite directe se décompose comme suit. Les positions et les impulsions des particules sont d'abord avancées à un instant intermédiaire en utilisant les champs connus, d'où l'on déduit des densités de charge et de courant approchées. Les positions et impulsions sont ensuite linéarisées autour de ces valeurs et en fonction des champs futurs. S'ensuit une équation d'onde implicite dont la résolution permet de mettre à jour les quantités relatives aux macro-particules. Nous montrerons par la suite que la méthode directe peut se mettre sous la forme d'un schéma de Newton simplifié.

Notre objectif principal est de simuler l'interaction d'une impulsion laser ultra-intense avec des lames de plasma de densité proche de la densité solide. Les faisceaux de particules énergétiques issus de cette interaction présentent un grand intérêt dans de nombreux domaines allant de la fusion par confinement inertiel [15, 88, 89, 19, 16, 90], à la physique des hautes densités d'énergie [13, 91, 92, 10], la physique nucléaire [93, 94] ou la médecine [14]. Du fait des fortes densités considérées, la pulsation plasma électronique dépasse largement la pulsation laser. Si nous utilisions un code PIC explicite, les pas de temps et d'espace devraient résoudre les modes haute-fréquence électroniques au coeur du volume de plasma. Cependant, ces modes présentent peu d'intérêt pour notre problème puisqu'ils n'affectent pas l'interaction laser-plasma ni aucun processus afférent tel que, l'expansion ionique causée par la détente dans le vide des électrons rapides. En revanche, recourir à un schéma implicite permettrait d'employer un pas de temps significativement plus grand, c'est-à-dire uniquement déterminé par la nécessité de résoudre la pulsation du laser incident. Toutefois, la forte dissipation numérique inhérente à l'algorithme implicite peut être dommageable dans le contexte de l'interaction laser-plasma, pour lequel les ondes lumineuses doivent parcou-

rir de nombreuses longueurs d'onde. Ceci nous a amené à développer un solveur électromagnétique avec amortissement ajustable, fondé sur une généralisation du schéma initialement proposé par Friedman [41] pour les équations de Lorentz dans le cadre d'un code électrostatique. Nous montrerons que le schéma tolère des variations spatiales abruptes du paramètre de contrôle permettant ainsi la propagation laser dans le vide sans dissipation, de même que le fort amortissement des ondes plasma indésirables dans la partie la plus dense de la cible.

De même que les codes explicites, les codes implicites pâtissent du chauffage numérique artificiel provenant d'une discrétisation grossière de la longueur de Debye, ce qui arrive fréquemment lorsqu'on traite des plasmas de densité élevée. Comme nous l'avons vu aux chapitres 2.2 et 2.4, cet effet est généralement attribué à l'instabilité d'aliasing provenant de la discrétisation spatiale [21]. Pour le minimiser, nous tirerons part de l'influence bénéfique des facteurs de forme d'ordre élevé [53, 31] en utilisant des fonctions poids quadratiques. Nous profiterons également de l'influence stabilisatrice des grands pas de temps rendue possible par le schéma implicite.

Le chapitre est organisé comme suit. Dans la section 4.2, nous rappelons les principes élémentaires de la modélisation PIC, donnons la discrétisation temporelle implicite des équations à résoudre, et démontrons avec un formalisme de Newton simplifié la méthode implicite directe. Dans la section 4.3, nous examinons en détail la résolution numérique de l'équation d'onde telle que traitée dans notre nouveau code 2Dx-3Dv, ELIXIRS (ELectromagnetic Implicit X-dimensionnal Iterative Relativistic Solver). L'introduction de conditions aux limites injectantes ou absorbantes pour les champs électromagnétiques est aussi traitée. La section 4.4 est dédiée aux propriétés linéaires de la méthode implicite directe au travers de la résolution des relations de dispersion électrostatique et électromagnétique. Les effets des discrétisations en temps et en espace, de l'amortissement ajustable et des facteurs de forme d'ordre élevé seront discutés.

4.1 La méthode implicite directe électrostatique

Bodin [95] a formulé la méthode implicite directe de Langdon et al. [37] comme une méthode de Newton simplifiée dans le cas électrostatique non magnétisé. Dans cette section, introductive, nous présentons une généralisation de ces développements en y incluant un champ magnétique externe. Après avoir donné la discrétisation temporelle du problème de Vlasov-Poisson à résoudre, nous donnerons la formulation faible du problème que nous résoudrons avec un algorithme de Newton. En nous limitant à une seule itération de cet algorithme nous retrouverons la méthode implicite directe. Dans une deuxième section nous considérerons des conditions initiales modifiées, celles-ci feront intervenir un terme supplémentaire de gradient du champ électrique. Dans une troisième section nous présenterons

un algorithme complet prenant en compte les itérations. Dans la limite électrostatique nous devons résoudre l'équation de Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0 \tag{4.1}$$

et l'équation de Vlasov non collisionnelle pour chaque espèce de particules s décrite par la fonction de distribution $f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s}\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = 0\,. \tag{4.2}$$

Ici q_s et m_s sont la charge et la masse au repos des particules de l'espèce s, respectivement. $\mathbf{x}$ et $\mathbf{v}$ désignent la position et la vitesse. La fonction de distribution f_s est décrite par une superposition de macro-particules de la forme

$$f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{p=1}^{N_s} S(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p)\delta(\mathbf{v} - \mathbf{V}_p) \tag{4.3}$$

où S est le facteur de forme, N_s le nombre total de particules dans le système, et δ la distribution de Dirac. De Eq. (4.2), on déduit que f_s est conservé sur les caractéristiques $(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))$ où $\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \mathbf{v}(t)$, $\frac{d\mathbf{v}}{dt}(t) = \frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}$.

4.1.1 Discrétisation temporelle

Dans la limite classique, le mouvement de chaque macro-particule p est décrit par les équations de Lorentz

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt}(t) = \mathbf{V}(t) \tag{4.4}$$

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt}(t) = \frac{q_s}{m_s}\left\{\mathbf{E}\left[\mathbf{X}(\mathbf{t}), \mathbf{t}\right] + \mathbf{V}(t) \times \mathbf{B}\left[\mathbf{X}(t), t\right]\right\} \tag{4.5}$$

où $\mathbf{X}$ et $\mathbf{V}$ désignent respectivement la position et la vitesse d'une distribution de macro-particules. On note q_s et m_s la masse et la charge d'une macro-particule de l'espèce s. $\mathbf{E}$ désigne le champ électrique, et $\mathbf{B}$ est un champ magnétique externe qui peut dépendre de l'espace et du temps. La discrétisation avec le schéma D_1 des Eqs. (4.4)-(4.5) est donnée par

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} \tag{4.6}$$

$$\mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{V}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{q_s \Delta t}{m_s}\bar{\mathbf{E}}_n + \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\left(\mathbf{V}_{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{V}_{n-\frac{1}{2}}\right) \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n) \tag{4.7}$$

$$\bar{\mathbf{E}}_n = \left(\bar{\mathbf{E}}_{n-1} + \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{X}_{n+1})\right)/2 \tag{4.8}$$

La spécificité du schéma D_1 est d'introduire le champ électrique moyen $\bar{\mathbf{E}}_n$, combinaison du champ futur $\mathbf{E}_{n+1}$ et des champs électriques précédents. La discrétisation de l'équation (4.7) fait apparaître la vitesse future dans le second membre, nous la résolvons par l'intermédiaire de la matrice $\mathbf{R}_s$ définie par

$$\mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n) = \mathbf{R}\left(\theta_s(\mathbf{X}_n)\right) = \frac{2}{1+\theta_s^2}\left(\mathbf{I} + \theta_s \otimes \theta_s - \theta_s \times \mathbf{I}\right) - \mathbf{I}, \tag{4.9}$$

où $\theta_s(\mathbf{X}_n)$ est défini par $\theta_s(\mathbf{X}_n) = \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n)$. On en déduit l'expression de la vitesse,

$$\mathbf{V}_{n+1/2} = \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\mathbf{V}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\bar{\mathbf{E}}_n, \tag{4.10}$$

En introduisant (4.10) dans (4.6) on obtient

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\mathbf{V}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\left(\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\mathbf{E}}_{n-1}\right) \tag{4.11}$$

On peut scinder cette expression en une partie explicite et une partie implicite. Le terme explicite qui donne la position prédite, noté $\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}$, est défini par

$$\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\mathbf{V}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\bar{\mathbf{E}}_{n-1}, \tag{4.12}$$

et le terme implicite de correction est défini par

$$\delta\mathbf{X} = \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X_n})\right)\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{X}_{n+1}) \tag{4.13}$$

Nous devons résoudre l'Eq. (4.11) implicite en temps, le champ électrique $\mathbf{E}_{n+1}$ à déterminer étant relié à la densité de charge future ρ_{n+1} par l'équation de Poisson suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x}) = \sum_s \rho_{s,n+1}(\mathbf{x})/\epsilon_0 \tag{4.14}$$

où ρ_s désigne la contribution de l'espèce s à la densité de charge totale.

4.1.2 Formulation faible

La formulation faible de l'Eq. (4.14) est donnée pour toute fonction test ψ par

$$\int \nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \frac{1}{\epsilon_0}\sum_s \int \rho_{s,n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \tag{4.15}$$

Nous avons exploité la définition "faible" de la densité de charge ρ_s de l'espèce s

$$\int \rho_{s,n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = q_s \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{v})\psi(\mathbf{X}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{v}))d\mathbf{x}d\mathbf{v} \tag{4.16}$$

où $f_{s,0}$ est la fonction de distribution initiale. Le problème consiste alors à chercher $(\mathbf{E}_{n+1}, \mathbf{X}_{n+1})$ tels que

$$\int \nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \sum_s \frac{q_s}{\epsilon_0} \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{v})\psi(\mathbf{X}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{v}))d\mathbf{x}d\mathbf{v} \tag{4.17}$$

tout en vérifiant (4.6)-(4.8). Nous utilisons la méthode itérative de Newton pour résoudre ce système. Ainsi, pour chaque grandeur inconnue $\mathbf{Y}$, nous introduisons l'ansatz

$$\mathbf{Y}_{n+1}^{(k+1)} = \mathbf{Y}_{n+1}^{(k)} + \delta\mathbf{Y}_{n+1}^{(k)} \qquad k = 0, 1, \ldots \tag{4.18}$$

où k est le numéro de l'itération. Dans la suite nous ne noterons pas l'indice $n+1$ pour simplifier les écritures. En substitutant l'ansatz ci-dessus dans (4.17) et en ne conservant que les termes d'ordre 1 nous obtenons

$$\begin{aligned} &\int \nabla \cdot \left\{\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \nabla\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\delta\mathbf{X}^{(k)} + \delta\mathbf{E}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{X}^{(k)})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\epsilon_0}\sum_s q_s \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{v})\psi\left(\mathbf{X}^{(k)} + \delta\mathbf{X}^{(k)}\right)d\mathbf{x}d\mathbf{v} \end{aligned} \tag{4.19}$$

Dans un premier temps nous négligeons le terme $\nabla\mathbf{E}^{(k)}\delta\mathbf{X}^{(k)}$ du champ électrique, on en déduit alors

$$\begin{aligned} &\int \nabla \cdot \left\{\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta\mathbf{E}^{(\mathbf{k})}(\mathbf{X}^{(k)})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\epsilon_0}\sum_s q_s \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{v})\left[\psi\left(\mathbf{X}^{(k)}\right) + \nabla\psi\delta\mathbf{X}^{(k)}\right]d\mathbf{x}d\mathbf{v} \end{aligned} \tag{4.20}$$

En utilisant la définition de la densité de charge (4.16) et en intégrant par parties, on en déduit

$$\begin{aligned} &\int \nabla \cdot \left\{\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\epsilon_0}\sum_s \int \rho_s^{(k)}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \frac{1}{\epsilon_0}\sum_s \int \nabla \cdot \left\{\rho_s^{(k)}(\mathbf{x})\delta\mathbf{X}^{(k)}\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{4.21}$$

A présent, substituons l'ansatz de Newton dans (4.11). Nous avons à l'ordre 1 et en négligeant le gradient du champ électrique

$$\mathbf{X}^{(k)} + \delta\mathbf{X}^{(k)} = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} + \frac{q_s\Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\left\{\mathbf{E}^{(k)}\left(\mathbf{X}^{(k)}\right) + \delta\mathbf{E}^{(k)}\left(\mathbf{X}^{(k)}\right)\right\} \tag{4.22}$$

En injectant (4.22) dans (4.21) nous obtenons

$$\int \nabla \cdot \left\{ \mathbf{E}^{(k)}\left(\mathbf{X}^{(k)}\right) + \delta\mathbf{E}^{(k)}\left(\mathbf{X}^{(k)}\right) \right\} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$
$$- \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \nabla \cdot \left[\rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \mathbf{X}^{(k)} \right) \right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$
$$- \sum_s \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s \epsilon_0} \int \nabla \cdot \left\{ \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n) \right) \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \right] \right\} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{4.23}$$

Introduisons le tenseur de susceptibilité $\chi^{(k)}$ défini par

$$\chi^{(k)}(\mathbf{x}) = \sum_s \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s \epsilon_0} \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n) \right), \tag{4.24}$$

Eq. (4.23) prend alors la forme simplifiée suivante

$$\int \nabla \cdot \left\{ \left(\mathbf{I} + \chi^{(k)}(\mathbf{x}) \right) \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \right] \right\} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} =$$
$$\frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \nabla \cdot \left[\rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \mathbf{X}^{(k)} \right) \right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{4.25}$$

L'équation (4.25) constitue la formulation faible du problème. Nous allons maintenant examiner le cas particulier où nous n'effectuons qu'une seule itération de l'algorithme de Newton, qui correspond à la méthode implicite directe.

4.1.3 La méthode implicite directe

Dans le schéma le plus simple à une itération, on peut résoudre le problème électrostatique en choisissant les valeurs initiales suivantes

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} \\ \mathbf{E}^{(0)} & = 0 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \delta\mathbf{X}^{(0)} & = \delta\mathbf{X} \\ \delta\mathbf{E}^{(0)} & = \mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{E}_{n+1}. \end{array} \right. \tag{4.26}$$

Notons que l'on aurait pu choisir de façon équivalente $\mathbf{E}^{(0)} = \mathbf{E}_n$ et $\delta\mathbf{E}^{(0)} = \mathbf{E}_{n+1} - \mathbf{E}_n$. Le terme correctif s'écrit alors

$$\delta\mathbf{X} = \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n) \right) \mathbf{E}_{n+1} \left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} \right), \tag{4.27}$$

Et le tenseur de susceptibilité χ est donné par

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_s \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s \epsilon_0} \widetilde{\rho}_{s,n+1}(\mathbf{x}) (\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{x})) \tag{4.28}$$

En substituant (4.26)-(4.28) dans (4.25) on obtient

$$\int \nabla \cdot \{(\mathbf{I} + \chi(\mathbf{x}))\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\}\, \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{1}{\epsilon_0} \int \widetilde{\rho}_{n+1}(\mathbf{x}) \psi(d\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{4.29}$$

L'équation (4.29) doit être satisfaite pour toute fonction ψ. Il s'agit donc de résoudre l'équation locale suivante

$$\nabla \cdot [(\mathbf{I} + \chi(\mathbf{x}))\, \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})] = \widetilde{\rho}_{n+1}(\mathbf{x})/\epsilon_0 \tag{4.30}$$

On retrouve bien la méthode implicite directe formulée dans le cas électrostatique dans [36].

4.1.4 Prise en compte du terme de gradient

En conservant tous les termes d'ordre un lorsqu'on injecte l'ansatz de Newton dans (4.11), nous pouvons considérer un terme supplémentaire dans la méthode implicite directe électrostatique. Ainsi le terme de correction est donné par

$$\begin{aligned}\delta \mathbf{X}^{(k)} &= \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \mathbf{X}^{(k)} \\ &+ \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} (\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)) \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \nabla \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \delta \mathbf{X}^{(k)} + \delta \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \right]\end{aligned} \tag{4.31}$$

Afin d'exprimer explicitement ce terme de correction, nous introduisons la matrice $\mathbf{A}$ définie par

$$\mathbf{A}(\mathbf{X}^{(k)}) = \mathbf{I} - \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} (\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)) \nabla \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \tag{4.32}$$

On obtient finalement pour le terme de correction

$$\begin{aligned}\delta \mathbf{X}^{(k)} &= \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)}) \left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \mathbf{X}^{(k)} \right) \\ &+ \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)}) \, (\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)) \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \right]\end{aligned} \tag{4.33}$$

On en déduit l'expression modifiée du tenseur de susceptibilité

$$\chi^{(k)}(\mathbf{x}) = \sum_s \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s \epsilon_0} \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}) \, (\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)) \tag{4.34}$$

En injectant (4.33) et (4.34) dans (4.21) nous obtenons

$$\begin{aligned}&\int \nabla \cdot \left\{ \left(\mathbf{I} + \chi^{(k)}(\mathbf{x}) \right) \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \delta \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \right] \right\} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \qquad (4.35) \\ &- \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \int \nabla \cdot \left[\rho_s^{(k)}(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x})) \left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x}) \right) \right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \qquad (4.36)\end{aligned}$$

cette équation constitue la formulation faible du problème. Nous allons maintenant examiner le cas de la méthode directe, pour laquelle nous n'effectuons qu'une itération de l'algorithme de Newton. On peut résoudre le problème en choisissant les valeurs initiales suivantes

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} \\ \mathbf{E}^{(0)} & = \mathbf{E}_n \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \delta\mathbf{X}^{(0)} & = \delta\mathbf{X} \\ \delta\mathbf{E}^{(0)} & = \delta\mathbf{E} = \mathbf{E}_{n+1} - \mathbf{E}_n \end{array} \right. \tag{4.37}$$

Après substitution de ces valeurs initiales dans (4.32)-(4.34), on obtient

$$\mathbf{A}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) = \mathbf{I} - \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right) \nabla \mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) \tag{4.38}$$

$$\delta\mathbf{X} = \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} \mathbf{A}^{-1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n))\mathbf{E}_{n+1} \tag{4.39}$$

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_s \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s \epsilon_0} \widetilde{\rho}_{s,n+1}(\mathbf{x}) \mathbf{A}^{-1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x}))(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)) \tag{4.40}$$

En couplant (4.37)-(4.40) et (4.35) nous retrouvons l'Eq. (4.29) et donc (4.30). La prise en compte du terme de gradient ne modifie donc que le tenseur de susceptibilité.

4.1.5 Prise en compte des itérations $k > 1$

Il est possible d'appliquer le schéma de Newton au-delà de la première itération. Pour cela nous reprenons le système d'équations (4.22)-(4.25). L'équation de Poisson donnée par Eq. (4.25) fait intervenir le terme $\left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \mathbf{X}^{(k)}\right)$, on obtient ce terme d'ordre zéro à partir de Eq. (4.22)

$$\mathbf{X}^{(k)} - \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} = \frac{q_s \Delta t^2}{4 m_s} \left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right) \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) \tag{4.41}$$

En substituant (4.41) dans (4.25), on en déduit la formulation faible du problème de Poisson avec itérations

$$\begin{aligned} & \int \nabla \cdot \left[\left(\mathbf{I} + \chi^{(k)}(\mathbf{x})\right) \mathbf{E}^{(k+1)}(\mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x}))\right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ = & \int \nabla \cdot \left[\chi^{(k)}(\mathbf{x}) \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x}))\right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \sum_s \int \frac{\rho_s^{(k)}(\mathbf{x})}{\epsilon_0} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{4.42}$$

L'équation (4.42) doit être satisfaite pour toute fonction ψ, ce qui implique l'équation locale suivante

$$\nabla \cdot \left[\left(\mathbf{I} + \chi^{(k)}(\mathbf{x})\right) \mathbf{E}^{(k+1)}(\mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x}))\right] = \nabla \cdot \left[\chi^{(k)}(\mathbf{x}) \mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}(\mathbf{x}))\right] + \sum_s \rho_s^{(k)}(\mathbf{x})/\epsilon_0 \tag{4.43}$$

Cette équation nous permet de mettre à jour le champ électrique d'une itération à l'autre. L'algorithme général se présente comme suit :

1. Calcul de $\widetilde{X}_{n+1}$

$$\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\bar{\mathbf{E}}_{n-1}. \tag{4.44}$$

2. Initialisation ($k = 0$) de la méthode de Newton
   - $\mathbf{E}^{(k)} = \mathbf{E}^*_n$ ou $\mathbf{E}^{(k)} = 0$, (où $\mathbf{E}^*_n$ désigne la solution après itérations à t_n).
   - $\mathbf{X}^{(k)} = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} + \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\mathbf{E}^{(k)}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})$.
   - On en déduit $\chi^{(k)}$ et $\rho^{(k)}$.
3. Méthode itérative
   - On cherche $\mathbf{E}^{(k+1)}$ de la forme $\mathbf{E}^{(k+1)} = -\nabla\psi^{(k+1)}$.
   - Connaissant $\rho^{(k)}$, $\chi^{(k)}$ et $\mathbf{E}^{(k)}$, on résout (voir 4.3.1 par ex. par la méthode de Concus & Golub)

$$-\nabla\cdot\left[\left(\mathbf{I} + \chi^{(k)}\right)\nabla\psi^{(k+1)}\right] \;=\; \nabla\cdot\left[\chi^{(k)}\mathbf{E}^{(k)}\right] + \rho^{(k)}. \tag{4.45}$$

   - Mise à jour du champ électrique

$$\mathbf{E}^{(k+1)} = -\nabla\psi^{(k+1)}, \tag{4.46}$$

   - Mise à jour de la position de chaque macro-particule

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} + \frac{q_s \Delta t^2}{4m_s}\left(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right)\mathbf{E}^{(k+1)}(\mathbf{X}^{(k)}). \tag{4.47}$$

     où nous notons i l'indice des macro-particules de l'espèce s, et j le nœud du maillage primal de coordonnées $\mathbf{X}_j$. Nous introduisons S la fonction poids associée aux particules.
   - La densité de charge totale $\rho_j^{(k+1)}$ est donnée par

$$\rho_j^{(k+1)} = \sum_s q_s \sum_i S\left(\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i^{(k+1)}\right), \tag{4.48}$$

   - de même les susceptibilités sont mises à jour par

$$\chi_j^{(k+1)} = \sum_s \frac{q_s^2 \Delta t^2}{4m_s} \sum_i S\left(\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i^{(k+1)}\right)\left[\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)\right]. \tag{4.49}$$

4. Test de convergence

$$\epsilon = \max\left|\frac{\rho^{(k+1)} - \rho^{(k)}}{\rho^{(k)}}\right| \tag{4.50}$$

   - Si $\epsilon < \epsilon_{seuil}$: on converge

$$\rho_{n+1} \;\Leftarrow\; \rho^{(k+1)}, \tag{4.51}$$

$$\chi_{n+1} \;\Leftarrow\; \chi^{(k+1)}. \tag{4.52}$$

     Le champ corrigé $\mathbf{E}^*_{n+1}$ est donné par

$$\mathbf{E}^*_{n+1} = \mathbf{E}^{(k+1)}. \tag{4.53}$$

– Sinon

$$\rho^{(k)} \Leftarrow \rho^{(k+1)}, \tag{4.54}$$
$$\chi^{(k)} \Leftarrow \chi^{(k+1)}. \tag{4.55}$$

Nous avons implémenté ce schéma itératif et effectué quelques essais dans le cas électrostatique, en reprenant les paramètres de la Sec. 5.3. Ceux-ci ne se sont pas révélés concluants, la conservation de l'énergie étant systématiquement dégradée par rapport au schéma simplifié à une itération, qui s'est avéré le plus satisfaisant dans les situations impliquant des plasmas de densité élevée.

4.2 Extension relativiste avec amortissement ajustable de la méthode implicite électromagnétique

4.2.1 Le système de Vlasov-Maxwell électromagnétique et relativiste

Nous présentons ici une démonstration de la méthode implicite directe électromagnétique étendue au cas relativiste dans le cadre d'une formulation faible des équations de Maxwell et d'un schéma de Newton itératif. A la différence de [39], notre formalisme donne la possibilité d'utiliser un schéma PEC quelconque ou/et d'introduire des conditions initiales arbitraires. En anticipant notre besoin d'une propagation sans dissipation des ondes lumineuses dans la région vide du domaine de simulation, nous introduisons une généralisation du schéma avec amortissement ajustable initialement proposé et mis en oeuvre par Friedman [41] dans le régime électrostatique.

Considérons les équations de Maxwell

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\,, \tag{4.56}$$
$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\,, \tag{4.57}$$

et l'équation de Vlasov relativiste non collisionnelle pour une fonction de distribution $f_s(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ de l'espèce de particules s

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma}\frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s}\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \times \mathbf{B}\right) \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{u}} = 0\,. \tag{4.58}$$

Ici q_s et m_s sont la charge et la masse au repos des particules de l'espèce s, respectivement. Soit $\mathbf{u}$ l'impulsion relativiste normalisée par m_s. Le facteur relativiste

s'écrit alors $\gamma = (1 + u^2/c^2)^{1/2}$. La fonction de distribution f_s est décrite par une superposition de macro-particules de la forme

$$f_s(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = \sum_{p=1}^{N_s} S(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p)\delta(\mathbf{u} - \mathbf{U}_p) \tag{4.59}$$

où S est le facteur de forme, N_s le nombre total de particules dans le système, et δ la distribution de Dirac. De Eq. (4.58), on déduit que f_s est conservé sur les caractéristiques $(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t))$ où $\frac{d\mathbf{x}}{dt}(t) = \frac{\mathbf{u}}{\gamma}$, $\frac{d\mathbf{u}}{dt}(t) = \frac{q_s}{m_s}\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \times \mathbf{B}\right)$

Ainsi on peut décrire le mouvement de chaque macro-particule avec les équations suivantes :

$$\frac{d\mathbf{X}_p}{dt}(t) = \mathbf{V}_p(t) = \frac{\mathbf{U}_p(t)}{\gamma_p(t)} \tag{4.60}$$

$$\frac{d\mathbf{U}_p}{dt}(t) = \frac{q_s}{m_s}\left\{\mathbf{E}\left[\mathbf{X_p(t)}, \mathbf{t}\right] + \frac{\mathbf{U}_p(t)}{\gamma_p(t)} \times \mathbf{B}\left[\mathbf{X}_p(t), t\right]\right\} \tag{4.61}$$

4.2.2 Discrétisation temporelle des équations de Lorentz et Maxwell

La discrétisation de l'équation du mouvement est celle proposée par Friedman [41] qui généralise le schéma D_1 de Langdon et Hewett [38, 39] en introduisant un amortissement ajustable des modes électroniques haute-fréquence.

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \frac{\mathbf{U}_{n+\frac{1}{2}}}{\gamma_{n+\frac{1}{2}}}, \tag{4.62}$$

$$\mathbf{U}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{U}_{n-\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{a}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}) + \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\left(\frac{\mathbf{U}_{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{U}_{n-\frac{1}{2}}}{\gamma_n}\right) \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n), \tag{4.63}$$

$$\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1} = \frac{\theta_f}{2}\mathbf{a}_n + \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)\bar{\mathbf{a}}_{n-2}, \tag{4.64}$$

$$\bar{\mathbf{a}}_{n-1} = \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)\mathbf{a}_n + \frac{\theta_f}{2}\bar{\mathbf{a}}_{n-2}, \tag{4.65}$$

où l'indice n désigne le pas de temps et nous avons posé

$$\mathbf{a}_n = \frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}_n, \tag{4.66}$$

$$\gamma_n^2 = 1 + \frac{1}{c^2}\left[\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{\Delta t}{4}\left(\mathbf{a}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}\right)\right]^2, \tag{4.67}$$

$$\gamma_{n+1/2}^2 = 1 + \frac{\mathbf{U}_{n+1/2}^2}{c^2}. \tag{4.68}$$

De même la discrétisation des équations de Maxwell (4.56) doit nous permette d'amortir les modes électro-magnétiques haute-fréquence, tout en autorisant la propagation sans amortissement des ondes lumineuses dans le vide. Ainsi nous avons adapté le schéma de Friedman [41], précédent aux équations de Maxwell. Ce schéma s'écrit :

$$\mathbf{E}_{n+1} = \mathbf{E}_n + \Delta t \nabla \times \mathbf{B}_{n+\frac{1}{2}} - \Delta t \frac{\mathbf{j}_{n+\frac{1}{2}}}{\epsilon_0}, \tag{4.69}$$

$$\mathbf{B}_{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{B}_{n-\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \times \left(\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} \right), \tag{4.70}$$

$$\mathbf{B}_n = \mathbf{B}_{n-1/2} - \frac{\Delta t}{2} \nabla \times \mathbf{E}_n, \tag{4.71}$$

$$\bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} = \frac{\theta_f}{2} \mathbf{E}_n + (1 - \frac{\theta_f}{2}) \bar{\mathbf{E}}_{n-2}, \tag{4.72}$$

$$\bar{\mathbf{E}}_{n-1} = (1 - \frac{\theta_f}{2}) \mathbf{E}_n + \frac{\theta_f}{2} \bar{\mathbf{E}}_{n-2}. \tag{4.73}$$

où $\mathbf{j}$ désigne la densité de courant. Comme nous le démontrerons dans la section 4.4, ce schéma autorise grâce au paramètre θ_f, un contrôle adaptatif de l'amortissement des ondes hautes fréquences (électrostatiques et électromagnétiques) du système. Cette propriété est essentielle pour l'interaction laser-plasma qui met en jeu une onde électromagnétique, se propageant dans le vide, pour laquelle la dissipation associée à la méthode D_1 standard peut se révèler trop importante. Même si nous n'avons introduit qu'un seul paramètre θ_f dans les équations de Maxwell et de Lorentz, remarquons qu'il est possible d'introduire des paramètres d'amortissement distincts pour le schéma électromagnétique et le pousseur de chaque particule. Examinons à présent les systèmes d'équations de Lorentz Eqs. (4.62)-(4.65) et de Maxwell (4.69)-(4.73). Comme on le remarque dans Eq. (4.63) la connaissance du champ électrique futur $\mathbf{E}_{n+1}$ est nécessaire pour mettre à jour $\mathbf{U}_{n+1/2}$ via les termes $\mathbf{a}_{n+1}$ et γ_n. De même les Eqs. (4.69)-(4.70) font intervenir $\mathbf{j}_{n+1/2}$, le courant déterminé à partir des impulsions de l'ensemble des macro-particules que nous allons exprimer comme une fonction du champ électrique futur $\mathbf{E}_{n+1}$ et d'un terme de courant prédit à partir des champs connus. Ainsi nous allons concevoir un algorithme de type prédicteur-correcteur [38, 39] pour les impulsions et les positions des particules, ce qui nous permettra de déterminer courants prédit et corrigé. Par conséquent la résolution de (4.62)-(4.73) peut être décomposée en trois grandes étapes. La première étape consiste à calculer les impulsions et positions prédites à partir des champs déterminés aux instants précédents. Dans un deuxième temps nous déterminons des termes correctifs qui mettent en jeu le champ futur $\mathbf{E}_{n+1}$ à partir des équations du mouvement linéarisées, puis nous injectons ces termes dans le terme de courant de l'équation d'onde linéarisée. Enfin, une fois résolue cette équation d'onde et déterminé le champ électrique futur $\mathbf{E}_{n+1}$, nous pouvons déterminer les nouvelles positions $\mathbf{X}_{n+1}$ et impulsions $\mathbf{U}_{n+1/2}$. La prochaine section sera dédiée à la résolution du

système Eqs. (4.62)-(4.73) dans le cadre d'un schéma itératif de Newton analogue au cas électrostatique traité en 4.1. A nouveau, nous montrerons que pour un choix adapté des conditions initiales, ce schéma reproduit la méthode implicite directe développée dans les Refs. [38, 39].

4.2.3 Formulation faible de l'équation d'onde sur le champ électrique

En remplaçant Eq. (4.70) dans Eq. (4.69), on obtient l'équation d'onde suivante

$$\mathbf{E}_{n+1} + \frac{c^2\Delta t^2}{2}\nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_{n+1} + \frac{\Delta t}{\epsilon_0}\mathbf{j}_{n+1/2} = \mathbf{Q}' \,, \tag{4.74}$$

avec le terme source (connu)

$$\mathbf{Q}' = \mathbf{E}_n + c^2\Delta t\nabla\times\mathbf{B}_{n-1/2} - \frac{c^2\Delta t^2}{2}\nabla\times\nabla\times\bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} \,. \tag{4.75}$$

Pour toute fonction test ψ, on suppose que la formulation faible de la densité de courant est donnée par

$$\begin{aligned}&\int \mathbf{j}_{n+1/2}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\\ &= \sum_s \frac{q_s}{2}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\mathbf{V}_{n+1/2}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\psi\left(\mathbf{X}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u})\right) + \psi\left(\mathbf{X}_n(\mathbf{x},\mathbf{u})\right)\right] d\mathbf{x}d\mathbf{u} \,,\end{aligned} \tag{4.76}$$

où $f_{s,0} = f_s(\mathbf{x},\mathbf{u},0)$ est la fonction de distribution initiale des particules et $\mathbf{V}_{n+1/2} = \mathbf{U}_{n+1/2}/\gamma_{n+1/2}$.

Le problème consiste alors à déterminer $(\mathbf{E}_{n+1}, \mathbf{X}_{n+1}, \mathbf{U}_{n+1/2})$ tels que

$$\begin{aligned}\int \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \frac{c^2\Delta t^2}{2}\int \nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\\ + \frac{\Delta t}{\epsilon_0}\int \mathbf{j}_{n+1/2}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int \mathbf{Q}'(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\end{aligned} \tag{4.77}$$

tout en vérifiant Eqs. (4.62)-(4.68). Nous utilisons la méthode de Newton pour résoudre ce système : pour chaque grandeur inconnue Y, nous introduisons l'ansatz

$$Y_{n+\alpha}^{(k+1)} = Y_{n+\alpha}^{(k)} + \delta Y_{n+\alpha}^{(k)} \quad k = 0, 1, \ldots \tag{4.78}$$

où $\alpha = (1/2, 1)$ suivant que Y est à déterminer pour un pas de temps entier ou demi-entier. Dans la suite nous omettrons l'indice $n+1$ par soucis de clarté. En

substituant l'ansatz défini ci-dessus dans Eq. (4.74) nous obtenons

$$\int \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{x}) + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{x})\right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \frac{c^2\Delta t^2}{2} \int \nabla \times \nabla \times \left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{x}) + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{x})\right] \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$
$$+ \frac{\Delta t}{\epsilon_0} \int \mathbf{j}^{(k+1)}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \mathbf{Q}'(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}\,. \tag{4.79}$$

Le terme faisant intervenir $\mathbf{j}^{(k+1)}$ est calculé avec les positions $\mathbf{X}^{(k+1)}$ et les vitesses $\mathbf{V}^{(k+1)}$

$$\begin{aligned}
\int \mathbf{j}^{(k+1)}\psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \sum_s \frac{q_s}{2} \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\mathbf{V}^{(k)} \left[\psi(\mathbf{X}^{(k)}) + \psi(\mathbf{X}_n)\right] d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&+ \sum_s \frac{q_s}{2} \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\delta\mathbf{V}^{(k)} \left[\psi(\mathbf{X}^{(k)}) + \psi(\mathbf{X}_n)\right] d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&+ \sum_s \frac{q_s}{2} \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\mathbf{V}^{(k)} \left[\nabla\psi(\mathbf{X}^{(k)}) \cdot \delta\mathbf{X}^{(k)}\right] d\mathbf{x}d\mathbf{u}\,.
\end{aligned} \tag{4.80}$$

Pour obtenir l'équation qui nous donnera le champ électrique, nous avons besoin d'exprimer les termes $\mathbf{X}^{(k)}$, $\delta\mathbf{X}^{(k)}$, $\mathbf{V}^{(k)}$ et $\delta\mathbf{V}^{(k)}$ comme des fonctions du champ électrique. Avant de poursuivre nos développements, commençons par définir les quantités suivantes

$$\gamma^{(k)} = \left(1 + \frac{\mathbf{U}^{(k)2}}{c^2}\right)^{1/2}, \tag{4.81}$$

$$\Gamma^{(k)} = \left\{1 + \frac{1}{c^2}\left[\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{\Delta t}{4}\left(\frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}\right)\right]^2\right\}^{1/2}, \tag{4.82}$$

$$\theta(\mathbf{X}_n) = \frac{q_s\Delta t}{2m_s\Gamma^{(k)}}\mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n)\,, \tag{4.83}$$

$$\mathbf{R}(\mathbf{X}_n) = \frac{2}{1+\theta^2}(\mathbf{I} + \theta\otimes\theta - \theta\times\mathbf{I}) - \mathbf{I}\,, \tag{4.84}$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{U}^{(k)}) = \frac{1}{\gamma^{(k)}}\left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{U}^{(k)}\otimes\mathbf{U}^{(k)}}{\gamma^{(k)2}c^2}\right), \tag{4.85}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{N}\left(\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{U}^{(k)}\right) &= \frac{q_s\Delta t}{4m_s c^2}\left[\frac{\mathbf{U}_{n-1/2} + \mathbf{U}^{(k)}}{\Gamma^{(k)3}} \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n)\right] \\
&\otimes \left[\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{\Delta t}{4}\left(\frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}\right)\right],
\end{aligned} \tag{4.86}$$

où $\mathbf{I}$ désigne la matrice identité. Des calculs simples donnent

$$\mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{X}_n + \frac{\Delta t \mathbf{U}^{(k)}}{\gamma^{(k)}}\,, \tag{4.87}$$

$$\delta\mathbf{X}^{(k)} = \Delta t \mathbf{M} \delta\mathbf{U}^{(k)}\,, \tag{4.88}$$

$$\mathbf{V}^{(k)} = \frac{\mathbf{U}^{(k)}}{\gamma^{(k)}}\,, \tag{4.89}$$

$$\delta\mathbf{V}^{(k)} = \mathbf{M} \delta\mathbf{U}^{(k)}\,, \tag{4.90}$$

En utilisant les expressions ci-dessus et l'ansatz de Newton (4.78), l'équation de Lorentz devient, après l'avoir linéarisée successivement autour de $\mathbf{E}^{(k)}$ puis $\mathbf{X}^{(k)}$

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{(k)} + \delta\mathbf{U}^{(k)} = \mathbf{U}_{n-1/2} &+ \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\left[\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}) + \nabla\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\delta\mathbf{X}^{(k)} + \delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\right] \\
&+ \frac{\Delta t}{2}\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1} + \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\left(\frac{\mathbf{U}^{(k)} + \delta\mathbf{U}^{(k)} + \mathbf{U}_{n-1/2}}{\Gamma^{(k)}}\right) \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n) \\
&- \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\mathbf{N}(\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{U}^{(k)})\nabla\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\delta\mathbf{X}^{(k)} \\
&- \frac{q_s \Delta t}{2m_s}\mathbf{N}(\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{U}^{(k)})\delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\,,
\end{aligned} \tag{4.91}$$

où nous avons négligé les termes d'ordre deux. En supposant que le terme de gradient du champ électrique est négligeable, cette équation se simplifie en

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{(k)} + \delta\mathbf{U}^{(k)} = \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\mathbf{U}_{n-1/2} &+ \frac{\Delta t}{4}\left[\mathbf{I} + \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\right]\left[\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1} + \frac{q_s}{m_s}\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\right] \\
&+ \frac{\Delta t q_s}{4m_s}\left[\mathbf{I} + \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\right]\left[\mathbf{I} - \mathbf{N}\left(\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)}), \mathbf{U}^{(k)}\right)\right]\delta\mathbf{E}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k)})\,.
\end{aligned} \tag{4.92}$$

L'ensemble des équations (4.77)-(4.93) constitue la formulation faible du problème complet, électromagnétique et relativiste. A présent, de même que dans le cas électrostatique, nous allons montrer en quoi la méthode implicite directe constitue un algorithme de Newton simplifié.

La méthode implicite directe

Le schéma le plus simple consiste à ne retenir qu'une seule itération avec les valeurs initiales suivantes

$$\left\{\begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} \\ \mathbf{U}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2} \\ \mathbf{E}^{(0)} & = 0 \end{array}\right. \quad \left\{\begin{array}{ll} \delta\mathbf{X}^{(0)} & = \delta\mathbf{X} \\ \delta\mathbf{U}^{(0)} & = \delta\mathbf{U} \\ \delta\mathbf{E}^{(0)} & = \mathbf{E}^{(1)} = \mathbf{E}_{n+1}\,, \end{array}\right. \tag{4.93}$$

où nous avons introduit les positions et impulsions prédites $\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}$ et $\widetilde{\mathbf{V}}_{n+\frac{1}{2}}$ calculées à partir des champs connus $\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}$ et $\mathbf{B}_n$. Nous avons

$$\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} = \mathbf{X}_n + \Delta t \frac{\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}}\,, \tag{4.94}$$

$$\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2} = \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{\Delta t}{4}\left[\mathbf{I} + \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\right]\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}\,. \tag{4.95}$$

avec $\widetilde{\gamma}_{n+1/2} = \gamma^{(0)}$. Les termes correctifs s'écrivent alors

$$\delta\mathbf{U} = \frac{q_s\Delta t}{4m_s}[\mathbf{I} + \mathbf{R}(\mathbf{X}_n)][\mathbf{I} - \mathbf{N}(\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2})]\mathbf{E}_{n+1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})\,, \tag{4.96}$$

$$\delta\mathbf{V} = \mathbf{M}\delta\mathbf{U}\,, \tag{4.97}$$

$$\delta\mathbf{X} = \Delta t\mathbf{M}\delta\mathbf{U}\,, \tag{4.98}$$

où nous avons posé

$$\begin{aligned}
&\mathbf{N}(\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}) = \mathbf{N}(0, \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}) \\
&= \frac{q_s\Delta t}{4m_sc^2}\left[\frac{\mathbf{U}_{n-1/2} + \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}}{\widetilde{\gamma}_n^3} \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n)\right] \otimes \left(\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{\Delta t}{4}\bar{\bar{\mathbf{a}}}_{n-1}\right)\,,
\end{aligned} \tag{4.99}$$

et $\widetilde{\gamma}_n = \Gamma^{(0)}$. Après avoir substitué les équations ci-dessus dans (4.80), en utilisant $\mathbf{X}_n = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} - \Delta t\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}$ et en remplaçant l'expression résultante dans (4.79), nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\int \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \frac{c^2\Delta t^2}{2}\int \nabla\times\nabla\times\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\
&+ \sum_s \frac{q_s\Delta t}{2\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u})) + \psi(\mathbf{X}_n(\mathbf{x},\mathbf{u}))\right]d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&+ \sum_s \frac{q_s\Delta t}{\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\delta\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{u})\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u}))d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&+ \sum_s \frac{q_s\Delta t}{2\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\otimes\delta\mathbf{X} - \delta\mathbf{X}\otimes\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\right]\nabla\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&= \int \mathbf{Q}'(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\,.
\end{aligned} \tag{4.100}$$

A partir de Eq. (4.76), on identifie la formulation faible du courant prédit

$$\begin{aligned}
&\sum_s \frac{q_s\Delta t}{2\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u})) + \psi(\mathbf{X}_n(\mathbf{x},\mathbf{u}))\right]d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&= \frac{\Delta t}{\epsilon_0}\int \widetilde{\mathbf{j}}_{n+1/2}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\,.
\end{aligned} \tag{4.101}$$

Pour réduire l'intégrale suivante dans (4.100), il est pratique d'introduire la formulation faible de la densité de charge prédite

$$\int \widetilde{\rho}_s(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = q_s \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\psi\left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u})\right) d\mathbf{x}d\mathbf{u}\,.$$

En faisant l'approximation $\mathbf{R}(\mathbf{X}_n) \approx \mathbf{R}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})$, nous obtenons

$$\begin{aligned}
&\frac{q_s\Delta t}{\epsilon_0}\int f_{s,0}\delta\mathbf{V}\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&= \frac{q_s\Delta t^2}{4m_s\epsilon_0}\int \widetilde{\rho}(\mathbf{x})\mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{x}))\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\,.
\end{aligned} \tag{4.102}$$

En définissant la susceptiblité implicite χ comme

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_s \frac{q_s\Delta t^2}{4m_s\epsilon_0}\mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I}+\mathbf{R}_{s,n}(\mathbf{x}))\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\widetilde{\rho}_s(\mathbf{x})\,, \tag{4.103}$$

on en déduit

$$\sum_s \frac{q_s\Delta t}{\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\delta\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{u})\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u}))d\mathbf{x}d\mathbf{u} = \int \psi(\mathbf{x})\chi(\mathbf{x})\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})d\mathbf{x}\,. \tag{4.104}$$

On traite la dernière intégrale de (4.100) en introduisant le courant modifié $\widetilde{\mathbf{j}}_s^+$

$$\int \widetilde{\mathbf{j}}_s^+(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = q_s\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\left(\mathbf{x},\mathbf{u}\right)\psi\left(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u})\right)d\mathbf{x}d\mathbf{u},$$

qui nous permet d'écrire [1]

$$\begin{aligned}
&\frac{q_s\Delta t}{2\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\otimes\delta\mathbf{X}-\delta\mathbf{X}\otimes\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\right]\nabla\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})d\mathbf{x}d\mathbf{u} \\
&= -\frac{q_s\Delta t^3}{8m_s\epsilon_0}\int \nabla\times\left\{\left[\widetilde{\mathbf{j}}_s^+(\mathbf{x})\times\mathbf{M}(\mathbf{x})\left[\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{x})\right]\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\right]\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\
&= -\frac{q_s\Delta t^3}{8m_s\epsilon_0}\int \nabla\times\left\{\left[\frac{\widetilde{\mathbf{j}}_s^+(\mathbf{x})}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}(\mathbf{x})}\times\left[\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{x})\right]\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\right]\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}
\end{aligned} \tag{4.105}$$

Après avoir défini le tenseur ζ comme

$$\zeta(\mathbf{x}) = \frac{\Delta t^2}{8\epsilon_0}\sum_s \frac{q_s}{m_s}\frac{\widetilde{\mathbf{j}}_s^+}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}}\times\left[\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{x})\right]\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\,. \tag{4.106}$$

1. où nous avons utilisé l'identité $\mathbf{U}\times\mathbf{U}\otimes\mathbf{U}=0$

il vient

$$\sum_s \frac{q_s \Delta t}{2\epsilon_0} \int f_{s,0} \left(\delta\mathbf{X} \otimes \widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2} - \widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2} \otimes \delta\mathbf{X} \right) \nabla\psi d\mathbf{x} d\mathbf{u} = -\Delta t \int \nabla\times(\zeta \mathbf{E}_{n+1}) d\mathbf{x} \,. \tag{4.107}$$

L'équation (4.100), complétée par les Eqs. (4.101), (4.104) et (4.107), doit être satisfaite pour toute fonction ψ. On en déduit l'équation locale suivante

$$\mathbf{E}_{n+1} + \frac{c^2 \Delta t^2}{2} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_{n+1} + \chi \mathbf{E}_{n+1} - \Delta t \nabla \times \left(\zeta \mathbf{E}_{n+1} \right) = \mathbf{Q} \,, \tag{4.108}$$

où le terme source est donné par

$$\mathbf{Q} = \mathbf{E}_n - \frac{\Delta t}{\epsilon_0} \widetilde{\mathbf{j}}_{n+1/2} + c^2 \Delta t \nabla \times \mathbf{B}_{n-1/2} - \frac{c^2 \Delta t^2}{2} \nabla \times \nabla \times \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} \,. \tag{4.109}$$

Ainsi, nous avons rétabli la méthode implicite électromagnétique et relativiste fondée sur le schéma D_1, qui a été présentée dans la Ref. [39], à la différence près que le terme source fait intervenir le champ moyenné en temps $\bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1}$. La méthode implicite directe peut donc être formulée comme une méthode de Newton à itération unique en prenant les valeurs initiales $\mathbf{X}^{(0)} = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}$, $\mathbf{U}^{(0)} = \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}$ et $\mathbf{E}^{(0)} = 0$. Le système d'équations (4.94-4.98) et (4.108-4.109) constitue le fondement du code ELIXIRS. Des variantes sont possibles que nous allons exposer dans ce qui suit.

4.2.4 Autres formes de l'équation d'onde

Examinons à présent un autre choix de conditions initiales

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{X}}_{n+1} \\ \mathbf{U}^{(0)} & = \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2} \\ \mathbf{E}^{(0)} & = \mathbf{E}_n \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \delta\mathbf{X}^{(0)} & = \delta\mathbf{X} \\ \delta\mathbf{U}^{(0)} & = \delta\mathbf{U} \\ \delta\mathbf{E}^{(0)} & = \mathbf{E}_{n+1} - \mathbf{E}_n \,, \end{array} \right. \tag{4.110}$$

Notons que l'expression de $\widetilde{\gamma}_n = \Gamma^{(0)}$ est modifiée et prend la forme

$$\Gamma^{(0)} = \left\{ 1 + \frac{1}{c^2} \left[\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t}{4 m_s} \left(\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) + \bar{\mathbf{E}}_{n-1} \right) \right]^2 \right\}^{1/2} . \tag{4.111}$$

L'expression de $\mathbf{N}$ devient alors

$$\begin{aligned} &\mathbf{N}(\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}), \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}) = \\ &\frac{q_s \Delta t}{4 m_s c^2} \left[\frac{\mathbf{U}_{n-1/2} + \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}}{\widetilde{\gamma}_n} \times \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n) \right] \otimes \left[\mathbf{U}_{n-1/2} + \frac{q_s \Delta t}{4 m_s} \left(\bar{\mathbf{E}}_{n-1} + \mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) \right) \right] . \end{aligned} \tag{4.112}$$

Le terme de correction de l'impulsion est donné par

$$\begin{aligned}\delta\mathbf{U} &= \frac{q_s\Delta t}{4m_s}\left[\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\right]\mathbf{N}\left(\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}),\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}\right)\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})\\ &+\frac{q_s\Delta t}{4m_s}\left[\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n)\right]\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}\left(\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}),\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}\right)\right]\mathbf{E}_{n+1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}).\end{aligned}\tag{4.113}$$

En substituant (4.113), la nouvelle forme de la correction de l'impulsion, dans la formulation faible de l'équation d'onde (4.100) la linéarisation du courant fait apparaître deux termes supplémentaires. Ainsi nous avons

$$\begin{aligned}&\frac{q_s\Delta t}{\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\delta\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{u})\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u}))d\mathbf{x}d\mathbf{u}\\ &=\frac{q_s\Delta t^2}{4m_s\epsilon_0}\int\widetilde{\rho}_{s,n+1}(\mathbf{x})\mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n)(\mathbf{x}))(\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x}))\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\\ &+\frac{q_s\Delta t^2}{4m_s\epsilon_0}\int\widetilde{\rho}_{s,n+1}(\mathbf{x})\mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n)(\mathbf{x}))\mathbf{N}(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}.\end{aligned}\tag{4.114}$$

En définissant la susceptibilité implicite α comme

$$\alpha(\mathbf{x})=\sum_s\frac{q_s\Delta^2}{4m_s\epsilon_0}\widetilde{\rho}_{n+1}(\mathbf{x})\mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n))\mathbf{N}(\mathbf{x}),\tag{4.115}$$

et en utilisant l'expression de χ donnée par Eq. (4.103) nous en déduisons

$$\begin{aligned}&\sum_s\frac{q_s\Delta t}{\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\delta\mathbf{V}(\mathbf{x},\mathbf{u})\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}(\mathbf{x},\mathbf{u}))d\mathbf{x}d\mathbf{u}\\ &=\int\chi(\mathbf{x})\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}+\int\alpha(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\end{aligned}\tag{4.116}$$

La dernière intégrale de (4.100) fait également apparaître un terme supplémentaire

$$\begin{aligned}&\frac{q_s\Delta t}{2\epsilon_0}\int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u})\left[\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\otimes\delta\mathbf{X}-\delta\mathbf{X}\otimes\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\right]\nabla\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})d\mathbf{x}d\mathbf{u}\\ &=-\frac{q_s\Delta t^3}{8m_s\epsilon_0}\int\nabla\times\left\{\frac{\widetilde{\mathbf{j}}_s^+}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}}\times(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n))\left[\mathbf{I}-\mathbf{N}(\mathbf{x})\right]\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}\\ &-\frac{q_s\Delta t^3}{8m_s\epsilon_0}\int\nabla\times\left\{\frac{\widetilde{\mathbf{j}}_s^+}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}}\times(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n))\mathbf{N}(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x})\right\}\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}.\end{aligned}\tag{4.117}$$

On définit alors le tenseur β par

$$\beta(\mathbf{x})=\sum_s\frac{q_s\Delta t^2}{8m_s\epsilon_0}\frac{\widetilde{\mathbf{j}}_s^+(\mathbf{x})}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}}\times(\mathbf{I}+\mathbf{R}(\mathbf{X}_n))\mathbf{N}(\mathbf{x}),\tag{4.118}$$

et on utilise l'expression de ζ donnée par Eq. (4.106) pour obtenir

$$\sum_s \frac{q_s \Delta t}{2\epsilon_0} \int f_{s,0}(\mathbf{x},\mathbf{u}) \left[\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2} \otimes \delta\mathbf{X} - \delta\mathbf{X} \otimes \widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2}\right] \nabla\psi(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) d\mathbf{x} d\mathbf{u}$$
$$= -\Delta t \int \nabla \times (\zeta(\mathbf{x})\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x}))\, \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \Delta t \int \nabla \times (\beta(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x}))\, \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \tag{4.119}$$

A partir de (4.116) et (4.119) on regroupe au second membre de (4.100) les intégrales connues qui font intervenir les tenseurs de susceptibilité α et β. Pour toute fonction test ψ la formulation faible, obtenue à partir de (4.100), est donnée par

$$\begin{aligned}
&\int \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \frac{c^2\Delta t^2}{2} \int \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\
&+ \int \chi(\mathbf{x})\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \Delta t \int \nabla \times (\zeta(\mathbf{x})\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x}))\, \psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\
&= \int \mathbf{Q}'(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} - \frac{\Delta t}{\epsilon_0} \int \widetilde{\mathbf{j}}_{n+1/2}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \\
&- \int \alpha(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \Delta t \int \nabla \times (\beta(\mathbf{x})\mathbf{E}_n(\mathbf{x}))\, \psi(\mathbf{x})d\mathbf{x}.
\end{aligned} \tag{4.120}$$

Finalement on obtient l'équation locale suivante

$$\mathbf{E}_{n+1} + \frac{c^2\Delta t^2}{2}\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_{n+1} + \chi\mathbf{E}_{n+1} - \Delta t \nabla \times (\zeta \mathbf{E}_{n+1}) = \mathbf{Q} + \mathbf{Q}^*, \tag{4.121}$$

où $\mathbf{Q}$ est donné par Eq. (4.109) et $\mathbf{Q}^*$ par

$$\mathbf{Q}^* = -\alpha\mathbf{E}_n + \Delta t \nabla \times (\beta \mathbf{E}_n) \tag{4.122}$$

4.2.5 Linéarisation simplifiée des termes de force

Le calcul développé dans la section 4.2 prend en compte la linéarisation complète des termes de force électrique et magnétique. Ici nous mettons en évidence la simplification apportée en négligeant la linéarisation du facteur de Lorentz γ_n dans le terme de force magnétique, c'est-à-dire en faisant l'approximation $\gamma_n \approx \tilde{\gamma}_n$. En reprenant les calculs introduits dans la section 4.2 on obtient les termes correctifs suivants :

$$\delta\mathbf{U} = \frac{\Delta t q_s}{4m_s}(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n))\mathbf{E}_{n+1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}) \tag{4.123}$$

$$\begin{aligned}
\delta\mathbf{X} = &\frac{\Delta t^2 q_s}{4m_s} \frac{1}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}} \left(I - \frac{\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2} \otimes \widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2}}{\widetilde{\gamma}^2_{n+1/2} c^2}\right) \\
&(\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n))\mathbf{E}_{n+1}(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})
\end{aligned} \tag{4.124}$$

Dans ce cas les susceptibilités relativistes sont données par

$$\chi_s(\mathbf{x}) = \frac{q_s \Delta t^2}{4\epsilon_0 m_s} \mathbf{M}(\mathbf{x})(\mathbf{I} + \mathbf{R}_{s,n}(\mathbf{x}))\rho_s(\mathbf{x}) \tag{4.125}$$

$$\zeta_s(\mathbf{x}) = \frac{q_s \Delta t^2}{8\epsilon_0 m_s} \frac{1}{\widetilde{\gamma}_{n+1/2}(\mathbf{x})} \widetilde{\mathbf{j}}_s^+(\mathbf{x}) \times (\mathbf{I} + \mathbf{R}_{s,n}(\mathbf{x})) \tag{4.126}$$

où la matrice de rotation $R_{s,n}$ induite par le champ magnétique est définie par $R_{s,n}(\mathbf{x}) = R_s[\theta(\mathbf{X}_n)]$ avec $\theta(\mathbf{X}_n) = \frac{q_s \Delta t}{2 m_s \widetilde{\gamma}_n} \mathbf{B}_n(\mathbf{X}_n)$. Notons que la correction en vitesse ainsi obtenue $\delta\mathbf{V} = \delta\mathbf{X}/\Delta t$ est proche du terme correctif retenu par Welch et al. dans le code LSP [32, 33], qui s'écrit :

$$\delta\mathbf{V} = \frac{q_s \Delta t}{2\widetilde{\gamma}_{n+1/2} m_s} \left[\frac{\mathbf{I} + \mathbf{R}_s(\mathbf{X}_n)}{2} \mathbf{E}_{n+1} - \frac{1}{c^2} \widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2} \left(\widetilde{\mathbf{V}}_{n+1/2} \cdot \mathbf{E}_{n+1} \right) \right] \tag{4.127}$$

Mais notre expression de $\delta\mathbf{V}$ semble plus rigoureuse puisqu'elle découle directement de la méthode directe.

4.3 Résolution numérique de l'équation d'onde électromagnétique

4.3.1 Résolution par une méthode itérative

Dans cette section, nous esquissons la méthode numérique utilisée pour résoudre Eq. (4.108) dans le cas d'un espace des phases $2Dx - 3Dv$ avec des conditions aux limites périodiques suivant la direction transverse y. Dans un premier temps, nous calculons les susceptibilités implicites pour chaque macroparticule, on en déduit $\chi(\mathbf{X_p}, \mathbf{U}_p)$ et $\zeta(\mathbf{X_p}, \mathbf{U}_p)$. Puis on projette ces quantités sur le maillage cartésien (x, y) en utilisant les formules :

$$\chi(\mathbf{x}) = \sum_s \sum_p S(\mathbf{X}_p - \mathbf{x}) \chi(\mathbf{X}_p, \mathbf{U}_p)\,, \tag{4.128}$$

$$\zeta(\mathbf{x}) = \sum_s \sum_p S(\mathbf{X}_p - \mathbf{x}) \zeta(\mathbf{X}_p, \mathbf{U}_p)\,. \tag{4.129}$$

Puis on applique la méthode itérative de Concus et Golub [96] pour résoudre le système elliptique défini par Eq. (4.108), ce qui donne dans ce cas

$$\mathbf{E}^{(m+1)} + \frac{c^2 \Delta t^2}{2} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^{(m+1)} + \chi^0 \mathbf{E}^{(m+1)} - \Delta t \nabla \times \left(\zeta^0 \mathbf{E}^{(m+1)} \right) = \widetilde{\mathbf{Q}}^{(m)} \tag{4.130}$$

Le second membre de Eq. (4.130) est donné par

$$\widetilde{\mathbf{Q}}^{(m)} = \mathbf{Q} - (\chi - \chi^0)\mathbf{E}^{(m)} + \Delta t \nabla \times \left[\left(\zeta - \zeta^0 \right) \mathbf{E}^{(m)} \right] \tag{4.131}$$

où m est l'indice d'itération et χ^0 et ζ^0 désignent les susceptibilités moyennes suivant y. La convergence rapide du schéma requiert, en principe, de faibles variations des champs suivant y, cependant cette hypothèse ne s'est pas révélée particulièrement contraignante dans les situations physiques que nous avons traitées. Nous définissons les tenseurs moyens χ^0 and ζ^0 par $\chi^0 = \left[\chi^{kl,0}\right]_{1\leq k,l\leq 3}$ et $\zeta^0 = \left[\zeta^{kl,0}\right]_{1\leq k,l\leq 3}$, où $\chi^{kl,0} =< \chi^{kl} >_y$ and $\zeta^{kl,0} =< \zeta^{kl} >_y$. Supposons de faibles variations des champs électromagnétiques $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ et des tenseurs de susceptibilité χ, ζ dans la direction transverse, la méthode itérative de Concus et Golub [96] appliquée à (4.108) nous donne le système suivant (en unités normalisées) :

$$\begin{aligned} E_x^{(m+1)} &+ \frac{\Delta t^2}{2}\left(\partial_{yx}E_y^{(m+1)} - \partial_y^2 E_x^{(m+1)}\right) + \chi^{11,0}E_x^{(m+1)} + \chi^{12,0}E_y^{(m+1)} + \chi^{13,0}E_z^{(m+1)} \\ &- \Delta t\partial_y\left(\zeta^{31,0}E_x^{(m+1)} + \zeta^{32,0}E_y^{(m+1)} + \zeta^{33,0}E_z^{(m+1)}\right) = \widetilde{Q}_x^{(m)}\,, \qquad (4.132) \\ E_y^{(m+1)} &+ \frac{\Delta t^2}{2}\left(-\partial_x^2 E_y^{(m+1)} + \partial_{xy}E_x^{(m+1)}\right) + \chi^{21,0}E_x^{(m+1)} + \chi^{22,0}E_y^{(m+1)} + \chi^{23,0}E_z^{(m+1)} \\ &+ \Delta t\partial_x\left(\zeta^{31,0}E_x^{(m+1)} + \zeta^{32,0}E_y^{(m+1)} + \zeta^{33,0}E_z^{(m+1)}\right) = \widetilde{Q}_y^{(m)}\,, \qquad (4.133) \\ E_z^{(m+1)} &+ \frac{\Delta t^2}{2}\left(-\partial_x^2 E_z^{(m+1)} - \partial_y^2 E_z^{(m+1)}\right) + \chi^{31,0}E_x^{(m+1)} + \chi^{32,0}E_y^{(m+1)} + \chi^{33,0}E_z^{(m+1)} \\ &- \Delta t\partial_x\left(\zeta^{21,0}E_x^{(m+1)} + \zeta^{22,0}E_y^{(m+1)} + \zeta^{23,0}E_z^{(m+1)}\right) \\ &+ \Delta t\partial_y\left(\zeta^{11,0}E_x^{(m+1)} + \zeta^{12,0}E_y^{(m+1)} + \zeta^{13,0}E_z^{(m+1)}\right) = \widetilde{Q}_z^{(m)}\,, \qquad (4.134) \end{aligned}$$

où m désigne l'itération de la méthode. Les seconds membres sont donnés par :

$$\begin{aligned} \widetilde{Q}_x^{(m)} =& Q_x - (\chi^{11} - \chi^{11,0})E_x^{(m)} - (\chi^{12} - \chi^{12,0})E_y^{(m)} - (\chi^{13} - \chi^{13,0})E_z^{(m)} \\ &+ \Delta t\partial_y\left[\left(\zeta^{31} - \zeta^{31,0}\right)E_x^{(m)} + \left(\zeta^{32} - \zeta^{32,0}\right)E_y^{(m)} + \left(\zeta^{33} - \zeta^{33,0}\right)E_z^{(m)}\right]\,, \qquad (4.135) \\ \widetilde{Q}_y^{(m)} =& Q_y - (\chi^{21} - \chi^{21,0})E_x^{(m)} - (\chi^{22} - \chi^{22,0})E_y^{(m)} - (\chi^{23} - \chi^{23,0})E_z^{(m)} \\ &- \Delta t\partial_x\left[\left(\zeta^{31} - \zeta^{31,0}\right)E_x^{(m)} + \left(\zeta^{32} - \zeta^{32,0}\right)E_y^{(m)} + \left(\zeta^{33} - \zeta^{33,0}\right)E_z^{(m)}\right]\,, \qquad (4.136) \\ \widetilde{Q}_z^{(m)} =& Q_z - (\chi^{31} - \chi^{31,0})E_x^{(m)} - (\chi^{32} - \chi^{32,0})E_y^{(m)} - (\chi^{33} - \chi^{33,0})E_z^{(m)} \\ &+ \Delta t\partial_x\left[\left(\zeta^{21} - \zeta^{21,0}\right)E_x^{(m)} + \left(\zeta^{22} - \zeta^{22,0}\right)E_y^{(m)} + \left(\zeta^{23} - \zeta^{23,0}\right)E_z^{(m)}\right] \\ &- \Delta t\partial_y\left[\left(\zeta^{11} - \zeta^{11,0}\right)E_x^{(m)} + \left(\zeta^{12} - \zeta^{12,0}\right)E_y^{(m)} + \left(\zeta^{13} - \zeta^{13,0}\right)E_z^{(m)}\right]\,, \qquad (4.137) \end{aligned}$$

Afin de discrétiser le système (4.132)-(4.134), nous utilisons deux maillages décalés pour la discrétisation spatiale des quantités définies sur la grille. Cette technique d'usage courant dans les codes PIC électromagnétiques est héritée du schéma de Yee. Les champs sont discrétisés comme suit : $\rho_{i,j}$, $J_{z,i,j}$, $E_{z,i,j}$, $J_{x,i+1/2,j}$, $E_{x,i+1/2,j}$, $B_{y,i+1/2,j}$, $J_{y,i,j+1/2}$, $E_{y,i,j+1/2}$, $B_{x,i,j+1/2}$ et $B_{z,i+1/2,j+1/2}$. Les tenseurs χ et ζ sont stockés en (i,j) sauf pour χ_{11}, ζ_{11}, ζ_{21}, ζ_{31}, qui sont positionnés en

$(i+1/2,j)$, et χ_{22}, ζ_{12}, ζ_{22}, ζ_{32}, placés en $(i,j+1/2)$. Le prochain paragraphe est dédié à la discrétisation spatiale des équations (4.132)-(4.134).

4.3.2 Discrétisation spatiale de l'équation d'onde

La méthode itérative de Concus et Golub [96] est appliquée aux Eqs. (4.132)-(4.134). La composante suivant x, Eq. (4.132), devient

$$
\begin{aligned}
&E^{n+1}_{x,i+1/2,j} + \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(E^{n+1}_{y,i+1,j+1/2} - E^{n+1}_{y,i+1,j-1/2} - E^{n+1}_{y,i,j+1/2} + E^{n+1}_{y,i,j-1/2}\right)\\
&\quad - \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta y^2}\left(E^{n+1}_{x,i+1/2,j+1} - 2E^{n+1}_{x,i+1/2,j} + E^{n+1}_{x,i+1/2,j-1}\right) + \chi^{11,0}_{i+1/2}E^{n+1}_{x,i+1/2,j}\\
&\quad + \frac{1}{4}\left[\chi^{12,0}_{i}E^{n+1}_{y,i,j+1/2} + \chi^{12,0}_{i}E^{n+1}_{y,i,j-1/2} + \chi^{12,0}_{i+1}E^{n+1}_{y,i+1,j-1/2} + \chi^{12,0}_{i+1}E^{n+1}_{y,i+1,j+1/2}\right]\\
&\quad + \frac{1}{2}\chi^{13,0}_{i}E^{n+1}_{z,i,j} + \frac{1}{2}\chi^{13,0}_{i+1}E^{n+1}_{z,i+1,j} - \frac{\Delta t}{2\Delta y}\left[\zeta^{31,0}_{i+1/2}E^{n+1}_{x,i+1/2,j+1} - \zeta^{31,0}_{i+1/2}E^{n+1}_{x,i+1/2,j-1}\right]\\
&\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta y}\left[\zeta^{32,0}_{i}E^{n+1}_{y,i,j+1/2} + \zeta^{32,0}_{i+1}E^{n+1}_{y,i+1,j+1/2} - \zeta^{32,0}_{i}E^{n+1}_{y,i,j-1/2} - \zeta^{32,0}_{i+1}E^{n+1}_{y,i+1,j-1/2}\right]\\
&\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta y}\left[\zeta^{33,0}_{i+1}E^{n+1}_{z,i+1,j+1} + \zeta^{33,0}_{i}E^{n+1}_{z,i,j+1} - \zeta^{33,0}_{i+1}E^{n+1}_{z,i+1,j-1} - \zeta^{33,0}_{i}E^{n+1}_{z,i,j-1}\right]\\
&\quad = \widetilde{Q}_{x,i+1/2,j}. \qquad (4.138)
\end{aligned}
$$

La composante suivant y, Eq. (4.133), devient

$$
\begin{aligned}
&E^{n+1}_{y,i,j+1/2} - \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}\left(E^{n+1}_{y,i+1,j+1/2} - 2E^{n+1}_{y,i,j+1/2} + E^{n+1}_{y,i-1,j+1/2}\right)\\
&\quad + \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(E^{n+1}_{x,i+1/2,j+1} - E^{n+1}_{x,i-1/2,j+1} - E^{n+1}_{x,i+1/2,j} + E^{n+1}_{x,i-1/2,j}\right)\\
&\quad + \frac{\chi^{21,0}_{i}}{4}\left(E^{n+1}_{x,i-1/2,j} + E^{n+1}_{x,i+1/2,j} + E^{n+1}_{x,i-1/2,j+1} + E^{n+1}_{x,i+1/2,j+1}\right)\\
&\quad + \chi^{22,0}_{i}E^{n+1}_{y,i,j+1/2} + \frac{\chi^{23,0}_{i}}{2}(E^{n+1}_{z,i,j} + E^{n+1}_{z,i,j+1})\\
&\quad + \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left[\zeta^{31,0}_{i+1/2}(E^{n+1}_{x,i+1/2,j} + E^{n+1}_{x,i+1/2,j+1}) - \zeta^{31,0}_{i-1/2}(E^{n+1}_{x,i-1/2,j} + E^{n+1}_{x,i-1/2,j+1})\right]\\
&\quad + \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left[\zeta^{32,0}_{i+1}E^{n+1}_{y,i+1,j+1/2} - \zeta^{32,0}_{i-1}E^{n+1}_{y,i-1,j+1/2}\right]\\
&\quad + \frac{\Delta t}{4\Delta x}\left[\zeta^{33,0}_{i+1}(E^{n+1}_{z,i+1,j} + E^{n+1}_{z,i+1,j+1}) - \zeta^{33,0}_{i-1}(E^{n+1}_{z,i-1,j} + E^{n+1}_{z,i-1,j+1})\right]\\
&\quad = \widetilde{Q}_{y,i,j+1/2}. \qquad (4.139)
\end{aligned}
$$

La composante suivant z, Eq. (4.134), devient

$$
\begin{aligned}
&E_{z,i,j}^{n+1} - \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}\left(E_{z,i+1,j}^{n+1} - 2E_{z,i,j}^{n+1} + E_{z,i-1,j}^{n+1}\right) - \frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta y^2}\left(E_{z,i,j+1}^{n+1} - 2E_{z,i,j}^{n+1} + E_{z,i,j-1}^{n+1}\right) \\
&\quad + \frac{\chi_i^{31,0}}{2}\left(E_{x,i-1/2,j}^{n+1} + E_{x,i+1/2,j}^{n+1}\right) + \frac{\chi_i^{32,0}}{2}\left(E_{y,i,j-1/2}^{n+1} + E_{y,i,j+1/2}^{n+1}\right) + \chi_i^{33,0}E_{z,i,j}^{n+1} \\
&\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\zeta_{i+1/2}^{21,0}E_{x,i+1/2,j}^{n+1} - \zeta_{i-1/2}^{21,0}E_{x,i-1/2,j}^{n+1}\right) \\
&\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta x}\left[\zeta_{i+1}^{22,0}\left(E_{y,i+1,j-1/2}^{n+1} + E_{y,i+1,j+1/2}^{n+1}\right) - \zeta_{i-1}^{22,0}\left(E_{y,i-1,j+1/2}^{n+1} + E_{y,i-1,j-1/2}^{n+1}\right)\right] \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left(\zeta_{i+1}^{23,0}E_{z,i+1,j}^{n+1} - \zeta_{i-1}^{23,0}E_{z,i-1,j}^{n+1}\right) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{4\Delta y}\zeta_i^{11,0}\left(E_{x,i+1/2,j+1}^{n+1} + E_{x,i-1/2,j+1}^{n+1} - E_{x,i+1/2,j-1}^{n+1} - E_{x,i-1/2,j-1}^{n+1}\right) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{12,0}\left(E_{y,i,j+1/2}^{n+1} - E_{y,i,j-1/2}^{n+1}\right) + \frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{13,0}\left(E_{z,i,j+1}^{n+1} - E_{z,i,j-1}^{n+1}\right) \\
&\quad = \widetilde{Q}_{z,i,j}. \qquad (4.140)
\end{aligned}
$$

Les discrétisations centrées des seconds membres des Eqs. (4.138)-(4.140) sont données par

$$
\begin{aligned}
\tilde{Q}_{x,i+1/2,j}^{(m)} &= Q_{x,i+1/2,j} - (\chi_{i+1/2,j}^{11} - \chi_{i+1/2,j}^{11,0})E_{x,i+1/2,j}^{(m)} \\
&\quad - \frac{1}{4}\left[(\chi_{i,j}^{12} - \chi_i^{12,0})\left(E_{y,i,j+1/2}^{(m)} + E_{y,i,j-1/2}^{(m)}\right)\right. \\
&\quad \left.+(\chi_{i+1,j}^{12} - \chi_{i+1}^{12,0})\left(E_{y,i+1,j-1/2}^{(m)} + E_{y,i+1,j+1/2}^{(m)}\right)\right] - (\chi_{i,j}^{13} - \chi_{i,j}^{13,0})E_{z,i,j}^{(m)} \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2\Delta y}\left[\left(\zeta_{i+1/2,j+1}^{31} - \zeta_{i+1/2}^{31,0}\right)E_{x,i+1/2,j+1}^{(m)} - \left(\zeta_{i+1/2,j-1}^{31} - \zeta_{i+1/2}^{31,0}\right)E_{x,i+1/2,j-1}^{(m)}\right] \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2\Delta y}\left[\left(\zeta_{i,j+1/2}^{32} - \zeta_i^{32,0}\right)E_{y,i,j+1/2}^{(m)} + \left(\zeta_{i+1,j+1/2}^{32} - \zeta_{i+1}^{32,0}\right)E_{y,i+1,j+1/2}^{(m)}\right. \\
&\quad \left.- \left(\zeta_{i,j-1/2}^{32} - \zeta_i^{32,0}\right)E_{y,i,j-1/2}^{(m)} - \left(\zeta_{i+1,j-1/2}^{32} - \zeta_{i+1}^{32,0}\right)E_{y,i+1,j-1/2}^{(m)}\right] \\
&\quad + \frac{\Delta t}{4\Delta y}\left[\left(\zeta_{i+1,j+1}^{33} - \zeta_{i+1}^{33,0}\right)E_{z,i+1,j+1}^{(m)} + \left(\zeta_{i,j+1}^{33} - \zeta_i^{33,0}\right)E_{z,i,j+1}^{(m)}\right. \\
&\quad \left.- \left(\zeta_{i+1,j-1}^{33} - \zeta_{i+1}^{33,0}\right)E_{z,i+1,j-1}^{(m)} - \left(\zeta_{i,j-1}^{33} - \zeta_i^{33,0}\right)E_{z,i,j-1}^{(m)}\right], \qquad (4.141)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{Q}^{(m)}_{y,i,j+1/2} =& Q_{y,i,j+1/2} - \frac{1}{4}\left[\left(\chi^{21}_{i,j} - \chi^{21,0}_{i}\right)\left(E^{(m)}_{x,i-1/2,j} + E^{(m)}_{x,i+1/2,j}\right)\right. \\
&\left. + \left(\chi^{21}_{i,j+1} - \chi^{21,0}_{i}\right)\left(E^{(m)}_{x,i-1/2,j+1} + E^{(m)}_{x,i+1/2,j+1}\right)\right] - \left(\chi^{22}_{i,j+1/2} - \chi^{22,0}_{i}\right)E^{(m)}_{y,i,j+1/2} \\
&- \frac{1}{2}\left[\left(\chi^{23}_{i,j} - \chi^{23,0}_{i}\right)E^{(m)}_{z,i,j} + \left(\chi^{23}_{i,j+1} - \chi^{23,0}_{i}\right)E^{(m)}_{z,i,j+1}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left[\left(\zeta^{31}_{i+1/2,j} - \zeta^{31,0}_{i+1/2}\right)E^{(m)}_{x,i+1/2,j} + \left(\zeta^{31}_{i+1/2,j+1} - \zeta^{31,0}_{i+1/2}\right)E^{(m)}_{x,i+1/2,j+1}\right. \\
&\left. - \left(\zeta^{31}_{i-1/2,j} - \zeta^{31,0}_{i-1/2}\right)E^{(m)}_{x,i-1/2,j} - \left(\zeta^{31}_{i-1/2,j+1} - \zeta^{31,0}_{i-1/2}\right)E^{(m)}_{x,i-1/2,j+1}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left[\left(\zeta^{32}_{i+1,j+1/2} - \zeta^{32,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{y,i+1,j+1/2} - \left(\zeta^{32}_{i-1,j+1/2} - \zeta^{32,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{y,i-1,j+1/2}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{4\Delta x}\left[\left(\zeta^{33}_{i+1,j} - \zeta^{33,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{z,i+1,j} + \left(\zeta^{33}_{i+1,j+1} - \zeta^{33,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{z,i+1,j+1}\right. \\
&\left. - \left(\zeta^{33}_{i-1,j} - \zeta^{33,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{z,i-1,j} - \left(\zeta^{33}_{i-1,j+1} - \zeta^{33,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{z,i-1,j+1}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{Q}^{(m)}_{z,i,j} =& Q_{z,i,j} - \frac{1}{2}\left(\chi^{31}_{i,j} - \chi^{31,0}_{i}\right)\left(E^{(m)}_{x,i-1/2,j} + E^{(m)}_{x,i+1/2,j}\right) \\
&- \frac{1}{2}\left(\chi^{32}_{i,j} - \chi^{32,0}_{i}\right)\left(E^{(m)}_{y,i,j-1/2} + E^{(m)}_{y,i,j+1/2}\right) - \left(\chi^{33}_{i,j} - \chi^{33,0}_{i}\right)E^{(m)}_{z,i,j} \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x}\left[\left(\zeta^{21}_{i+1/2,j} - \zeta^{21,0}_{i+1/2}\right)E^{(m)}_{x,i+1/2,j} - \left(\zeta^{21}_{i-1/2,j} - \zeta^{21,0}_{i-1/2}\right)E^{(m)}_{x,i-1/2,j}\right] \\
&+ \frac{\Delta t}{4\Delta x}\left[\left(\zeta^{22}_{i+1,j-1/2} - \zeta^{22,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{y,i+1,j-1/2} + \left(\zeta^{22}_{i+1,j+1/2} - \zeta^{22,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{y,i+1,j+1/2}\right. \\
&\left. - \left(\zeta^{22}_{i-1,j-1/2} - \zeta^{22,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{y,i-1,j-1/2} - \left(\zeta^{22}_{i-1,j+1/2} - \zeta^{22,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{y,i-1,j+1/2}\right] \\
&+ \frac{\Delta t}{2\Delta x}\left[\left(\zeta^{23}_{i+1,j} - \zeta^{23,0}_{i+1}\right)E^{(m)}_{z,i+1,j} - \left(\zeta^{23}_{i-1,j} - \zeta^{23,0}_{i-1}\right)E^{(m)}_{z,i-1,j}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{4\Delta y}\left[\left(\zeta^{11}_{i+1/2,j+1} - \zeta^{11,0}_{i+1/2}\right)E^{(m)}_{x,i+1/2,j+1} + \left(\zeta^{11}_{i-1/2,j+1} - \zeta^{11,0}_{i-1/2}\right)E^{(m)}_{x,i-1/2,j+1}\right. \\
&\left. - \left(\zeta^{11}_{i+1/2,j-1} - \zeta^{11,0}_{i+1/2}\right)E^{(m)}_{x,i+1/2,j-1} - \left(\zeta^{11}_{i-1/2,j-1} - \zeta^{11,0}_{i-1/2}\right)E^{(m)}_{x,i-1/2,j-1}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta y}\left[\left(\zeta^{12}_{i,j+1/2} - \zeta^{12,0}_{i}\right)E^{(m)}_{y,i,j+1/2} - \left(\zeta^{12}_{i,j-1/2} - \zeta^{12,0}_{i}\right)E^{(m)}_{y,i,j-1/2}\right] \\
&- \frac{\Delta t}{2\Delta y}\left[\left(\zeta^{13}_{i,j+1} - \zeta^{13,0}_{i}\right)E^{(m)}_{z,i,j+1} - \left(\zeta^{13}_{i,j-1} - \zeta^{13,0}_{i}\right)E^{(m)}_{z,i,j-1}\right].
\end{aligned}
$$

Nous effectuons une transformée de Fourier suivant y des équations définies ci-dessus. Pour N_y mailles, on doit résoudre N_y équations mono-dimensionnelles. Et si l'on considère N_x mailles suivant x, chaque équation prend la forme d'un système de $6N_x$ équations. Ces systèmes ont une structure diagonale par bande et sont résolus avec une méthode LU, en utilisant les routines bandec et banbks de la bibliothèque *Numerical Recipes* [97]. Les transformées de Fourier des Eqs. (4.138)-(4.140) sont données en Annexe B.

4.3.3 Correction de la charge

Notre façon de déterminer les densités de charge et de courant [Eqs. (4.76) et (4.102)] ne satisfait pas à la conservation de la charge ; l'équation de Poisson n'est donc pas vérifiée. Il s'agit d'un défaut récurrent des premiers codes PIC électromagnétiques [21] qui peut être corrigé par un schéma de projection plus sophistiqué [46, 47]. Une alternative bien connue, qui sera mise en oeuvre ici, consiste à corriger la partie électrostatique du champ électrique $\mathbf{E}_{n+1}$ solution de Eq. (4.108) de telle sorte qu'il satisfasse l'équation de Poisson [21]. Le principe est identique à celui de la correction de Boris, mais modifié par l'algorithme prédicteur-correcteur. En utilisant des quantités normalisées, la loi de Gauss s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^*_{n+1} = \rho_{n+1}\,, \tag{4.142}$$

où $\mathbf{E}^*_{n+1}$ représente le champ électrique recherché. En utilisant $\rho_{n+1} = \widetilde{\rho}_{n+1} - \nabla \cdot \left(\chi \mathbf{E}^*_{n+1}\right)$, on en déduit

$$\nabla \cdot \left[(1+\chi)\mathbf{E}^*_{n+1}\right] = \widetilde{\rho}_{n+1}\,. \tag{4.143}$$

En prenant maintenant la divergence de Eq. (4.108) nous obtenons

$$\nabla \cdot \left[(1+\chi)\mathbf{E}_{n+1}\right] = \nabla \cdot \mathbf{Q} \tag{4.144}$$

où, en général $\nabla \cdot \mathbf{Q} \neq \widetilde{\rho}_{n+1}$. Dans un premier temps on peut imaginer introduire un potentiel ψ tel que $\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q} - \nabla\psi$ satisfasse $\nabla \cdot \mathbf{Q}^* = \widetilde{\rho}_{n+1}$, mais Hewett et Langdon ont montré que cette correction entraîne des effets aberrants [38]. On peut déterminer une correction plus physique avec la forme suivante [38]

$$\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q} - (\mathbf{I} + \chi)\nabla\psi\,, \tag{4.145}$$

d'où l'on déduit

$$\nabla \cdot \left[(1+\chi)\nabla\psi\right] = \nabla \cdot \mathbf{Q} - \widetilde{\rho}_{n+1}\,, \tag{4.146}$$

ce qui est équivalent à

$$\nabla \cdot \left[(1+\chi)\nabla\psi\right] = \nabla \cdot \left[(1+\chi)\mathbf{E}_{n+1}\right] - \widetilde{\rho}_{n+1}\,, \tag{4.147}$$

où la seule inconnue est le champ scalaire ψ. Finalement, le champ corrigé $\mathbf{E}^*_{n+1}$ qui vérifie Eq. (4.143) est donné par $\mathbf{E}^*_{n+1} = \mathbf{E}_{n+1} - \nabla\psi$.

A présent, nous allons détailler la procédure utilisée pour résoudre l'équation (4.147) dans le cas d'une géométrie bi-dimensionnelle. Comme pour l'équation d'onde, nous utilisons la méthode itérative de Concus et Golub [96], qui s'écrit ici

$$-\nabla \cdot \left[(1+\chi^0)\nabla\psi^{(m+1)}\right] = \rho - \nabla \cdot \left[(1+\chi)\mathbf{E}_{n+1}\right] + \nabla \cdot \left[(\chi-\chi^0)\nabla\psi^{(m)}\right] \tag{4.148}$$

où $\chi^0 = \left[\chi^{kl,0}\right]_{1\leq k,l\leq 3}$ désigne la moyenne suivant y du tenseur de susceptibilité χ avec $\chi^{kl,0} =< \chi^{kl} >_y$. $\mathbf{E}_{n+1}$ est la solution de l'équation d'onde (4.108) et m désigne l'itération. En oubliant ce dernier indice, nous discrétisons l'équation ci-dessus sous la forme

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{\Delta x}\left[\left(1+\chi^{11,0}_{i+1/2,j}\right)\frac{1}{\Delta x}(\psi_{i+1,j}-\psi_{i,j})-\left(1+\chi^{11,0}_{i-1/2,j}\right)\frac{1}{\Delta x}(\psi_{i,j}-\psi_{i-1,j})\right]\\
&-\frac{1}{2\Delta x}\left[\chi^{12,0}_{i+1,j}\frac{1}{2\Delta y}(\psi_{i+1,j+1}-\psi_{i+1,j-1})-\chi^{12,0}_{i-1,j}\frac{1}{2\Delta y}(\psi_{i-1,j+1}-\psi_{i-1,j-1})\right]\\
&-\frac{1}{2\Delta y}\left[\chi^{21,0}_{i,j+1}\frac{1}{2\Delta x}(\psi_{i+1,j+1}-\psi_{i-1,j+1})-\chi^{21,0}_{i,j-1}\frac{1}{2\Delta x}(\psi_{i+1,j-1}-\psi_{i-1,j-1})\right]\\
&-\frac{1}{\Delta y}\left[\left(1+\chi^{22,0}_{i,j+1/2}\right)\frac{1}{\Delta y}(\psi_{i,j+1}-\psi_{i,j})-\left(1+\chi^{22,0}_{i,j-1/2}\right)\frac{1}{\Delta y}(\psi_{i,j}-\psi_{i,j-1})\right]\\
&\qquad = S_{i,j}\,, \qquad (4.149)
\end{aligned}$$

où le terme source S est défini par

$$\begin{aligned}
S =&\partial_x\left[(\chi^{11}-\chi^{11,0})\partial_x\psi+(\chi^{12}-\chi^{12,0})\partial_y\psi\right]\\
&+\partial_y\left[(\chi^{21}-\chi^{21,0})\partial_x\psi+(\chi^{22}-\chi^{22,0})\partial_y\psi\right]+\rho\\
&-\partial_x\left[(1+\chi^{11})E_x\right]-\partial_x\left(\chi^{12}E_y\right)-\partial_x\left(\chi^{13}E_z\right)\\
&-\partial_y\left(\chi^{21}E_x\right)-\partial_y\left[(1+\chi^{22})E_y\right]-\partial_y\left(\chi^{23}E_z\right). \qquad (4.150)
\end{aligned}$$

Une discrétisation spatiale centrée de (4.150) est donnée par

$$
\begin{aligned}
S_{i,j} = &+ \frac{1}{\Delta x}\left[(\chi^{11}_{i+1/2,j} - \chi^{11,0}_{i+1/2})\frac{1}{\Delta x}(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}) - (\chi^{11}_{i-1/2,j} - \chi^{11,0}_{i-1/2})\frac{1}{\Delta x}(\psi_{i,j} - \psi_{i-1,j})\right] \\
&+ \frac{1}{2\Delta x}\left[(\chi^{12}_{i+1,j} - \chi^{12,0}_{i+1})\frac{1}{2\Delta y}(\psi_{i+1,j+1} - \psi_{i+1,j-1})\right. \\
&\left.-(\chi^{12}_{i-1,j} - \chi^{12,0}_{i-1})\frac{1}{2\Delta y}(\psi_{i-1,j+1} - \psi_{i-1,j-1})\right] \\
&+ \frac{1}{2\Delta y}\left[(\chi^{21}_{i,j+1} - \chi^{21,0}_{i})\frac{1}{2\Delta x}(\psi_{i+1,j+1} - \psi_{i-1,j+1})\right. \\
&\left.-(\chi^{21}_{i,j-1} - \chi^{21,0}_{i})\frac{1}{2\Delta x}(\psi_{i+1,j-1} - \psi_{i-1,j-1})\right] \\
&+ \frac{1}{\Delta y}\left[(\chi^{22}_{i,j+1/2} - \chi^{22,0}_{i})\frac{1}{\Delta y}(\psi_{i,j+1} - \psi_{i,j}) - (\chi^{22}_{i,j-1/2} - \chi^{22,0}_{i})\frac{1}{\Delta y}(\psi_{i,j} - \psi_{i,j-1})\right] \\
&- \frac{1}{\Delta x}\left[(1 + \chi^{11}_{i+1/2,j})E_{x,i+1/2,j} - (1 + \chi^{11}_{i-1/2,j})E_{x,i-1/2,j}\right] \\
&- \frac{1}{2\Delta x}\left[\frac{\chi^{12}_{i+1,j}}{2}\left(E_{y,i+1,j+1/2} + E_{y,i+1,j-1/2}\right) - \frac{\chi^{12}_{i-1,j}}{2}\left(E_{y,i-1,j+1/2} + E_{y,i-1,j-1/2}\right)\right] \\
&- \frac{1}{2\Delta x}\left[\chi^{13}_{i+1,j}E_{z,i+1,j} - \chi^{13}_{i-1,j}E_{z,i-1,j}\right] \\
&- \frac{1}{2\Delta y}\left[\frac{\chi^{21}_{i,j+1}}{2}\left(E_{x,i+1/2,j+1} + E_{x,i-1/2,j+1}\right) - \frac{\chi^{21}_{i,j-1}}{2}\left(E_{x,i+1/2,j-1} + E_{x,i-1/2,j-1}\right)\right] \\
&- \frac{1}{\Delta y}\left[\left(1 + \chi^{22}_{i,j+1/2}\right)E_{y,i,j+1/2} - \left(1 + \chi^{22}_{i,j-1/2}\right)E_{y,i,j-1/2}\right] \\
&- \frac{1}{2\Delta y}\left[\chi^{23}_{i,j+1}E_{z,i,j+1} - \chi^{23}_{i,j-1}E_{z,i,j-1}\right] \\
&+ \rho_{i,j}
\end{aligned}
\tag{4.151}
$$

On effectue une transformation de Fourier suivant y sur les équations ci-dessus. En prenant N_y mailles on doit résoudre N_y équations mono-dimensionnelles. Dans le cas de N_x mailles suivant x, chaque équation prend la forme d'un système de $2N_x$ équations. Ces systèmes ont une structure diagonale par bande et sont résolus avec une technique LU [97].

4.3.4 Conditions aux limites électromagnétiques absorbantes ou injectantes

Dans cette section nous décrivons la mise en œuvre de conditions aux limites injectantes ou absorbantes aux deux bords $\pm x$ de la boîte de simulation. Les ondes électromagnétiques incidente et diffusée peuvent être représentées comme

une somme d'onde polarisées linéairement et ne dépendent que du terme de phase $\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t$. Les ondes polarisées dans le plan (x,y) vérifient alors

$$E_y^{inc} = B_z^{inc}\cos\theta_i\,, \tag{4.152}$$

$$E_y^{scat} = -B_z^{scat}\cos\theta_s\,, \tag{4.153}$$

où θ_i et θ_s désignent respectivement les angles d'incidence et de réflexion. Le champ total devient

$$E_y^{tot} = E_y^{scat} + E_y^{inc} \tag{4.154}$$

$$= -B_z^{tot}\cos\theta_s + \frac{E_y^{inc}}{\cos\theta_i}\left(\cos\theta_i + \cos\theta_s\right) \tag{4.155}$$

En discrétisant avec des différences finies centrées en espace et en temps, on obtient

$$\frac{1}{4}\left(E_{y,1,j+1/2}^{n+1} + E_{y,0,j+1/2}^{n+1} + E_{y,1,j+1/2}^{n} + E_{y,0,j+1/2}^{n}\right) = -B_{z,1/2,j+1/2}^{n+1/2}\cos\theta_s$$
$$+ E_{y,1/2,j+1/2}^{inc,n+1/2}\frac{\left(\cos\theta_i + \cos\theta_s\right)}{\cos\theta_i}\,. \tag{4.156}$$

En utilisant l'équation de Maxwell Faraday, on peut exprimer $E_{y,0,j+1/2}^{n+1}$ comme une fonction des valeurs du champ aux points internes du maillage et aux instants précédents. Nous avons

$$E_{y,0,j+1/2}^{n+1} = AE_{y,1,j+1/2}^{n+1}\left(\frac{2\,\Delta t}{\Delta x}\cos\theta_s - 1\right) - \frac{2A\Delta t}{\Delta y}\cos\theta_s\left(E_{x,1/2,j+1}^{n+1} - E_{x,1/2,j}^{n+1}\right)$$
$$- 4A\cos\theta_s B_{z,1/2,j+1/2}^{n-1/2} + \frac{2A\Delta t}{\Delta x}\cos\theta_s\left(\bar{\bar{E}}_{y,1,j+1/2}^{n-1} - \bar{\bar{E}}_{y,0,j+1/2}^{n-1}\right)$$
$$- \frac{2A\Delta t}{\Delta y}\cos\theta_s\left(\bar{\bar{E}}_{x,1/2,j+1}^{n-1} - \bar{\bar{E}}_{x,1/2,j}^{n-1}\right) + \frac{4A}{\cos\theta_i}\left(\cos\theta_i + \cos\theta_s\right)E_{y,1/2,j+1/2}^{inc,n+1/2}$$
$$- A\left(E_{y,1,j+1/2}^{n} + E_{y,0,j+1/2}^{n}\right)\,, \tag{4.157}$$

où le coefficient A est donné par

$$A = \left(1 + 2\frac{\Delta t}{\Delta x}\cos\theta_s\right)^{-1}\,. \tag{4.158}$$

Une équation similaire peut être établie pour les ondes polarisées suivant z, qui s'écrit

$$E_{z,0,j}^{n+1} = BE_{z,1,j}^{n+1}\left(\frac{2\Delta t}{\Delta x\cos\theta_s} - 1\right)$$
$$- B(E_{z,0,j}^{n} + E_{z,1,j}^{n}) + \frac{4B}{\cos\theta_s}B_{y,1/2,j}^{n-1/2} + \frac{2B\Delta t}{\Delta x\cos\theta_s}\left(\bar{\bar{E}}_{z,1,j}^{n-1} - \bar{\bar{E}}_{z,0,j}^{n-1}\right)$$
$$+ 4BE_{z,1/2,j}^{inc,n+1/2}\left(1 + \frac{\cos\theta_s}{\cos\theta_i}\right)\,, \tag{4.159}$$

où le coefficient B est donné par

$$B = \left(1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x \cos\theta_s}\right)^{-1} . \tag{4.160}$$

Soulignons que les équations précédentes ne s'appliquent que dans le vide. Pour vérifier cette hypothèse on applique les conditions aux limites sur les particules quelques mailles avant les limites électromagnétiques du domaine de calcul.

4.4 Analyse numérique de la méthode implicite directe

4.4.1 Relation de dispersion d'une onde électromagnétique dans le vide

Notre objectif ici est de quantifier l'erreur sur la vitesse de phase et l'amortissement des ondes électromagnétiques en fonction des pas d'espace et de temps. En particulier, nous montrerons que le paramètre θ_f permet d'ajuster l'amortissement d'une onde électromagnétique donnée.

En combinant les équations de Maxwell-Ampère (4.69) et de Maxwell-Faraday (4.70) pour une onde se propageant dans le vide, on obtient l'équation d'onde suivante

$$\mathbf{E}_{n+1} = 2\mathbf{E}_n - \mathbf{E}_{n-1} - \frac{c^2\Delta t^2}{2}\nabla\times\nabla\times\left(\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1}\right) . \tag{4.161}$$

Le terme filtré temporellement fait intervenir le paramètre d'amortissement ajustable θ_f [Eq. (4.72)] et peut être développé sous la forme

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} = \mathbf{E}_{n+1} + \frac{\theta_f}{2}\mathbf{E}_n + \left(1-\frac{\theta_f}{2}\right)^2\mathbf{E}_{n-1} + \left(1-\frac{\theta_f}{2}\right)^2\frac{\theta_f}{2}\mathbf{E}_{n-2} \\ + \left(1-\frac{\theta_f}{2}\right)^2\left(\frac{\theta_f}{2}\right)^2\mathbf{E}_{n-3} + \dots\end{aligned} \tag{4.162}$$

Dans une géomètrie 2-D, en prenant un champ électrique de la forme $\mathbf{E}_n = \mathbf{E}_0\Phi(x,y)z^n$, avec $z = \exp(-i\omega\Delta t)$ et $i = \sqrt{-1}$, Eq. (4.162) devient

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} = \mathbf{E}_0\Phi(x,y)\Bigg\{z^{-1}\left[\left(1-\frac{\theta_f}{2}\right)^2 + \frac{\theta_f}{2}z + z^2\right] \\ + \left(1-\frac{\theta_f}{2}\right)^2\frac{\theta_f}{2}z^{-2}\left[1 + \frac{\theta_f}{2}z^{-1} + \left(\frac{\theta_f}{2}\right)^2 z^{-2} + \dots\right]\Bigg\}z^n .\end{aligned} \tag{4.163}$$

où le paramètre d'amortissement ajustable $\theta_f \in [0,1]$. En simplifiant la somme dans le second membre de Eq. (4.163) nous obtenons

$$\mathbf{E}_{n+1} + \bar{\bar{\mathbf{E}}}_{n-1} = \mathbf{E}_0 \Phi(x,y) \Bigg\{ z^{-1} \left[\left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 + \frac{\theta_f}{2} z + z^2 \right] + \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 \frac{\theta_f}{2} \frac{2z^{-1}}{2z - \theta_f} \Bigg\} z^n \,. \tag{4.164}$$

On suppose que l'onde électromagnétique est polarisée dans le plan (x,y) avec une dépendance harmonique $\Phi(x,y) = \exp\left[i(k_x x + k_y y)\right]$. En substituant l'Eq. (4.164) dans l'Eq. (4.161) puis en discrétisant spatialement le laplacien, on obtient aisément le pôlynome de degré trois suivant

$$z^2 = 2z - 1 - \left\{ \left[\left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 + \frac{\theta_f}{2} z + z^2 \right] + \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 \frac{\theta_f}{2z - \theta_f} \right\} \frac{\Omega^2}{2} \,, \tag{4.165}$$

où nous avons introduit

$$\Omega^2 = 4 \left\{ \frac{c^2 \Delta t^2}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k_x \Delta x}{2}\right) + \frac{c^2 \Delta t^2}{\Delta y^2} \sin^2\left(\frac{k_y \Delta y}{2}\right) \right\} . \tag{4.166}$$

L'Eq. (4.165) se simplifie en

$$z^3(2 + \Omega^2) - z^2(4 + \theta_f) + z\left[2 + \Omega^2(1 - \theta_f) + 2\theta_f\right] - \theta_f = 0 \,. \tag{4.167}$$

Examinons pour commencer le cas particulier $\theta_f = 0$. Les racines sont solutions de

$$z^2(2 + \Omega^2) - 4z + (2 + \Omega^2) = 0 \tag{4.168}$$

Le discriminant $\Delta = 4 - (2 + \Omega^2)^2$ étant toujours négatif, on obtient les racines $z_\pm = (2 \pm i\sqrt{-\Delta})/(2 + \Omega^2)$, qui satisfont à $|z_+| = |z_-| = 1$. Nous avons ainsi démontré l'absence d'amortissement lorsque $\theta_f = 0$. La figure 4.1 représente la vitesse de phase normalisée $v_\phi = \frac{\Re\omega}{kc}$ (où $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$) pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y$. L'erreur de phase croît lorsque Δx ou/et $\Delta t/\Delta x$ augmentent. Une valeur $c\Delta t/\Delta x > 1$, qui viole la contrainte de stabilité d'un schéma explicite, implique donc un pas spatial modéré $k_x \Delta x \lesssim 0.38$ ($c\Delta t/\Delta x = 1.27$) pour éviter une erreur sur la vitesse de phase trop élevée ($> 5\%$). Notons que celle-ci peut donner lieu à un rayonnement Cerenkov artificiel, et donc au ralentissement de particules chargées relativistes [98].

Traitons à présent le cas $\theta_f \neq 0$. Les figures 4.2 et 4.3 représentent la vitesse de phase normalisée v_ϕ/c (gauche) et le taux d'amortissement $\Im\omega\Delta t$ (droite) de la racine la moins amortie de Eq. (4.167) comme des fonctions de $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$ avec $\theta_f = 1$. Des coupes de ces deux quantités dans le plan $k_y = 0$ sont respectivement

représentées sur les figures 4.4 et 4.5. Sans surprise, l'erreur sur la vitesse de phase augmente lorsque Δx et $\Delta t/\Delta x$ croissent. Pour $\theta_f = 1$, un rapport $c\Delta t/\Delta x > 1$ implique donc un pas spatial réduit $k_x\Delta x \lesssim 0.28$ ($c\Delta t/\Delta x = 1.27$) pour conserver une erreur sur la vitesse de phase inférieure à 5%. Dans ce cas le taux d'amortissement, qui augmente aussi avec Δx et $\Delta t/\Delta x$, s'avère trop important pour des applications qui reposent sur la propagation d'une onde électromagnétique sur plusieurs longueurs d'onde. Par exemple, si l'on suppose $k_x\Delta x = 0.2$ et $c\Delta t/\Delta x = 1$, un temps de propagation typique de $200\Delta t$ requiert $|\Im\omega|\Delta t < 2.5 \times 10^{-4}$ pour que la dissipation numérique soit quasi-négligeable ($< 5\%$).Comme on le constate dans la Fig. 4.5 (droite), cette condition ne peut pas être satisfaite lorsque $\theta_f = 1$, ce qui plaide une fois de plus en faveur d'un schéma avec amortissement ajustable pour une modélisation précise de l'interaction laser-plasma.

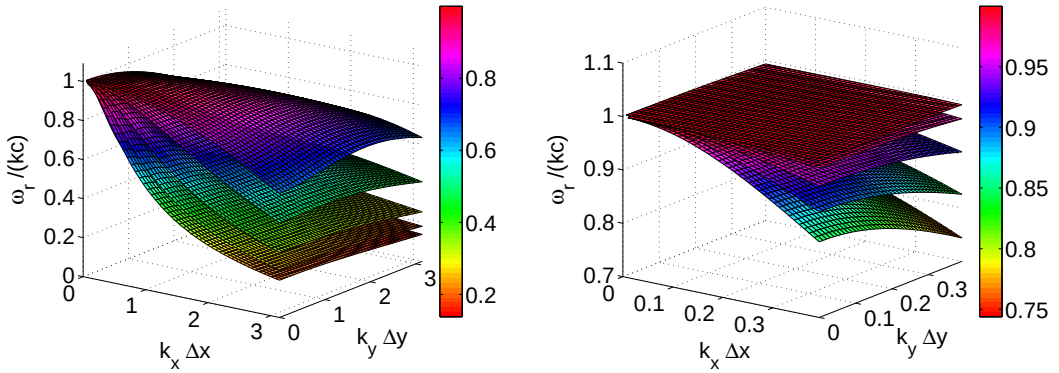


FIGURE 4.1 – Vitesse de phase de la racine la moins amortie de Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas) et $\theta_f = 0$. Un domaine $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$ plus étroit est représenté à droite.

4.4.2 Relation de dispersion électrostatique du plasma discrétisé en espace et en temps

Nous allons maintenant analyser la relation de dispersion numérique des fluctuations électroniques, d'un plasma Maxwellien, uniforme, non-relativiste avec un fond neutralisant fixe. De même que dans la première partie nous adoptons le formalisme de Langdon [99, 36, 37, 100], qui prend en compte des pas d'espace et de temps finis, et qui se prête à toute discrétisation temporelle de l'équation de Lorentz. On suppose un nombre infini de macro-particules, ce qui équivaut à une fonction de distribution continue en vitesses. Dans ce cadre, comme expliqué dans l'annexe A, le schéma implicite direct avec amortissement ajustable peut être facilement pris en compte. La relation de dispersion reliant la pulsation

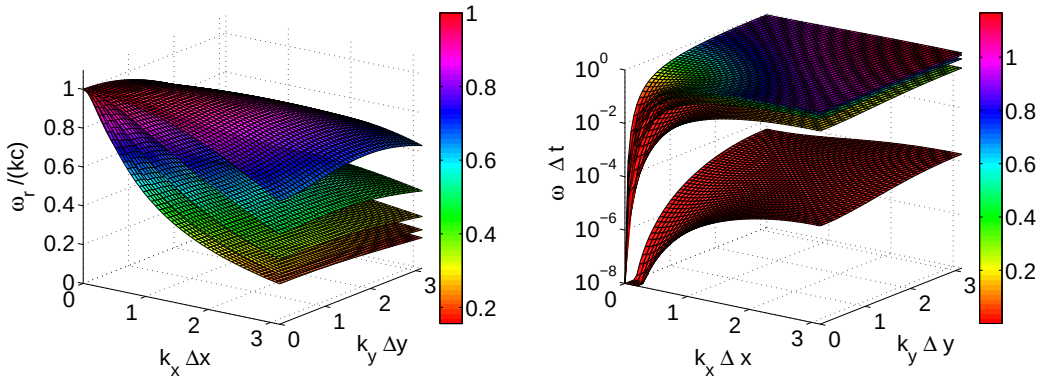


FIGURE 4.2 – Vitesse de phase (à gauche) et taux d'amortissement $\Im\omega\Delta t$ (à droite) de la racine la moins amortie de l'Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas à gauche, et de bas en haut à droite) avec $\theta_f = 1$.

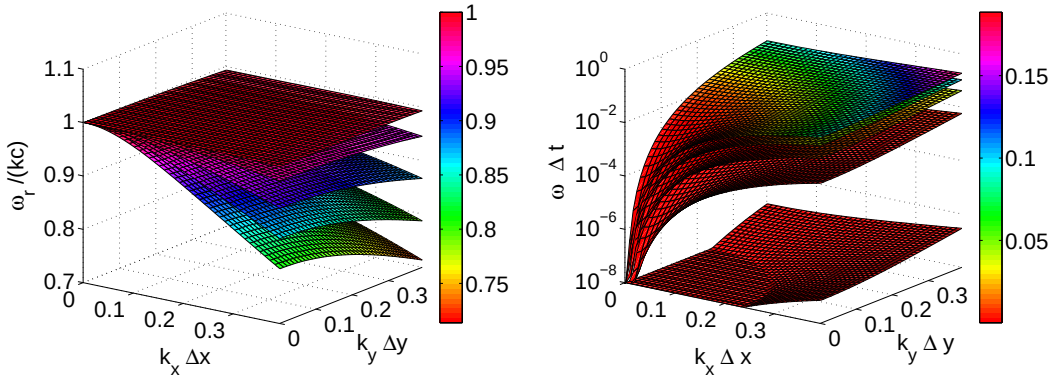


FIGURE 4.3 – Identique à la Fig. 4.2 mais sur un domaine $(k_x\Delta x, k_y\Delta y)$ plus étroit.

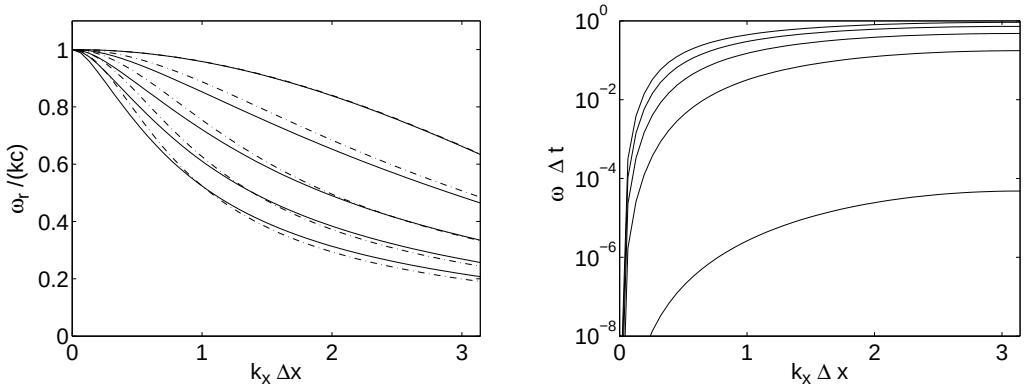


FIGURE 4.4 – Vitesse de phase (à gauche) et taux d'amortissement $\Im\omega\Delta t$ (à droite) de la racine la moins amortie de l'Eq. (4.167) en fonction de $(k_x\Delta x)$, pour différentes valeurs de $c\Delta t/\Delta x = c\Delta t/\Delta y \in \{0.05, 0.66, 1.28, 1.9, 2.5\}$ (de haut en bas à gauche, et de bas en haut à droite) avec $\theta_f = 1$. La vitesse de phase sans amortissement ($\theta_f = 0$) est représentée en pointillés.

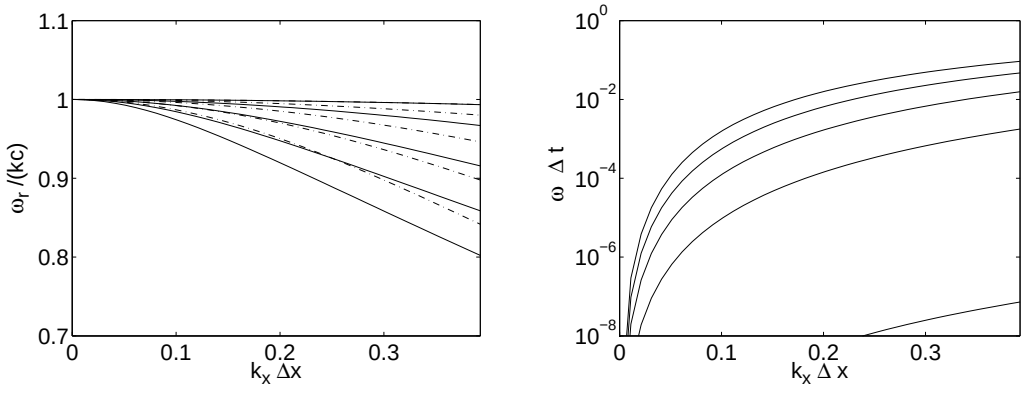


FIGURE 4.5 – Identique à la Fig. 4.4 mais sur un intervalle $(k_x\Delta x)$ plus étroit.

complexe ω au nombre d'onde réel k s'écrit

$$1+\frac{(\Delta x/\lambda_D)^2}{(k\Delta x)^2\left[\frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2}\right]^2}\sum_{p=-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\sin\left(k_p\Delta x/2\right)}{k_p\Delta x/2}\right]^{2m+2}\frac{\sin(k_p\Delta x)}{k_p\Delta x}\sum_{q=-\infty}^{+\infty}\left[1+\xi_q\mathcal{Z}(\xi_q)\right]$$
$$+\frac{(\omega_p\Delta t)^2/2}{(k\Delta x)^2\left[\frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2}\right]^2}\sum_{p=-\infty}^{+\infty}(k_p\Delta x)^2\left[\frac{\sin\left(k_p\Delta x/2\right)}{k_p\Delta x/2}\right]^{2m+2}\frac{\sin(k_p\Delta x)}{k_p\Delta x}\mathcal{S}(\theta_f)=0\,, \tag{4.169}$$

où m est l'ordre de la fonction de forme [21]. $k_p = k-2\pi p/\Delta x$ et $\omega_q = \omega-2\pi q/\Delta t$ sont le nombre d'onde et la pulsation auxquels s'ajoutent des multiples du mode de grille respectif. $\mathcal{Z}$ désigne la fonction de Fried et Conte [48] dont l'argument est $\xi_q = \omega_q/\sqrt{2}k_pv_t$ (avec v_t la vitesse thermique électronique). De plus, nous avons posé la fonction $\mathcal{S}$ telle que

$$\mathcal{S}(\theta_f)=\sum_{s=0}^{+\infty}\frac{e^{i(\omega/\omega_p)s(\omega_p\Delta t)}}{(2/\theta_f)^s}e^{-\frac{1}{2}(\lambda_D/\Delta x)^2s^2(k\Delta x)^2(\omega_p\Delta t)^2}\,, \tag{4.170}$$

avec la valeur $\mathcal{S}(0)=1$. Nous avons résolu numériquement Eq. (4.169) en utilisant le solveur non-linéaire STRCNE développé dans la Réf. [50] et l'algorithme de la Réf. [51] pour calculer la fonction $\mathcal{Z}$. Nous restreignons l'analyse qui suit à des systèmes caractérisés par une résolution grossière de la longueur de Debye ($\Delta x/\lambda_D > 1$), ce qui est courant dans la simulation à grande échelle de plasmas de densité élevée.

La figure 4.6 montre la dépendance en k de la pulsation complexe du mode le plus instable solution de Eq. (4.169), pour $\theta_f = 1$, $\omega_p\Delta t = 2$ et plusieurs valeurs de $\Delta x/\lambda_D$. Pour $\Delta x/\lambda_D = 32$ (*i.e.*, $v_t\Delta t/\Delta x = 0.06$), l'essentiel du spectre en k est amorti sauf pour une région instable limitée autour de $k\Delta x \sim 2.6$ avec un taux de croissance maximal $\Im\omega/\omega_p \sim 0.011$. L'instabilité constatée est due à un effet d'aliasing associé à la discrétisation spatiale. Comme nous l'avons vu en 2.2, ce phénomène[21] affecte les simulations PIC dès que $\Delta x/\lambda_D \gg 1$, entraînant une croissance non physique de l'énergie des champs et le chauffage du plasma. Cette instabilité provient du couplage des multiples du mode de grille avec le mode plasma électronique dans Eq. (4.169). A grand pas de temps ($i.e\omega_p\Delta t > 1$) la dépendance de la partie réelle de la pulsation en fonction de k n'est pas très physique : $\Re\omega$ est sensiblement inférieur à ω_p pour $k = 0$ et s'effondre lorsque k croît. Comme on le constate dans Fig. 4.6, réduire $\Delta x/\lambda_D$ conduit à une stabilisation complète du système avec un déplacement du mode dominant vers les petites valeurs de k. Pour $\Delta x/\lambda_D = 4$ (*i.e.*, $v_t\Delta t/\Delta x = 0.5$), le mode le moins amorti est localisé en $k\Delta x = 0.76$ avec $\Im\omega/\omega_p \sim -0.1$. Ce déplacement du mode dominant vers les petits nombres d'onde indique une transition d'un régime dominé par la discrétisation spatiale vers un régime dominé par la discrétisation temporelle. Les caractéristiques du mode dominant en fonction du ratio $\Delta x/\lambda_D \gg 1$

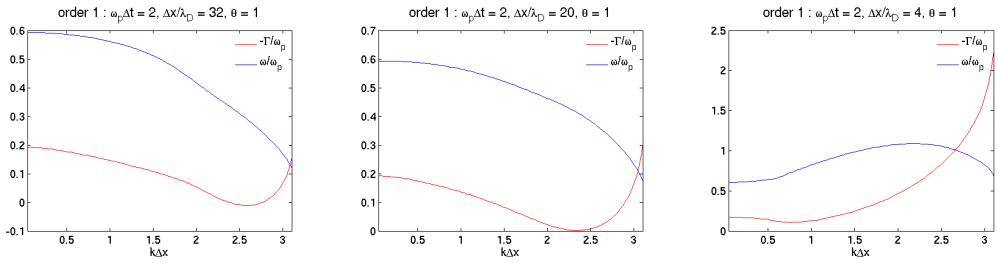


FIGURE 4.6 – Partie réelle de la pulsation (en bleu) et taux de croissance (en rouge) en fonction de $k\Delta x$ pour le mode dominant solution de Eq. (4.169) avec $\omega_p\Delta t = 2$, $\theta_f = 1$ et un facteur de forme linéaire ($m = 1$) : $\Delta x/\lambda_D = 32$ (à gauche), 20 (au centre) et 4 (à droite).

$\Delta x/\lambda_D$	14.3	22.6	32	64
linéaire	-0.024	3.3×10^{-3}	0.011	0.01
	(2.11)	(2.42)	(2.58)	(2.85)
quadratique	-0.04	-0.015	-3.7×10^{-3}	2.8×10^{-3}
	(1.96)	(2.30)	(2.48)	(2.70)
cubique	-0.039	-0.018	-8.6×10^{-3}	-2×10^{-4}
	(1.84)	(2.14)	(2.36)	(2.67)

TABLE 4.1 – Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $\Delta x/\lambda_D$ et de l'ordre du facteur de forme pour $\omega_p\Delta t = 2$ et $\theta_f = 1$.

et de l'ordre du facteur de forme sont résumées dans le tableau 4.1 pour $\theta_f = 1$ et $\omega_p\Delta t = 2$. L'influence bénéfique d'un schéma d'interpolation d'ordre élevé est clairement mise en évidence : le système est stabilisé jusqu'à $\Delta x/\lambda_D = 32$ avec un facteur de forme quadratique, et $\Delta x/\lambda_D = 64$ avec un facteur de forme cubique. Par ailleurs, le mode dominant de plus en plus amorti voit son nombre d'onde diminuer.

Un lien entre les calculs actuels et des résultats de simulation implicite précédemment publiés [82, 86] est fourni par les tables 4.2 et 4.3. Celles-ci soulignent l'influence du ratio $v_t\Delta t/\Delta x = \omega_p\Delta t/(\Delta x/\lambda_D)$ et du paramètre d'amortissement (pour un pas de temps $\omega_p\Delta t = 2$) sur le mode dominant. De nombreuses simulations PIC implicites électrostatiques utilisant le schéma D_1 (*i.e.*, $\theta_f = 1$) et un facteur de forme linéaire ont permis de mettre en évidence le régime suivant pour lequel l'énergie est correctement conservée [82, 86] :

$$0.1 \lesssim v_t \frac{\Delta t}{\Delta x} \lesssim 1 \tag{4.171}$$

Même si l'analyse de stabilité linéaire menée ici ne prétend pas reproduire tous les

θ_f	0	0.1	0.5	1
$v_t\Delta t/\Delta x$				
0.05	0.0166	0.016	0.0150	0.012
	(2.64)	(2.64)	(2.67)	(2.67)
0.0625	0.0192	0.0187	0.0161	0.011
	(2.51)	(2.51)	(2.54)	(2.58)
0.1	0.0204	0.0185	0.01	-1.8×10^{-3}
	(2.18)	(2.18)	(2.27)	(2.33)
0.25	8×10^{-4}	-7.4×10^{-3}	-0.04	-0.08
	(1.05)	(1.11)	(1.28)	(1.46)
0.5	0	-0.01	-0.0508	-0.105
	(0.39)	(0.54)	(0.63)	(0.76)
1	0	-0.0102	-0.0532	-0.112
	(0.14)	(0.27)	(0.33)	(0.39)

TABLE 4.2 – Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $v_t\Delta t/\Delta x$ et du paramètre d'amortissement θ_f pour $\omega_p\Delta t = 2$ et un facteur de forme linéaire ($m = 1$).

aspects du chauffage numérique [21, 55], les résultats du tableau 4.2 confirment approximativement la borne inférieure de l'estimation heuristique donnée par (4.171). En particulier, ils révèlent une stabilisation complète du système quand $v_t\Delta t/\Delta x \gtrsim 0.1$ dans le cas d'un facteur de forme linéaire et $\theta_f = 1$. Pour des valeurs de θ_f plus faibles, la stabilisation est atteinte en augmentant $v_t\Delta t/\Delta x$. De plus, le tableau 4.3 montre que le recours à un facteur de forme quadratique permet de supprimer l'instabilité issue de la discrétisation spatiale avec un ratio $v_t\Delta t/\Delta x$ réduit ($\gtrsim 0.06$) pour $\theta_f = 1$. A l'instar de la Fig. 4.6, une transition claire entre les régimes spatial et temporel respectivement dominés par des modes à grands et petits k apparaît lorsqu'on augmente $v_t\Delta t/\Delta x$. Comme attendu, un facteur de forme d'ordre élevé ($m > 1$), qui permet de filtrer les modes spatiaux haute fréquence, ne s'avère bénéfique que dans le régime spatial (pour $v_t\Delta t/\Delta x \lesssim 0.25$). Notons que nous n'avons pas examiné les valeurs $v_t\Delta t/\Delta x > 1$ puisque pour $\omega_p\Delta t = 2$ cela impliquerait $\Delta x/\lambda_D < 2$, un domaine de l'espace des paramètres de peu d'intérêt pour les applications susmentionnées.

On peut compléter notre analyse des propriétés de stabilité du schéma avec amortissement ajustable en fixant le ratio $v_t\Delta t/\Delta x = 0.09$ et en faisant varier les pas d'espace et de temps. De manière équivalente, dans le contexte laser-plasma considéré, cela correspond à fixer les paramètres $\omega_0\Delta x/c$ et $\omega_0\Delta t$ (où ω_0 est la fréquence du laser incident) et à faire varier la densité du plasma. Le tableau 4.4 présente les résultats obtenus dans la gamme $1.26 \leq \omega_p\Delta t \leq 8.94$, pour laquelle $14.3 \leq \Delta x/\lambda_D \leq 101$. On constate qu'un facteur de forme linéaire s'avère

θ_f	0	0.1	0.5	1
$v_t\Delta t/\Delta x$				
0.05	5.3×10^{-3}	5×10^{-3}	3.5×10^{-3}	10^{-4}
	(2.54)	(2.54)	(2.58)	(2.61)
0.0625	5.4×10^{-3}	4.8×10^{-3}	1.8×10^{-3}	-3.7×10^{-3}
	(2.39)	(2.39)	(2.45)	(2.48)
0.1	3.2×10^{-3}	1.1×10^{-3}	-8×10^{-3}	-0.0207
	(1.99)	(2.02)	(2.14)	(2.24)
0.25	0	-8.1×10^{-3}	-0.039	-0.078
	(0.81)	(1.05)	(1.22)	(1.4)
0.5	0	-9.7×10^{-3}	-0.05	-0.103
	(0.33)	(0.54)	(0.64)	(0.76)
1	0	-0.01	-0.053	-0.11
	(0.14)	(0.27)	(0.33)	(0.39)

TABLE 4.3 – Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction du ratio $v_t\Delta t/\Delta x$ et du paramètre d'amortissement θ_f pour $\omega_p\Delta t = 2$ et un facteurde forme quadratique ($m = 2$).

particulièrement inadapté pour la gamme de paramètres considérée. Par contre, une stabilisation complète est obtenue pour des facteurs de forme d'ordre ≥ 2. Notons qu'en termes de paramètres laser-plasma, la dernière colonne du tableau 4.4 correspond à un plasma de 1 keV à $2000n_c$ (où n_c est la densité critique pour une pulsation laser ω_0) discrétisé avec $\omega_0\Delta t = 0.2$ et $\omega_0\Delta x/c = 0.1$. Outre d'accéder à des densités plasma très élevées, l'emploi d'un facteur de forme cubique réduit sensiblement le taux de croissance maximal de l'instabilité d'aliasing. Ce qui pourrait nous permettre de réduire le paramètre d'amortissement θ_f, tout en restant stable.

$\omega_p\Delta t$	1.26	2	2.83	3.46	4	5.66	6.32	8.94
$\Delta x/\lambda_D$	14.3	22.6	32	39.1	45.2	64	71.5	101
linéaire	-0.0036	0.0034	0.0048	0.0047	0.0044	0.0036	0.0033	0.0024
	(2.09)	(2.41)	(2.59)	(2.67)	(2.74)	(2.85)	(2.87)	(2.96)
quadratique	-0.021	-0.015	-0.01	-0.0078	-0.0066	-0.0044	-0.0039	-0.0026
	(1.95)	(2.3)	(2.5)	(2.62)	(2.68)	(2.82)	(2.85)	(2.92)
cubique	-0.022	-0.019	-0.015	-0.013	-0.011	-0.0079	-0.0071	-0.0051
	(1.83)	(2.16)	(2.36)	(2.48)	(2.56)	(2.7)	(2.76)	(2.85)

TABLE 4.4 – Partie imaginaire de la pulsation $\Im\omega/\omega_p$ (nombre d'onde $k\Delta x$) du mode dominant en fonction des pas d'espace et de temps, du facteur de forme, pour un ratio $v_t\Delta t/\Delta x = 0.09$ et $\theta_f = 1$.

Chapitre 5

Validation du code ELIXIRS : simulations numériques

Et l'harmonie est trop exquise,
Qui gouverne tout son beau corps,
Pour que l'impuissante analyse
En note les nombreux accords.

Baudelaire, Les Fleurs du mal

Le code ELIXIRS est validé sur un ensemble de situations physiques, par comparaison à des simulations réalisées avec le code explicite CALDER. Nous commençons par examiner l'injection et l'absorption d'une onde électromagnétique, ces deux composantes du code étant essentielles pour l'étude ultérieure de l'interaction laser-plasma. Dans un deuxième temps, nous considérons le mouvement d'une particule chargée soumise à une onde plane de forte intensité. Cette application nous permet de valider le pousseur de particules dans le contexte relativiste, et d'en souligner les limitations pour de grands pas de temps. Dans une troisième section, nous présentons une première application couplant champs et plasmas au travers de l'étude des propriétés de chauffage ou de refroidissement d'un plasma Maxwellien. Dans une quatrième section, nous présentons des cas de détente de plasma composé d'une ou de deux populations électroniques. En section cinq et six nous envisageons deux systèmes faisceau-plasma sièges d'instabilités dont nous confronterons les caractéristiques mesurées en phase linéaire

(taux de croissance, amplitude des champs électromagnétiques) aux prédictions théoriques, dans le cas implicite le pas de temps sera déterminé par le taux de croissance et la pulsation des modes dominants. Enfin dans une dernière section nous traitons le problème complet de l'interaction d'une impulsion laser ultra-intense avec une cible plasma sur-critique. Les résultats obtenus, moyennés comme microscopiques, sont comparés avec ceux de simulations explicites équivalentes.

5.1 Injection, propagation et absorption d'ondes électromagnétiques dans le vide

Dans cette section nous nous assurons que le solveur électromagnétique permet de propager correctement les ondes électromagnétiques dans le vide. Nous vérifions également le bon fonctionnement des conditions aux limites absorbantes. Différents cas sont considérés en fonction du profil transverse et de l'angle d'incidence de l'onde. Les pas d'espace et de temps normalisés sont définis par $\Delta\widetilde{x} = k_0\Delta x$, $\Delta\widetilde{y} = k_0\Delta y$ et $\Delta\widetilde{t} = \omega_0\Delta t$, où ω_0 et k_0 désignent la pulsation et le nombre d'onde du laser. Dans le vide $k_0 = \omega_0/c$ avec c la vitesse de la lumière.

5.1.1 Injection/absorption d'une onde plane

Incidence normale

Nous considérons la propagation d'une onde plane d'amplitude normalisée $a_0 = \frac{eE_0}{m\omega_0 c} = 3$ en incidence normale avec $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$, sur un maillage défini par 512×8 mailles. L'enveloppe temporelle de l'onde est un trapèze dont les rampes mesurent $5\omega_0^{-1}$ et le plateau $80\omega_0^{-1}$. On vérifie que l'onde électromagnétique se propage à $\frac{v_\phi}{c} = 1$ et que son amplitude vaut a_0. En fin de simulation (Fig. 5.1 et $\omega_0 t = 300$) l'amplitude du champ E_y résiduel est de l'ordre de $a_0/1000$. Ce résultat valide les conditions aux limites absorbantes.

5.1.2 Injection/absorption d'un faisceau gaussien

Incidence normale

Considérons maintenant la propagation d'un faisceau gaussien de largeur à mi-hauteur $36c/\omega_0$ en incidence normale avec des pas d'espace $\Delta\widetilde{x} = 0.2$, $\Delta\widetilde{y} = 0.8$ et de temps $\Delta\widetilde{t} = 0.2$ sur un maillage défini par 512×256 mailles. L'enveloppe temporelle considérée est la même que dans le cas test précédent. L'enveloppe de

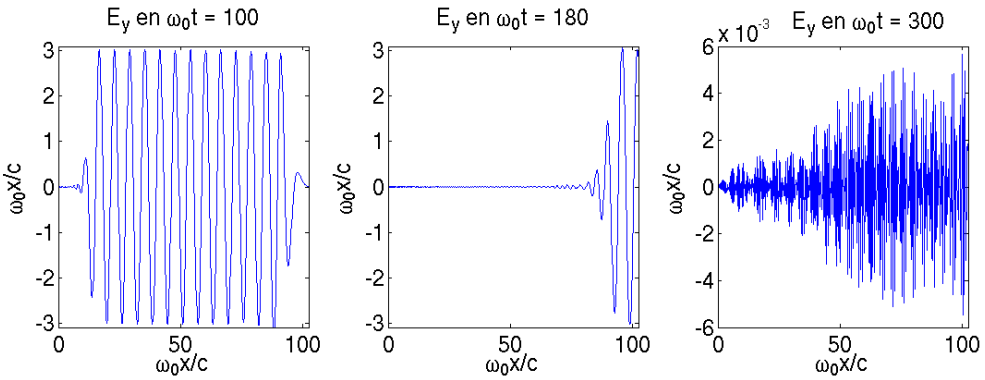
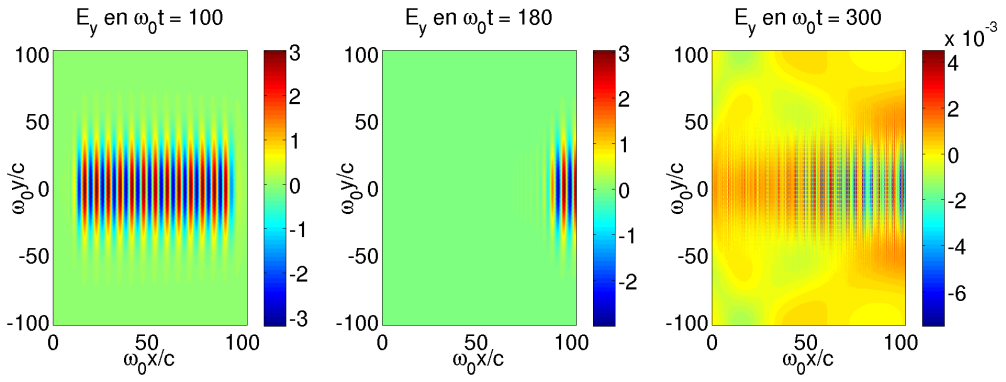


FIGURE 5.1 – Propagation dans le vide en incidence normale : coupes du champ E_y lors de la propagation, pendant et après absorption au bord droit. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$.

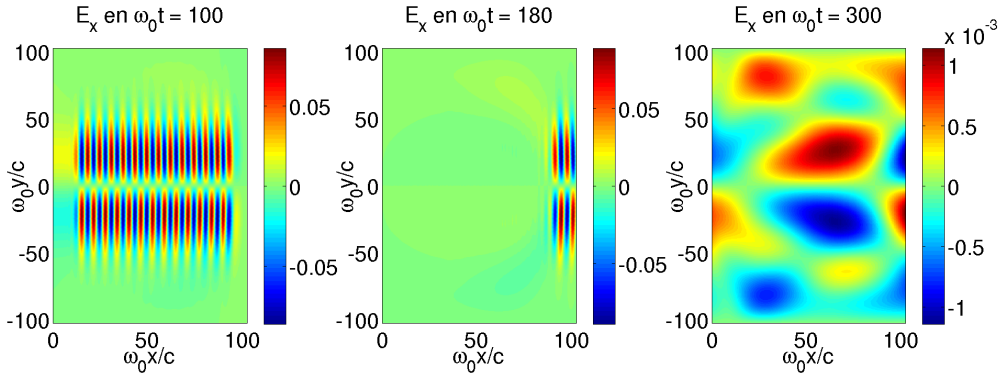
l'onde dans la direction transverse s'étendant sur environ six longueurs d'onde, celle-ci crée un champ longitudinal E_x de faible amplitude (Fig. 5.2(b)), induit par la variation transverse de B_z. Le champ électromagnétique se propage correctement (Figs. 5.2(a) et 5.3) et l'amplitude du champ réfléchi après absorption est négligeable devant l'amplitude de l'onde incidente.

Incidence oblique

Soit maintenant la propagation d'un faisceau gaussien injecté selon un angle de 30 ° avec des pas d'espace $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et de temps $\Delta\widetilde{t} = 0.2$. Le maillage est constitué de 180×512 mailles. L'enveloppe temporelle de l'onde est un trapèze dont les rampes mesurent $5\omega_0^{-1}$ et le plateau $20\omega_0^{-1}$. L'enveloppe de l'onde dans la direction transverse a la forme d'une gaussienne dont la largeur à mi-hauteur vaut $2\lambda_0 \cos(30\,^\circ)$, où λ_0 désigne la longueur d'onde laser. Les deux composantes du champ électrique sont représentées par les Figs. 5.4(a) et 5.4(b), l'éclairement du champ électrique correspond bien à a_0^2 (Figs. 5.4 et $\omega_0 t = 40$). En outre, le champ résiduel après absorption est négligeable devant a_0.



(a) Cartes du champ E_y



(b) Cartes du champ E_x

FIGURE 5.2 – Propagation dans le vide en incidence normale : cartes des champs E_x et E_y. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = 0.2$, $\Delta\widetilde{y} = 0.8$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$.

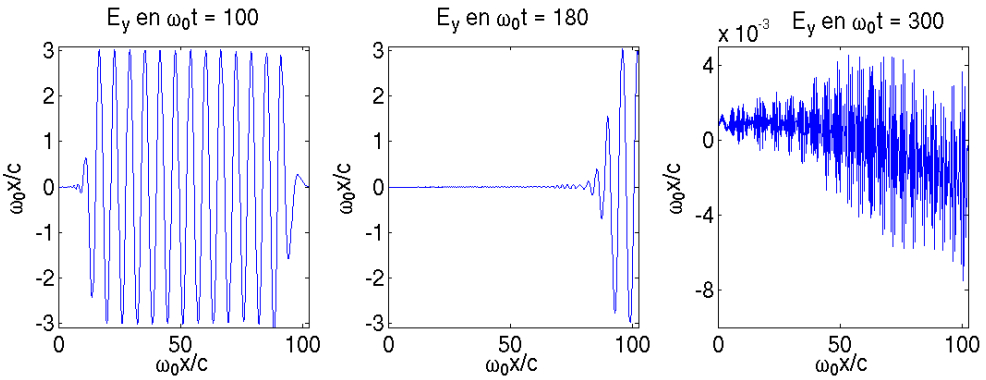
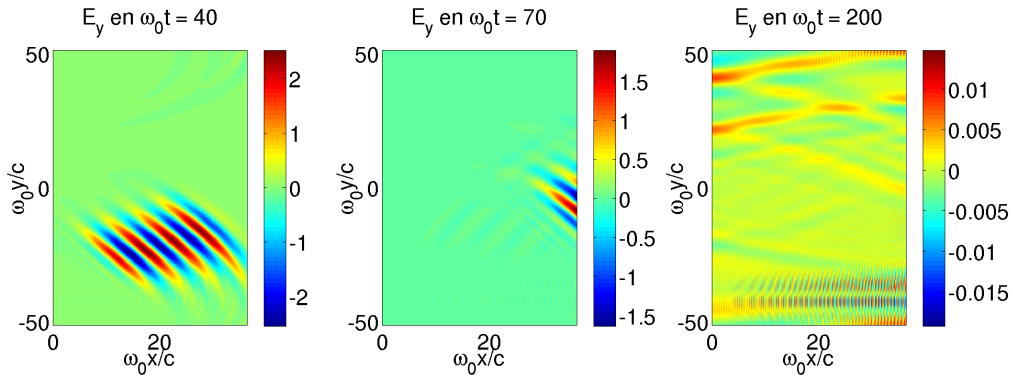
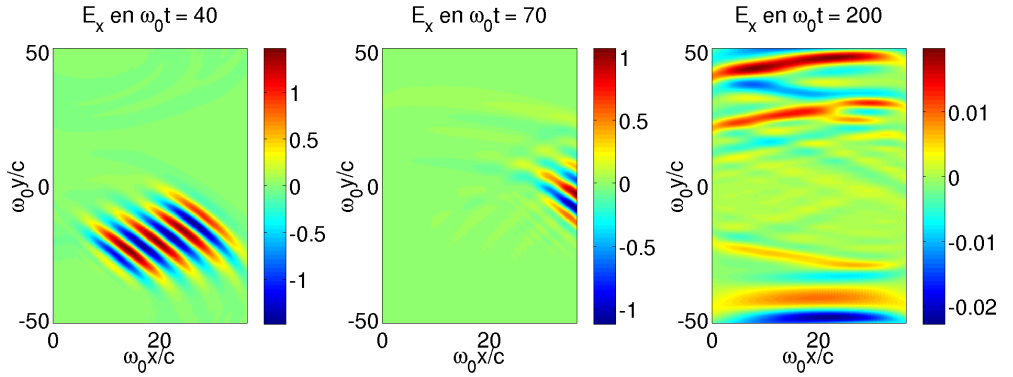


FIGURE 5.3 – Propagation dans le vide en incidence normale : coupes du champ E_y lors de la propagation, pendant et après absorption au bord droit. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = 0.2$, $\Delta\widetilde{y} = 0.8$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$.



(a) Cartes du champ E_y



(b) Cartes du champ E_x

FIGURE 5.4 – Propagation dans le vide selon une incidence de 30 ° : cartes des champs E_y et E_x lors de la propagation, pendant et après absorption. La discrétisation est définie par $\Delta\widetilde{x} = \Delta\widetilde{y} = 0.2$ et $\Delta\widetilde{t} = 0.2$.

5.1.3 Propagation d'une onde plane avec amortissement ajustable

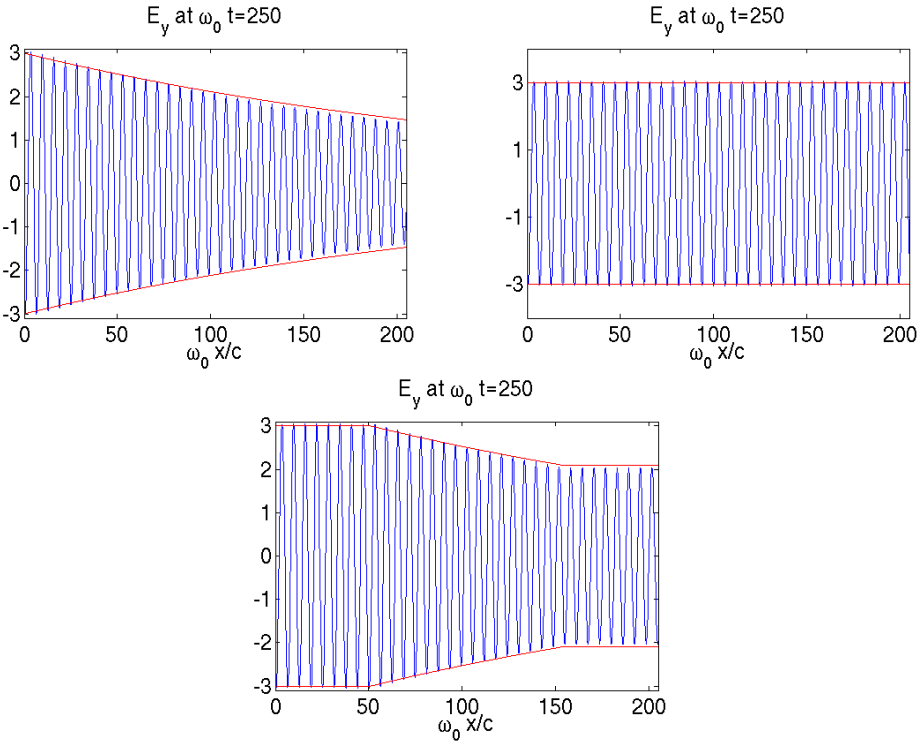


FIGURE 5.5 – Propagation d'une onde plane avec $\theta_f = 1$ (en haut à gauche), $\theta_f = 0$ (en haut à droite), et un indice θ_f variable suivant Eq. (5.1) (en bas).

Nous illustrons ici les capacités du schéma implicite avec amortissement ajustable, mis en oeuvre dans le code ELIXIRS pour propager les ondes électromagnétiques dans le vide. Considérons une onde plane de potentiel vecteur normalisé $a_0 = 3$ et de fréquence ω_0, qui entre par le bord gauche de la boîte de simulation de dimensions $1024\Delta x \times 4\Delta y$, avec $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta y = 0.8c/\omega_0$ et $\Delta t = 0.2\omega_0^{-1}$. L'onde est injectée et absorbée en utilisant la méthode détaillée dans 4.3.4. La figure 5.5(gauche) montre l'amortissement monotone de l'onde incidente quand un paramètre d'amortissement uniforme $\theta_f = 1$ est appliqué. Après avoir traversé la boîte de simulation, l'amplitude de l'onde ne vaut plus que 46% de sa valeur initiale, ce qui est proche de la valeur théorique (49%) déduite de la relation de dispersion analysée en 4.4.1. La Fig. 5.5(droite) illustre la propagation sans dissipation obtenue avec $\theta_f = 0$. Finalement, avec l'idée d'appliquer cette technique à l'interaction laser-plasma, nous abordons le cas d'une variation spatiale

du paramètre θ_f de la forme

$$\begin{cases} \theta_f = 0, & 0 < \omega_0 x/c < 51.2 \\ \theta_f = 1, & 51.2 < \omega_0 x/c < 153.6 \\ \theta_f = 0, & 153.6 < \omega_0 x/c < 204.8 \end{cases} \tag{5.1}$$

La figure 5.5(centre) montre que la discontinuité en θ_f n'entraîne pas d'effets parasites significatifs. Cette propriété recherchée s'avère particulièrement utile pour la modélisation de l'interaction laser-plasma puisqu'elle permet de propager l'onde laser sans atténuation sur plusieurs longueurs d'onde avant d'atteindre la cible surcritique, pour la stabilité de laquelle un amortissement numérique s'impose. Par ailleurs, nous avons vérifié que la réflexion qui survient au niveau de la discontinuité de surface ($\sim 0.1\%$ dans ce cas) est proche de celle prédite par la formule de Fresnel $R = (N(1) - N(0))^2/(N(1) + N(0))^2$, où $N(\theta_f) = c/v_\phi(\theta_f)$ est l'indice de réfraction numérique obtenu dans la Sec. 4.4.1.

5.2 Validation du pousseur relativiste

Afin de valider le pousseur dans un contexte relativiste, nous déterminerons dans un premier temps les équations qui régissent la dynamique d'une particule chargée dans une onde plane propagative. Dans un deuxième temps nous comparerons les résultats théoriques et numériques.

5.2.1 Mouvement d'une charge dans une onde plane

En nous appuyant sur le dévoppement fourni en Annexe C nous rappelons les équations qui décrivent le mouvement d'un électron dans une onde plane ultra-intense. L'électron étant initialement au repos, la conservation du moment canonique transverse ($C.6$) s'écrit $\mathbf{p}_\perp = e\mathbf{A}_\perp$ ainsi nous pouvons déterminer complètement le quadri-vecteur impulsion-énergie défini par $(cp_x, cp_y, cp_z, m\gamma c^2)$. La conservation du moment canonique transverse et le système ($C.17$,$C.18$) donnent dans le référentiel du laboratoire :

$$\begin{pmatrix} cp_x \\ cp_y \\ cp_z \\ m_e\gamma c^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} \\ a_0 m_e c^2 f(\varphi)\sin(\varphi) \\ 0 \\ m_e c^2 + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

avec

$$\frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} = \frac{m_e c^2 a_0^2}{4} f^2(\varphi)[1 - \cos(2\varphi)].$$

On en déduit les coordonnées $(x(\tau), y(\tau), z(\tau), t(\tau))$ de l'électron dans le référentiel du laboratoire après une durée τ, et en négligeant l'influence de la fonction d'enveloppe $(i.e f(\omega_0\tau) = 1)$:

$$\left\{\begin{array}{lll} x(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p_x}{m_e} dt & = \frac{ca_0^2}{4}\left[\tau + \frac{(1-2u^2)}{2\omega_0}\sin(2\omega_0\tau)\right] \\ y(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p_y}{m_e} dt & = \frac{a_0 c}{\omega_0} u\left[1-\cos(\omega_0\tau)\right] \\ z(\tau) & = 0 & \\ t(\tau) & = \int_0^\tau \gamma dt & = \tau + \frac{a_0^2}{4}\left[\tau + \frac{(1-2u^2)}{2\omega_0}\sin(2\omega_0\tau)\right] \end{array}\right. \tag{5.3}$$

Les coordonnées de l'électron dans le référentiel mobile $(x'(\tau), y'(\tau), z'(\tau), t'(\tau))$ peuvent être calculées sachant $\frac{dt'}{d\tau} = \gamma$, $\frac{dx'}{d\tau} = \frac{p'_x}{m_e}$, on obtient aisément :

$$\left\{\begin{array}{lll} x'(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p'_x}{m_e} dt & = \frac{\Gamma c}{\omega_0}(1-\beta)(a_0^2/8)(1-2u^2)\sin(2\omega_0\tau) + \Gamma c\tau\left[\frac{a_0^2}{4} - \beta\left(1+\frac{a_0^2}{4}\right)\right] \\ y'(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p'_y}{m_e} dt & = y(\tau) \\ z'(\tau) & = z(\tau) & = 0 \\ t'(\tau) & = \int_0^\tau \gamma' dt & = \Gamma\tau\left[1 + (1-\beta)\frac{a_0^2}{4}\right] + \frac{\Gamma(1-\beta)}{\omega_0}(a_0^2/8)(1-2u^2)\sin(2\omega_0\tau) \end{array}\right. \tag{5.4}$$

Il est possible d'exprimer cette trajectoire en fonction du temps dans le repère mobile, la phase de l'onde étant un invariant relativiste $\omega_0\tau = \varphi = \varphi'$ $i.e$ $\omega_0\tau = \omega_0\left(t - \frac{x}{c}\right) = \omega'_0\left(t' - \frac{x'}{c}\right)$. On en déduit $\omega'_0 = \frac{\omega_0}{\Gamma(1+\beta)} = \frac{\omega_0}{\left[1+\frac{a_0^2}{2}\right]^{1/2}}$.

Soit finalement en remplaçant ω_0 par ω'_0 et en tenant compte de la valeur de β donnée par $(C.26)$ on obtient :

$$\left\{\begin{array}{ll} x' & = \frac{c(1-2u^2)}{\omega'_0}\frac{a_0^2/8}{1+\frac{a_0^2}{2}}\sin(2\varphi') \\ y' & = \frac{ca_0 u}{\omega'_0}\frac{1}{\left(1+\frac{a_0^2}{2}\right)^{1/2}}\left[1-\cos(\varphi')\right] \\ z' & = 0 \\ t' & = \left(\frac{\varphi'}{\omega_0}\right)\left(1+\frac{a_0^2}{4}\right) + \frac{a_0^2}{4}\frac{(1-2u^2)}{2\omega'_0} \times \frac{1}{\left(1+\frac{a_0^2}{2}\right)^{1/2}}\sin(2\varphi') \end{array}\right. \tag{5.5}$$

Afin d'éviter toute discontinuité du champ nuisible pour l'intégrateur on utilise une enveloppe trapézoïdale. Plusieurs termes linéaires en φ viennent modifier la trajectoire établie dans le cas $f(\varphi) = 1$. En choisissant correctement la durée de la rampe du trapèze, le mouvement de la particule pour la polarisation linéaire choisie reste confiné dans le plan (x, y), et décrit une trajectoire caractéristique en forme de 8 dans le repère mobile.

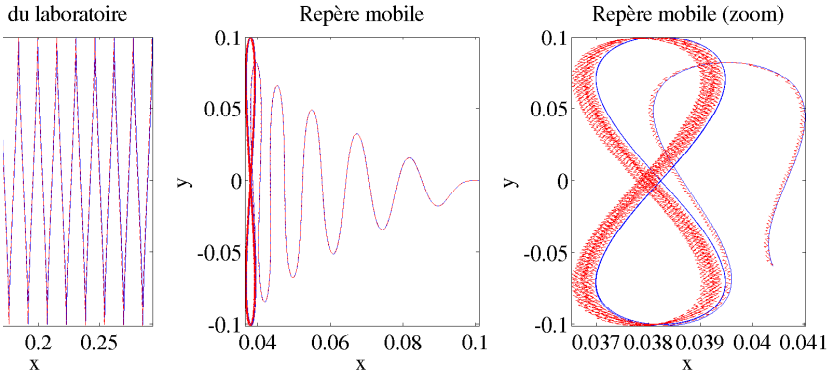
5.2.2 Comparaison aux simulations numériques

Afin de valider le pousseur relativiste nous avons soumis un électron initialement au repos à une onde plane d'intensité a_0. Nous étudions le cas d'un faible éclairement $a_0 = 0.1$ et celui d'un éclairement relativiste $a_0 = 1.5$. Les pas d'espace sont fixés et valent $\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$. Le pas de temps est susceptible de varier, il est limité par la condition CFL dans le cas explicite et nous verrons dans quelle mesure nous pouvons prendre un grand pas de temps pour reproduire correctement la trajectoire étudiée avec le schéma implicite. Afin d'éviter des problèmes liés à une mauvaise détermination du champ électromagnétique dans la première colonne du maillage, nous initialisons l'électron en $x_0 = 0.101$ et $y_0 = 0$. Nous déterminons une solution de référence en intégrant le mouvement théorique de la particule chargée avec une méthode de type Runge-Kutta d'ordre 4, en faisant l'hypothèse que le champ électrique est une onde plane convoluée par une enveloppe trapézoïdale. Considérons les simulations à faible éclairement Figs. 5.6(a) et 5.7(a), obtenues respectivement avec le code explicite CALDER et le code implicite ELIXIRS. Les trajectoires sont correctement reproduites avec les deux méthodes, on remarque néanmoins en agrandissant la trajectoire dans le repère mobile une faible erreur par rapport à la vitesse de dérive de référence. Cette erreur peut être expliquée par l'écart entre la vitesse de phase l'onde électromagnétique calculée par les solveurs de Maxwell explicite ou implicite et la vitesse de la lumière dans le vide.

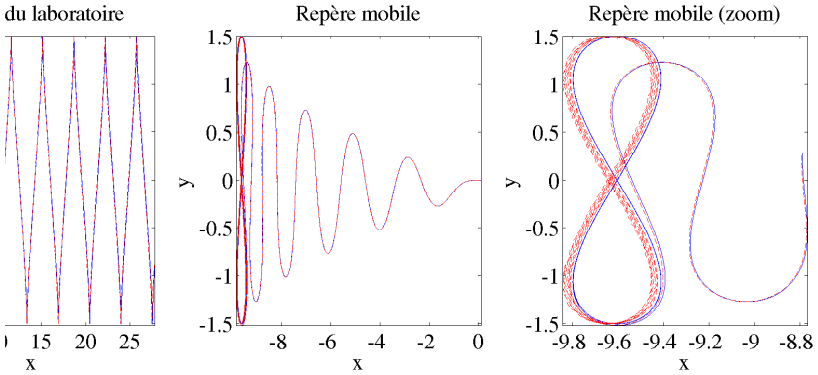
A fort éclairement Figs. 5.6(b) et 5.8(a)-5.8(c), et pour des pas de temps vérifiant $\Delta t < \Delta x/\sqrt{2}$ les trajectoires sont correctement reproduites par les schémas explicite Fig. 5.6(b) et implicite Figs. 5.8(a)-5.8(b). Néanmoins, à paramètres égaux Figs. 5.6(b) et 5.8(b) la dérive observée lorsqu'on agrandit la trajectoire dans le repère mobile est plus grande dans le cas implicite. Ces erreurs proviennent sans doute du centrage plus approximatif de la méthode implicite directe. La correction $\delta\mathbf{U}$ fait en effet intervenir $\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1}$ qui est notre meilleure estimation de $\mathbf{X}_{n+1}$. Pour des éclairements intenses ($a_0 > 1$), deux autres termes d'erreur proviennent de la linéarisation de γ_n, ainsi les expressions de $\Gamma^{(0)} = \widetilde{\gamma}_n$ et de $\mathbf{N}(\widetilde{\mathbf{U}}_{n+1/2})$ (Eq. 4.99) ne font pas intervenir le champ $\mathbf{E}_n$ à cause du choix des conditions initiales Eqs. 4.93 ; il en résulte que le centrage temporel de $\widetilde{\gamma}_n$ est approximatif. Les conditions initiales proposées dans 4.2.4, qui font intervenir $\mathbf{E}_n(\widetilde{\mathbf{X}}_{n+1})$ dans les expressions de $\Gamma^{(0)}$ et $\mathbf{N}$, pourraient permettre de mieux résoudre la trajectoire à fort éclairement.

Enfin pour un pas de temps inaccessible au schéma explicite ($\Delta t/\Delta x = 1$) [Fig. 5.8(c)], le schéma implicite reproduit qualitativement la trajectoire attendue. Dans ce cas l'erreur, essentiellement longitudinale, est accentuée par le retard de l'ordre du pourcent de l'onde électromagnétique simulée (voir Fig. 4.5).

On remarque dans Fig. 5.9 que le résultat obtenu avec le pousseur du code LSP (4.127) est grossièrement faux !

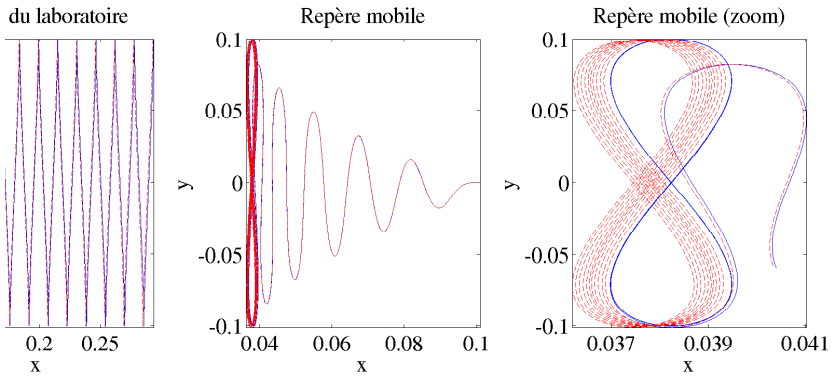


(a) $a_0 = 0.1$ et $\Delta t = 0.005\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$



(b) $a_0 = 1.5$ et $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$

FIGURE 5.6 – Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et agrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus avec le code PIC explicite (CALDER), tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta.



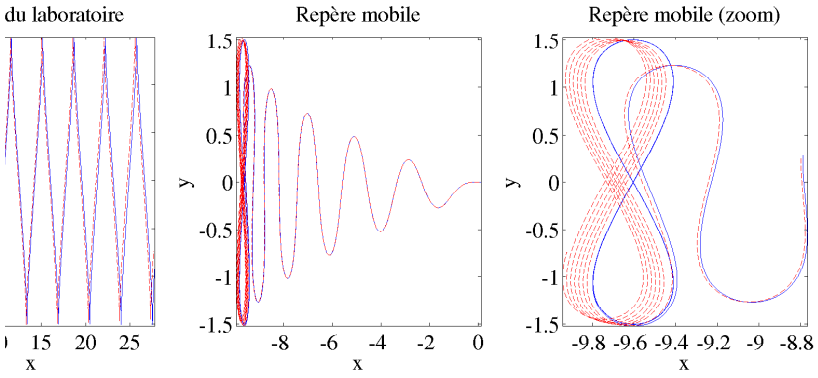
(a) $a_0 = 0.1$ et $\Delta t = 0.005\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$

FIGURE 5.7 – Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et aggrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta.

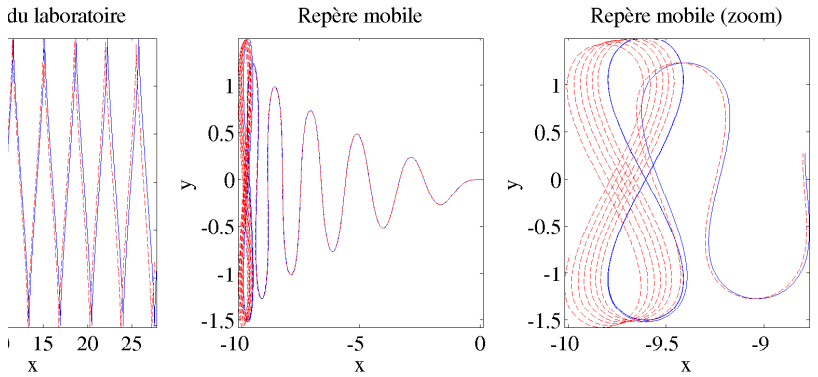
5.3 Influence de la discrétisation spatio-temporelle et du facteur de forme sur la conservation de l'énergie : étude d'un plasma Maxwellien

Nous avons effectué une série de simulations d'expansion libre d'un plasma d'électrons et d'ions pour quantifier l'écart entre l'analyse linéaire idéalisée de Sec. 4.4.2 et le schéma de type prédicteur-correcteur tel qu'implémenté dans ELIXIRS. L'objectif est d'avoir une vision plus approfondie des propriétés de conservation de l'énergie de ce dernier, tout en s'assurant de la concordance avec les prédictions du modèle analytique. Ces calculs s'inspirent de l'étude de la Ref. [86] et l'étendent au régime électromagnétique. Le plasma occupe la moitié de la boîte de simulation définie par $300\Delta x \times 4\Delta y$. Nous choisissons un rapport de masse $m_i/m_e = 900$ et des températures identiques $T_e = T_i = 1$ keV. Nous avons balayé l'espace des paramètres $(\Delta x/\lambda_D, \omega_p\Delta t)$ dans l'intervalle $[5, 60] \times [1, 5]$. Pour ce faire, après avoir introduit la pulsation ω_0 d'une onde électromagnétique fictive, et n_c, la densité critique correspondante, nous avons choisi $\Delta x = 0.2c/\omega_0$ et fait varier le rapport n_e/n_c et le pas de temps de telle sorte que $\Delta x/\lambda_D \in \{5, 10, 20, 30, 60\}$ et $\omega_p\Delta t \in \{1, 2, 5\}$. Le paramètre d'amortissement vaut $\theta_f = 1$. La durée des simulations est fixée à $1000\omega_0^{-1}$. On en déduit les trois ensembles de valeurs suivant :

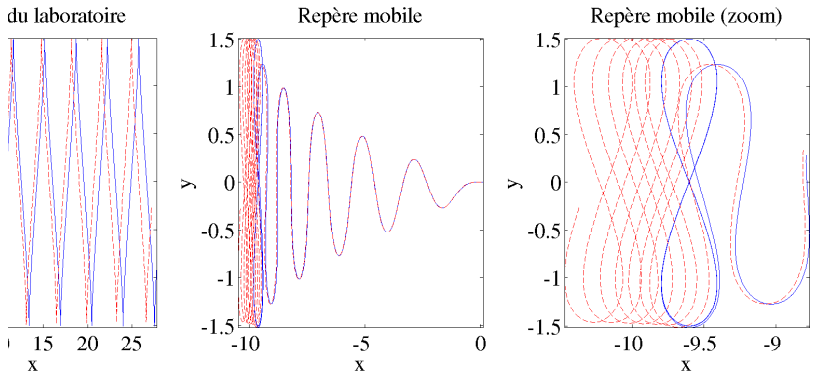
– $\omega_p\Delta t = 1$:



(a) $a_0 = 1.5$ et $\Delta t = 0.005\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$

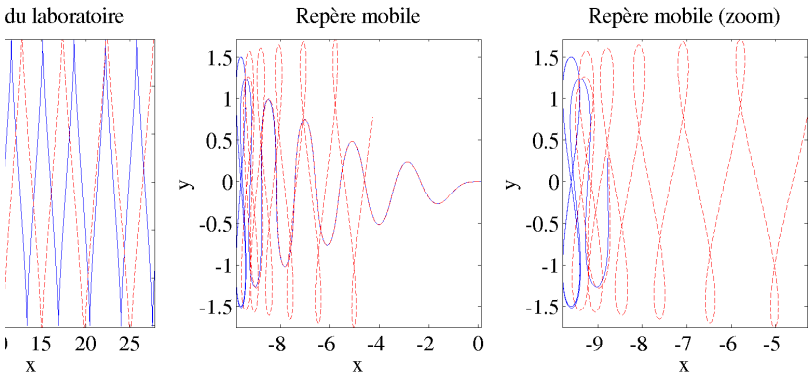


(b) $a_0 = 1.5$ et $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$



(c) $a_0 = 1.5$ et $\Delta t = 0.1\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$

FIGURE 5.8 – Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et aggrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe (ELIXIRS) avec $\theta_f = 0$, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta.



(a) $a_0 = 1.5$ et $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$,$\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$

FIGURE 5.9 – Trajectoire d'un électron dans une onde plane de polarisation linéaire : dans le référentiel du laboratoire (gauche), dans le référentiel mobile (centre) et agrandie dans le référentiel mobile (droite). Les courbes rouges désignent les résultats obtenus par la méthode implicite directe et le pousseur du code LSP, tandis que les courbes bleues correspondent à l'intégration temporelle du système différentiel en x,y,p_x,p_y par une méthode de type Runge-Kutta.

$\Delta\tilde{t} = \{0.9, 0.45, 0.23, 0.15, 0.075\}$ with $N = \{1106, 2212, 4424, 6636, 13271\}$

– $\omega_p\Delta t = 2$:
$\Delta\tilde{t} = \{1.81, 0.9, 0.45, 0.30, 0.15\}$ with $N = \{553, 1106, 2212, 3318, 6636\}$

– $\omega_p\Delta t = 5$:
$\Delta\tilde{t} = \{4.52, 2.26, 1.13, 0.75, 0.38\}$ with $N = \{222, 443, 885, 1328, 2655\}$

Pour chaque simulation, nous avons calculé la variation relative de l'énergie cinétique par pas de temps $(\Delta K/K_0)/N$ (où ΔK est la variation d'énergie cinétique, K_0 l'énergie cinétique initiale et N le nombre de pas de temps). Pour reproduire au mieux les résultats de [86] nous avons aussi effectué des simulations électrostatiques, pour lesquelles le champ électrique est directement calculé à partir de l'équation de Poisson (4.147).

$\Delta x/\lambda_D$ $\omega_p\Delta t$	5	10	20	30	60
1	3.6	72	500	1400	6300
2	-5.1	17	175	510	2970
5	0.04	-7	10.5	62	440

TABLE 5.1 – Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale $(\Delta K/K_0)$ par cycle laser ω_0^{-1} : cas électrostatique avec facteur de forme linéaire.

$\Delta x/\lambda_D$ $\omega_p \Delta t$	5	10	20	30	60
1	3.1	70	440	1110	3800
2	-6.2	14.2	150	400	1730
5	-1.3	-10.7	2.6	40.5	250

TABLE 5.2 – Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme linéaire.

$\Delta x/\lambda_D$ $\omega_p \Delta t$	5	10	20	30	60
1	-3.4	10	100	310	1430
2	-6.4	-3.9	31	110	550
5	-2.8	-10	-9.3	-0.04	64

TABLE 5.3 – Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme quadratique.

$\Delta x/\lambda_D$ $\omega_p \Delta t$	5	10	20	30	60
1	-3	-0.4	22	79	468
2	-5	-5.6	3.5	25	177
5	-3	-7.6	-9.6	-7	10.3

TABLE 5.4 – Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme cubique.

$\Delta x/\lambda_D$ $\omega_p \Delta t$	5	10	20	30	60
1	-2.4	-1.7	4.4	17.3	130
2	-3.8	-4.8	-1.7	3.7	47
5	-3.1	-6	-8.2	-7.4	-3.5

TABLE 5.5 – Variation relative ($\times 10^{-5}$) de l'énergie cinétique totale ($\Delta K/K_0$) par cycle laser ω_0^{-1} : cas électromagnétique avec facteur de forme d'ordre quatre.

Les résultats obtenus sont synthétisés dans les tableaux 5.1-5.3. Les courbes des énergies cinétiques sont données par les Figs. 5.10- 5.12 : chaque colonne correspond à une valeur spécifique de $\Delta x/\lambda_D$ et chaque ligne à une valeur spécifique de $\omega_p \Delta t$. Notons que nous avons exclu de ces graphiques le cas $\Delta x/\lambda_D = 60$ qui donne toujours lieu à un fort chauffage numérique. Nous avons vérifié que la quasi-totalité de l'énergie du système est de nature cinétique, l'énergie des champs électrostatiques jouant le rôle d'un canal entre les énergies cinétiques électronique et ionique. Dans l'ensemble, résultats électrostatiques et électromagnétiques sont similaires. Par ailleurs, on obtient une conservation de l'énergie satisfaisante ($\lesssim 10^{-4}$) pour $v_t \Delta t/\Delta x \gtrsim 0.2$ et $v_t \Delta t/\Delta x \gtrsim 0.1$ pour des fonctions d'interpolation respectivement linéaire et quadratique, à l'ordre quatre cette borne décroît jusqu'à ~ 0.05 (Tab. 5.3). Ces bornes inférieures sont proches des valeurs prédites par l'analyse de stabilité linéaire de Sec. 4.4.2. Le plasma a tendance à refroidir au-delà de ces seuils.

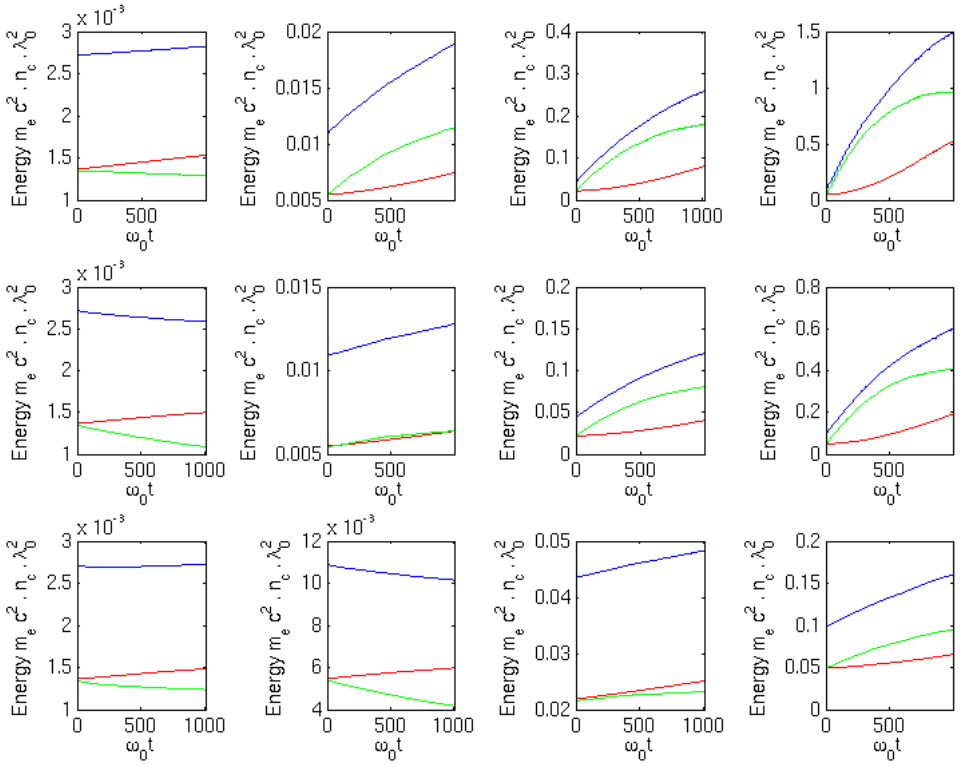


FIGURE 5.10 – Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électrostatique avec facteur de forme linéaire. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas.

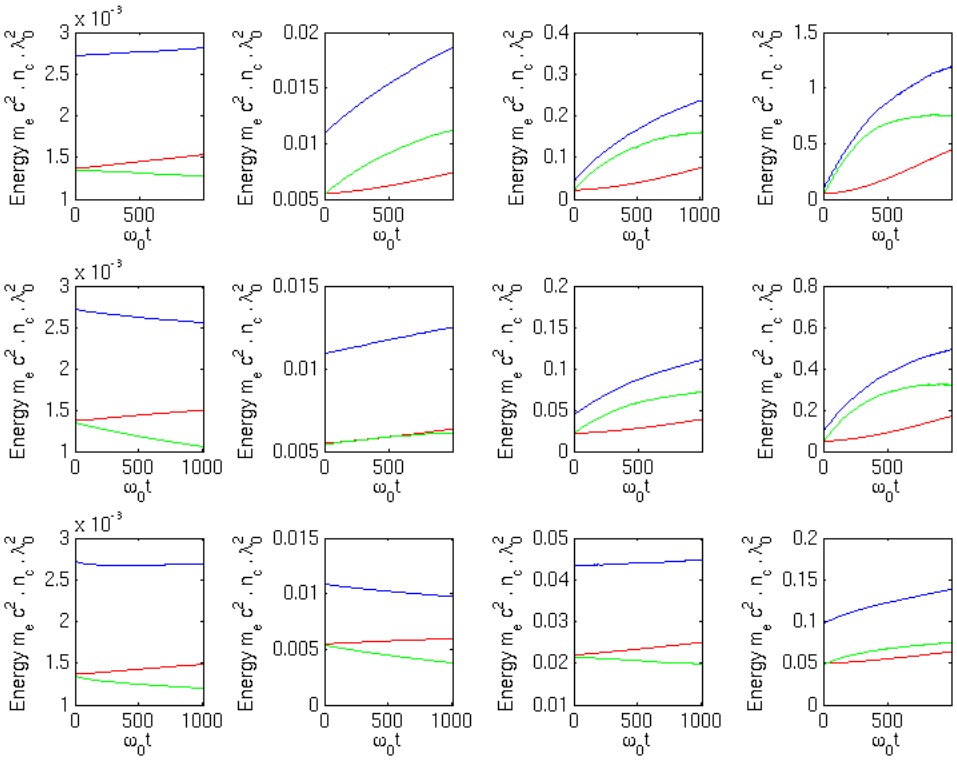


FIGURE 5.11 – Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électromagnétique avec facteur de forme linéaire. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas.

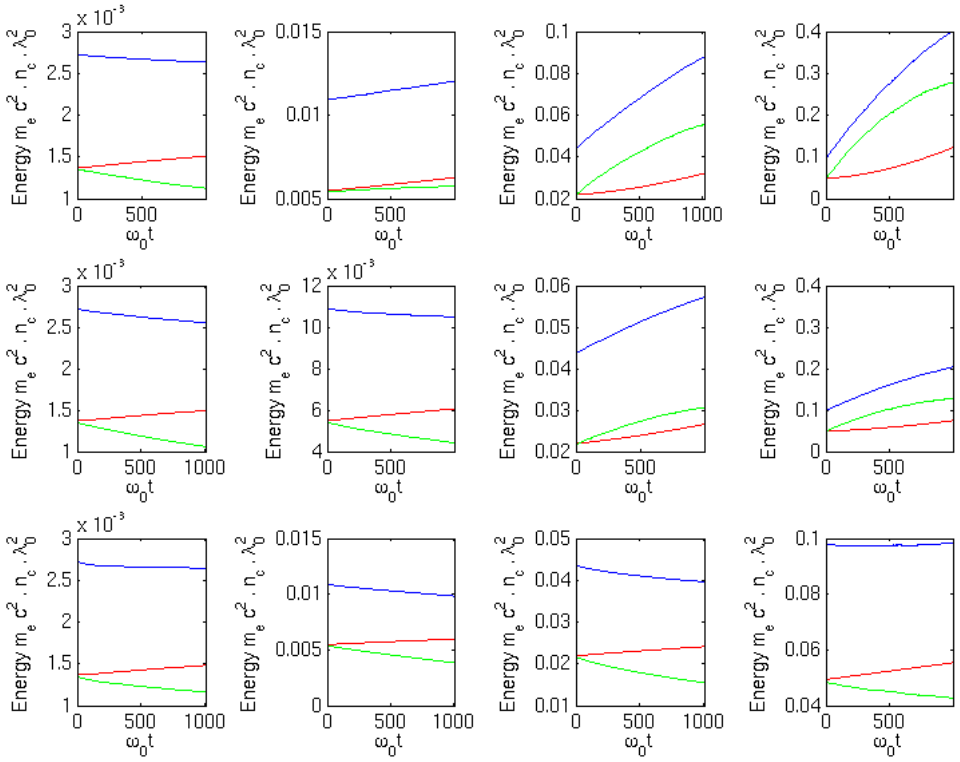


FIGURE 5.12 – Evolution temporelle des énergies cinétiques totale (en bleu), ionique (en rouge) et électronique (en vert) : cas électromagnétique avec facteur de forme quadratique. $\Delta x/\lambda_D = (5, 10, 20, 30)$ de gauche à droite et $\omega_p \Delta t = (1, 2, 5)$ de haut en bas.

5.4 Expansion de plasma dans le vide

5.4.1 Cas non relativiste

Nous simulons ici la détente d'une lame de plasma provoquée par une population d'électrons chauds. Les résultats du code implicite ELIXIRS sont confrontés à des simulations explicites fines obtenues avec le code CALDER [101]. Nous considérons une lame de plasma de $60c/\omega_p$ composée d'électrons chauds ($T_e = 10keV$) et d'ions froids ($T_i = 0$). Dans le cas implicite, la boite de simulation mesure $103\Delta x \times 4\Delta y$, avec $\Delta x = 2c/\omega_p$ et $\Delta y = 0.4c/\omega_p$ (d'où les ratios $\Delta x/\lambda_D = 14$ et $v_t\Delta t/\Delta x = 0.14$), alors que la simulation explicite utilise une boîte $1024\Delta x \times 8\Delta y$, avec $\Delta x = \Delta y = 0.2c/\omega_p$. On utilise un facteur de forme linéaire dans tous les cas.

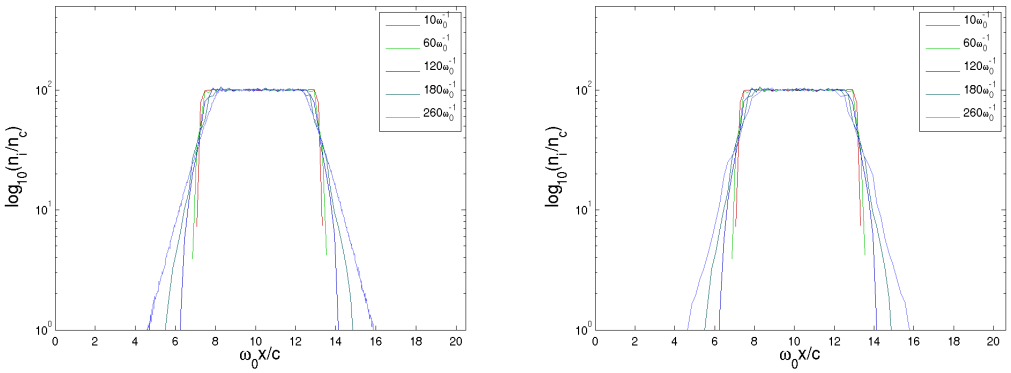


FIGURE 5.13 – Evolution temporelle des profils de densité ionique : simulations explicite (à gauche) et implicite (à droite) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$.

Les figures 5.13, 5.14 et 5.15 représentent l'évolution au cours du temps du profil de densité ionique, de l'espace des phases des ions et de l'énergie cinétique du plasma, tels que simulés par les codes implicite et explicite. Dans le cas implicite, le paramètre d'amortissement est fixé en tout point à $\theta_f = 1$. Par ailleurs, le nombre total N_p de macro-particule vaut 6×10^4 et 6×10^5 dans les cas implicite et explicite respectivement. Dans l'ensemble, malgré une discrétisation grossière et un fort amortissement (comme prédit par le tableau 4.1), le schéma implicite reproduit de façon satisfaisante les résultats des simulations explicites finement résolues. Cependant son caractère dissipatif provoque un refroidissement artificiel des électrons, ce qui affaiblit l'accélération des ions comme on le voit dans les Figs. 5.14 et 5.15. Plus quantitativement, l'énergie totale diminue de $\sim 3\%$, tandis que l'énergie maximale des ions vaut $\sim$ 160 keV, à comparer à $\sim$ 220 keV dans le

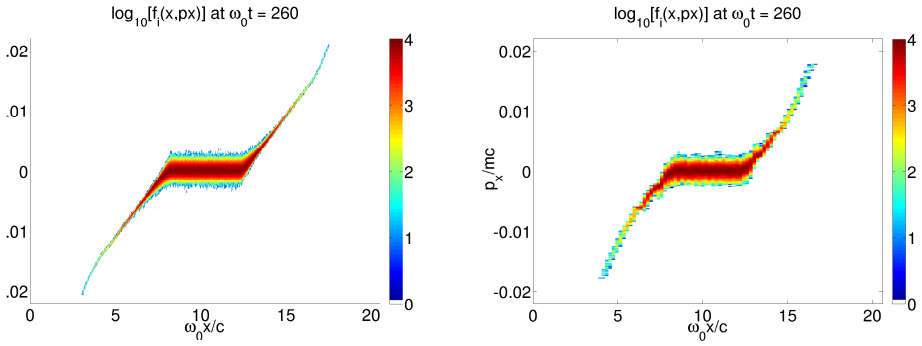


FIGURE 5.14 – Espace des phases ionique à $t = 2600\omega_p^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite (à droite) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$.

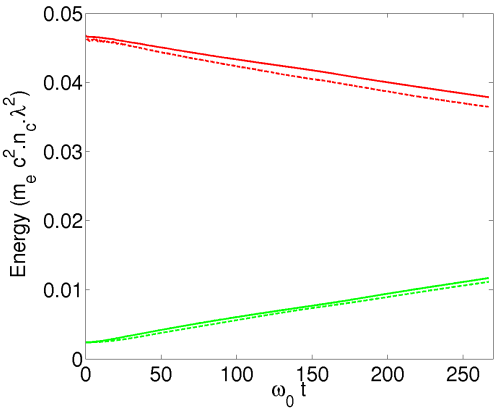


FIGURE 5.15 – Evolution temporelle des énergies cinétiques électronique (en rouge) et ionique (en vert) : simulations explicite (en trait plein) et implicite (en pointillés) avec $\Delta x = 0.2c/\omega_p$, $\Delta t = 0.1\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^5$ et $\Delta x = 2c/\omega_p$, $\Delta t = 2\omega_p^{-1}$, $N_p = 6 \times 10^4$, respectivement. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite vaut $\theta_f = 1$.

cas explicite. Une étude plus exhaustive nous a permis de mesurer l'influence du paramètre d'amortissement et du nombre de macro-particules. Pour chaque simulation, nous avons mesuré la variation de l'énergie totale et l'énergie ionique maximale. L'ensemble de ces résultats est synthétisé dans les tableaux 5.6 and 5.7. Les résultats fournis par le schéma implicite sont satisfaisant ($\Delta E/E_0 < 10\%$) jusqu'à $\theta_f = 0.15$, la conservation de l'énergie étant alors comparable, sinon meilleure, que celle obtenue dans le cas explicite pour un même nombre de macro-particules. Lorsqu'on augmente ce dernier de 6×10^4 à 6×10^5 la variation de l'énergie est approximativement divisée par deux mais le pic d'énergie des ions reste quasiment inchangé. La transition entre chauffage et refroidissement électronique se produit entre $\theta_f = 1$ et $\theta_f = 0.5$. Quant au cas non-amorti (θ_f=0), il donne lieu à un chauffage électronique nettement plus marqué, qui se traduit par une surestimation d'un facteur deux du niveau maximum de l'énergie ionique finale.

	$\Delta E/E_0$	Energie ionique max (keV)
Explicite	+9.3 %	232
Implicite ($\theta_f = 1$)	-2.8%	162
Implicite ($\theta_f = 0.5$)	+3.1%	208
Implicite ($\theta_f = 0.15$)	+9%	273
Implicite ($\theta_f = 0$)	+19.7%	451

TABLE 5.6 – Variation de l'énergie totale et énergie cinétique ionique maximale (keV) à $2600\omega_p^{-1}$ avec $N_p = 6 \times 10^4$.

	$\Delta E/E_0$	Energie ionique max (keV)
Explicit	+1 %	221
Implicit ($\theta_f = 1$)	-1.4%	162
Implicit ($\theta_f = 0.5$)	+1.5%	198
Implicit ($\theta_f = 0.15$)	+4.5%	256
Implicit ($\theta_f = 0$)	+12.4%	418

TABLE 5.7 – Variation de l'énergie totale et énergie cinétique ionique maximale (keV) à $2600\omega_p^{-1}$ avec $N_p = 6 \times 10^5$.

5.4.2 Cas relativiste

Nous nous plaçons ici dans une situation analogue à celle qui prévaut lorsqu'une lame de plasma vient d'être chauffée par une impulsion laser ultra-intense.

Pour cela nous considérons une lame de plasma de $6c/\omega_0$ composée des trois populations suivantes : une population d'électrons chauds à 1 MeV à la densité critique n_c, une population d'électrons froids à 100 eV à la densité $99n_c$ et une population d'ions à 100 eV à la densité $100n_c$. Dans le cas implicite, la boîte de simulation mesure $411\Delta x \times 4\Delta y$, avec $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta y = 0.1c/\omega_0$ et $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$. A titre indicatif, nous avons pour les électrons rapides seuls $\omega_p\Delta t = 0.4$ soit $v_t\Delta t/\Delta x = 2.8$, et pour les électrons froids seuls $\omega_p\Delta t = 4$ soit $v_t\Delta t/\Delta x = 0.028$. En distinguant artificiellement les espèces électroniques, et en omettant la dynamique ionique, on peut s'attendre, d'après la section 4.4.2, au chauffage numérique des électrons froids. Le paramètre d'amortissement du schéma implicite, θ_f vaut 1 sur une longueur de $4c/\omega_0$ dans le coeur du plasma et 0.1 sur $1c/\omega_0$ de part et d'autre jusqu'au bord de la lame de plasma. Ce choix vise à amortir les ondes plasma électroniques dans la lame de plasma dense, tout en évitant d'atténuer les champs électriques longitudinaux créés aux bords par les électrons chauds, et qui vont piloter la dynamique ionique. En tout point, une même valeur de θ_f sert dans l'équation d'onde et l'équation de Lorentz. Nous avons effectué trois simulations avec successivement $N_p = 6 \times 10^5$, $N_p = 6 \times 10^4$ et $N_p = 6200$ macro-particules par espèce cinétique. Dans le cas explicite la boîte de simulation mesure $820\Delta x \times 4\Delta y$, avec $\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$ et $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$. Pour limiter le chauffage numérique susceptible d'affecter la population froide (du fait du rapport $\Delta x/\lambda_D \sim 70$), nous utilisons un facteur de forme d'ordre deux.

L'évolution temporelle des énergies cinétiques des différentes espèces est donnée par les Figs. 5.16 dans les cas $N_p = 6 \times 10^4$ et $N_p = 6 \times 10^5$ pour les simulations explicite et implicite. On constate un bon accord qualitatif entre les deux méthodes avec toutefois un transfert d'énergie moins efficace entre électrons chauds et ions froids dans le cas implicite. La population d'électrons froids tend à chauffer dans le cas implicite, ce qui est cohérent avec les prédictions analytiques lorsque $v_t\frac{\Delta t}{\Delta x} < 0.1$. Les énergies cinétiques obtenues avec $N_p = 6 \times 10^4$ et $N_p = 6 \times 10^5$ sont presque identiques pour un même schéma numérique. Un résultat surprenant est la moindre dégradation de la conservation de l'énergie avec la méthode implicite pour un faible nombre de macro-particules par espèce (voir Tab. 5.8).

Les espaces des phases ioniques Figs. 5.17 et 5.18 mettent en évidence un retard dans l'accélération obtenue par les simulations implicites. On observe néanmoins un accord satisfaisant (à 4% près) des énergies cinétiques et des impulsions maximales des ions en fin de simulations.

Une cause possible du retard entre les deux écoulements tient peut être à une résolution insuffisante de la densité ionique aux bords de la lame de plasma. En effet, les simulations explicites donnent lieu à des variations importantes de la densité ionique (Figs. 5.19(a)-5.19(b)) sur des distances de l'ordre d'une maille. De plus les termes de gradient du champ électrique n'ont pas été pris en compte dans ces simulations. De plus l'algorithme implicite d'ELIXIRS néglige un terme

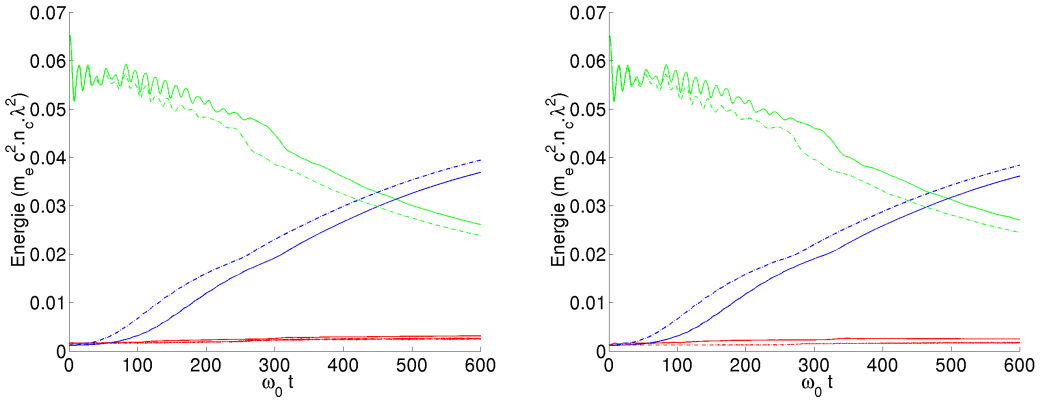
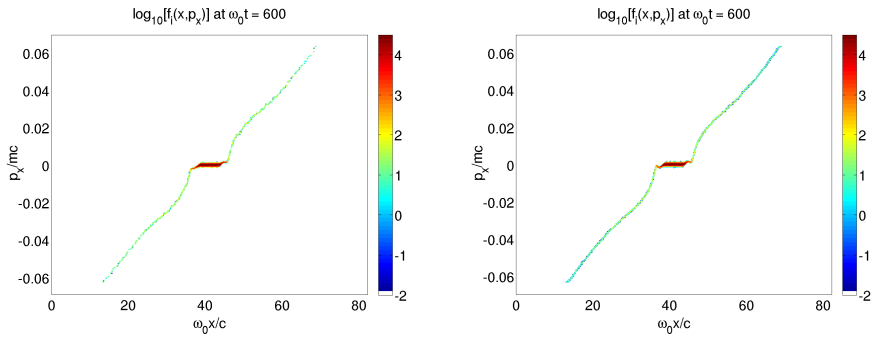


FIGURE 5.16 – Evolution temporelle des énergies cinétiques des électrons chauds (en vert), des électrons froids (en rouge) et des ions (en bleu). Simulation explicite (en pointillés) et simulation implicite (en trait plein) avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$, et $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$, respectivement. Le nombre de particules dans la boîte de simulation vaut $N_p = 6 \times 10^4$ (à gauche) et $N_p = 6 \times 10^5$(à droite).

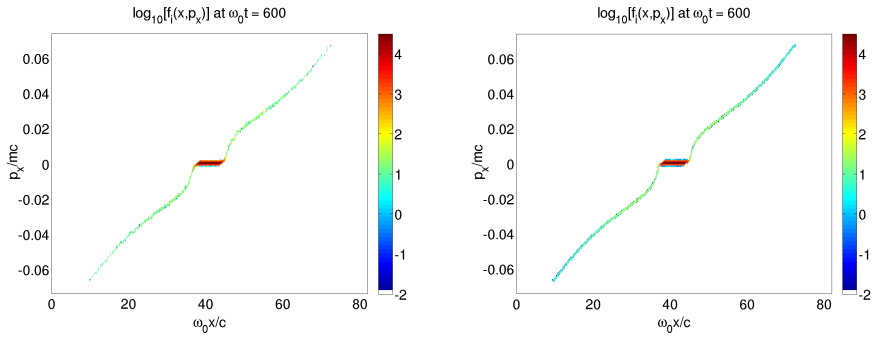


(a) $N_p = 6 \times 10^4$ (b) $N_p = 6 \times 10^5$

FIGURE 5.17 – Espace des phases des ions à $600\omega_0^{-1}$: simulations implicites avec $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$.

	6200	6×10^4	6×10^5
Explicite	+20%	<1%	<1%
Implicite	+7%	+2%	+1%

TABLE 5.8 – Variation relative de l'énergie totale en fonction du nombre de particules dans la boîte de simulation.



(a) $N_p = 6 \times 10^4$ (b) $N_p = 6 \times 10^5$

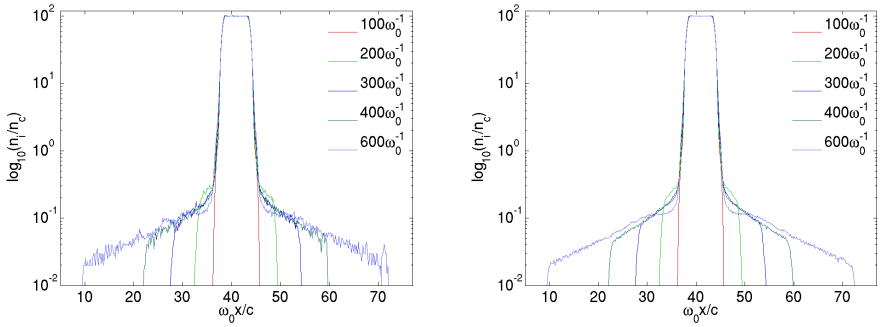
FIGURE 5.18 – Espace des phases des ions à $600\omega_0^{-1}$: simulations explicites avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$.

de gradient dans la linéarisation du champ électrique vu par les particules. Il s'ensuit que les changements de pente abrupts observés dans les profils de densité explicites des Figs.5.19(a)-5.19(b) aux temps courts sont mal reproduits par l'approche implicite. En revanche, les différences entre profils explicites 5.19(a)-5.19(b) et implicites 5.19(c)-5.19(d) s'estompent en fin de simulation.

Dans les cas que nous venons de considérer, les temps de calcul sont réduits au mieux d'un facteur deux entre simulations explicite et implicite (voir Tab. 5.9).

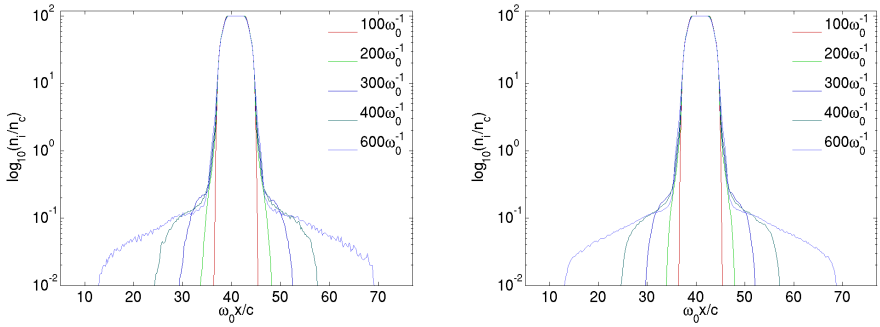
N_p	6200	6×10^4	6×10^5
Explicite	$\sim$ 4 min	16 min	4h12
Implicite	$\sim$ 2 min	13 min	2h07

TABLE 5.9 – Temps de calcul en fonction du nombre de particules dans la boîte de simulation pour les simulations explicite et implicite.



(a) Explicite, $N_p = 6 \times 10^4$

(b) Explicite, $N_p = 6 \times 10^5$



(c) Implicite, $N_p = 6 \times 10^4$

(d) Implicite, $N_p = 6 \times 10^5$

FIGURE 5.19 – Evolution temporelle des profils de densité ionique dans les cas explicite et implicite avec $\Delta x = 0.1c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$ et $\Delta x = 0.2c/\omega_0$, $\Delta t = 0.4\omega_0^{-1}$, respectivement.

5.5 Instabilité deux-faisceaux relativiste

5.5.1 Prédictions de la théorie linéaire

Nous allons étudier les mécanismes collectifs régissant le comportement d'un faisceau d'électrons relativistes se propageant dans un plasma. Ce problème est d'un intérêt capital pour nombre de situations mettant en jeu une population d'électrons relativistes, que ce soit dans un contexte astrophysique ou dans le cadre de l'interaction laser-plasma en régime ultra-intense. En nous appuyant sur les travaux de [102], nous donnerons la relation de dispersion caractérisant les fluctuations électromagnétiques associées au système faisceau-plasma considéré. Nous présenterons ensuite les résultats essentiels prédits par la théorie linéaire pour un choix particulier des fonctions de distribution électroniques. Nous considèrerons un choix de paramètres tels que les modes les plus instables se propagent obliquement à la direction de la vitesse moyenne du faisceau. Nous montrerons que les prédictions théoriques sont reproduites par des simulations implicites, qui seront également comparées, pour ce qui concerne le régime non-linéaire, à des calculs explicites.

La relation de dispersion des fluctuations électromagnétiques dans un plasma homogène, non magnétisé et en l'absence de collisions, s'écrit :

$$(\omega^2\epsilon_{xx} - k_y^2)(\omega^2\epsilon_{yy} - k_x^2) - (\omega^2\epsilon_{xy} + k_x k_y)^2 = 0 \tag{5.6}$$

La pulsation complexe ω et le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ sont respectivement normalisés par ω_e et ω_e/c, où ω_e est la pulsation plasma totale non relativiste. Les ions immobiles constituent un fond neutralisant. Les composantes du tenseur diélectrique sont données par :

$$\begin{aligned}\epsilon_{kl}(\omega, \mathbf{k}) = \delta_{kl} + \sum_{\alpha=b,p} \frac{n_\alpha}{\omega^2} \int\int\int \frac{p_k}{\gamma} \frac{\partial f_\alpha^{(0)}}{\partial p_l} d^3p + \\ \sum_{\alpha=b,p} \frac{n_\alpha}{\omega^2} \int\int\int \frac{p_k p_l}{\gamma^2} \frac{\mathbf{k}\cdot\partial f_\alpha^{(0)}/\partial \mathbf{p}}{\omega - \mathbf{k}\cdot\mathbf{p}/\gamma} d^3p\end{aligned} \tag{5.7}$$

où on note b et p les électrons du faisceau et du plasma. La fonction de distribution initiale de chaque composante électronique α est choisie de type "waterbag" et définie par :

$$\begin{aligned} f_\alpha^{(0)}(\mathbf{p}) \quad &= \tfrac{1}{4P_{\alpha\perp}P_{\alpha||}} \Big[\theta(p_x + P_{\alpha\perp}) - \theta(p_x - P_{\alpha\perp})\Big] \\ &\times\delta(p_z)\Big[\theta(p_y - P_{\alpha d} + P_{\alpha||}) - \theta(p_y - P_{\alpha d} - P_{\alpha||})\Big] \end{aligned} \tag{5.8}$$

où θ désigne la fonction de Heaviside. Les impulsions (normalisées par mc) $P_{\alpha d}$, $P_{\alpha||}$, et $P_{\alpha\perp}$ désignent respectivement la dérive (parallèle à y) et les dispersions parallèle et orthogonale de la composante électronique α.

Les intégrales intervenant dans les composantes du tenseur diélectrique peuvent être calculées exactement [103]. Ainsi simplifiée, la relation de dispersion est résolue numériquement en cherchant $\omega(\mathbf{k}) \in \mathbb{C}$ vérifiant $\epsilon(\omega(\mathbf{k}), \mathbf{k}) = 0$ pour tout $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$. Comme pour la résolution de la relation de dispersion électrostatique du plasma discrétisé nous employons le solveur dû à Bellavia [50].

Le taux de croissance normalisé Γ/ω_e est donné dans la figure 5.20 en fonction de (k_x, k_y) pour $\gamma_b = \sqrt{1 + P_{bd}^2} = 4$, un rapport de densité électronique $\frac{n_b}{n_p} = 0.1$ et des dispersions $P_{b||} = P_{b\perp} = 0.2$ et $P_{p||} = P_{p\perp} = 0.1$. Notons que ce calcul généralise à l'ensemble du plan (k_x, k_y) les cas particuliers bien connus (quoique pas avec notre choix particulier de fonctions de distribution) des instabilités "deux-faisceaux" ($k_x = 0$) et de filamentation ($k_y = 0$).

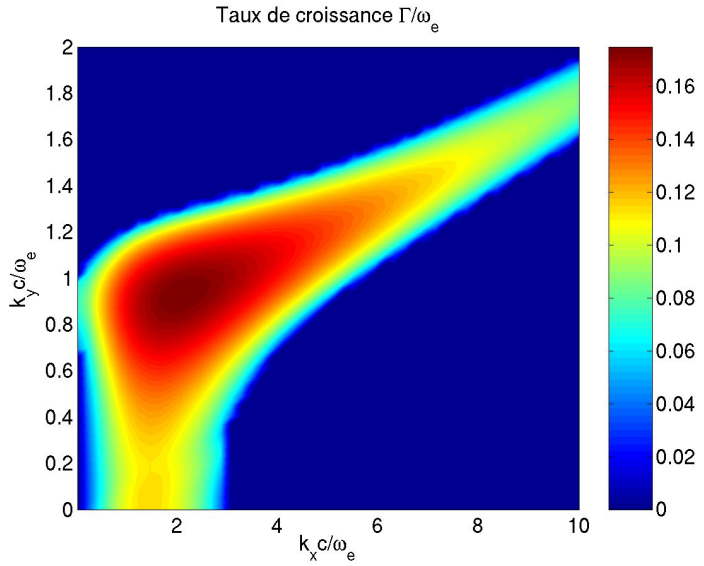


FIGURE 5.20 – Taux de croissance théorique des fluctuations électromagnétiques dans le plan (k_x, k_y).

Le résultat essentiel mis en valeur par la figure 5.20 est que $\Gamma_{max} = 0.17$ est localisé loin des axes en $(k_x, k_y) = (2.07, 0.93)$. On peut vérifier en utilisant la relation $|E_y|/|E_x| = |\epsilon_{xx}|/|\epsilon_{xy}|$, que le champ électrique associé au mode dominant est approximativement parallèle au vecteur d'onde (Fig. 5.21), ce qui atteste la nature essentiellement électrostatique de ce mode.

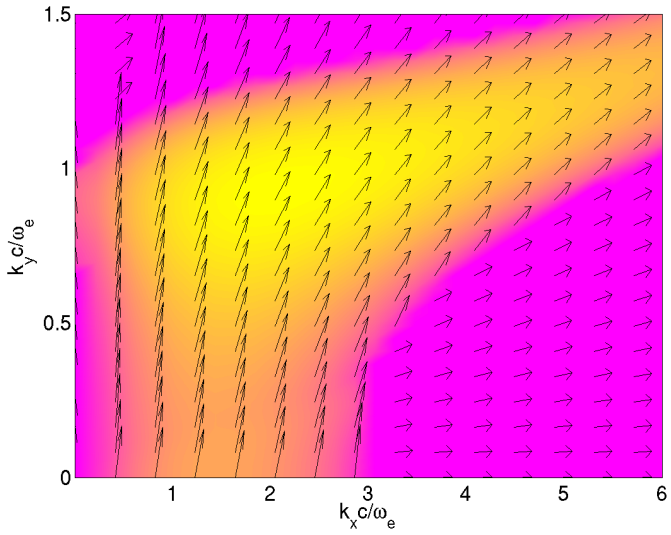


FIGURE 5.21 – Orientation du champ électrique et taux de croissance théorique des fluctuations électromagnétiques dans le plan (k_x, k_y).

A l'inverse, les modes instables situés près de l'axe $k_y = 0$ se caractérisent par $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\omega, \mathbf{k}) \approx 0$, et sont donc essentiellement électromagnétiques. Lorsque la dispersion en impulsion du faisceau augmente, le taux de croissance maximum est atteint plus près de l'axe $k_x = 0$ et on observe une disparition complète de l'instabilité de filamentation transverse. Ce phénomène, caractéristique des distributions de type "waterbag", survient au-delà d'un certain seuil $P^*_{b\perp}$ (~ 0.8 ici). Si on continue d'augmenter $P_{b\perp}$ on observe une transition soudaine d'un mode dominant oblique vers un mode dominant purement parallèle. Le seuil de cette transition ($P_{b\perp} \sim 1.2$ ici) diminue avec le rapport des densités électroniques du faisceau à celle du plasma n_b/n_p [102].

5.5.2 Simulations numériques

Deux simulations ont été réalisées avec les codes Calder et ELIXIRS dans la configuration faisceau-plasma de la figure 5.20. L'objectif est de reproduire les caractéristiques des modes instables dominants prédits par la théorie linéaire précédente. Les deux simulations emploient des conditions aux limites périodiques sur les champs et les particules dans la direction de dérive du faisceau (*i.e* suivant y), et des conditions aux limites réfléchissantes sur les champs et les particules suivant x. La boîte de simulation contient 512×512 mailles (dont 5 mailles de vide de part et d'autre suivant x) avec des pas spatiaux $\frac{\omega_e}{c}\Delta x = \frac{\omega_e}{c}\Delta y = 0.12$. Le pas de temps vaut $\omega_e \Delta t = 0.08$ et $\omega_e \Delta t = 0.4$ dans les cas explicite et implicite respecti-

vement. Le pas de temps maximal, dicté dans le cas de l'instabilité deux-faisceaux, par la pulsation du mode dominant est limité à $\omega_e \Delta t \lesssim 3.9$. Néanmoins, pour les grands pas de temps ($i.e\ \omega_e \Delta t > 1$) l'erreur numérique commise sur la vitesse de phase des ondes n'est plus négligeable et ne permet plus de décrire correctement la phase linéaire de l'instabilité, ce qui justifie notre choix d'un pas de temps modérément grand. Dans le cas implicite, aucun amortissement n'est induit par le paramètre θ_f qui est pris nul. Le pas spatial correspond à deux fois la longueur de Debye estimée à partir de l'énergie moyenne du plasma décrit conformément à la théorie linéaire par une "waterbag" (et non une Maxwellienne). Par ailleurs nous utilisons 14 macro-particules par maille et par espèce ainsi qu'un facteur de forme d'ordre deux. Les deux populations électroniques (faisceau et plasma) sont initialement superposées spatialement. On reprend pour ces simulations $2D$ les mêmes paramètres que ceux correspondant à la figure 5.20.

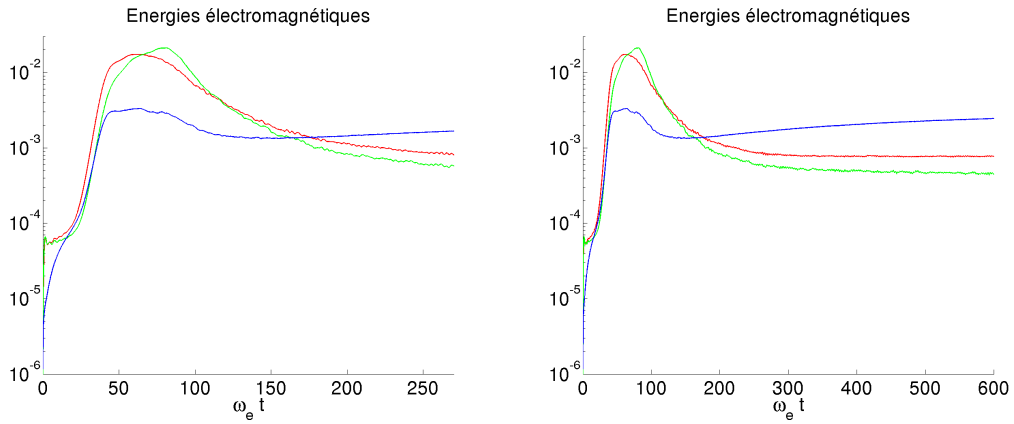


FIGURE 5.22 – Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation explicite avec 14 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu).

Les évolutions temporelles des énergies électromagnétiques obtenues par les méthodes explicite et implicite sont données sur les Figs. 5.22-5.24. Les champs ont une croissance exponentielle jusqu'à $\omega_e t \approx 50$. Au-delà, l'énergie électrique perpendiculaire à la direction de dérive du faisceau $\frac{1}{2\epsilon_0} \int\int dxdy E_x^2$ est la première à saturer. Les énergies électrique et magnétique ont des taux de croissance corrélés entre eux, et on retrouve pour chaque composante de l'énergie électromagnétique ($\int\int dxdy E_x^2, \int\int dxdy E_y^2, \int\int dxdy B_z^2$) le même taux de croissance normalisé $\Gamma_{sim} \approx 0.12$. La différence par rapport à la valeur théorique $\Gamma = 0.17$ attendue en $2D$ est due à la nature multi-modale du champ électromagnétique, qui résulte de la superposition d'un grand nombre de modes instables croissants à partir du niveau de bruit initial. L'énergie électrique est supérieure à l'énergie magnétique dans les deux simulations (Figs. 5.22-5.23), en accord avec la prédiction

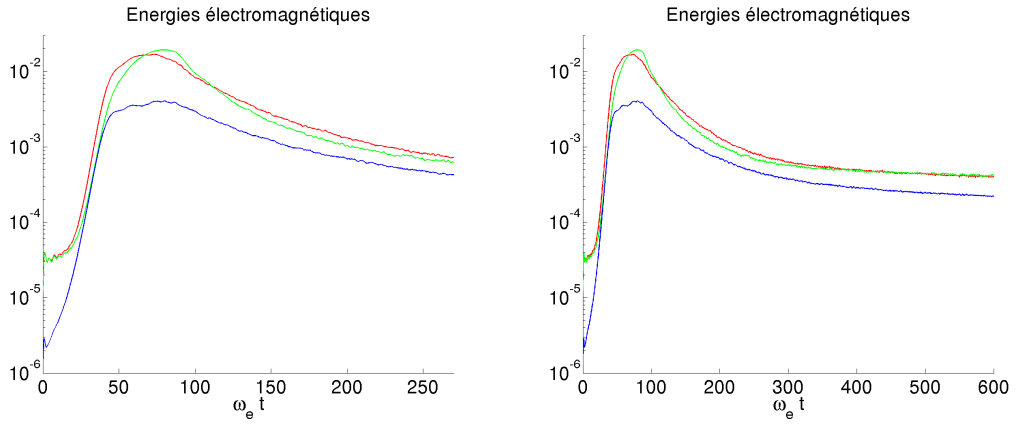


FIGURE 5.23 – Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation implicite avec 14 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu).

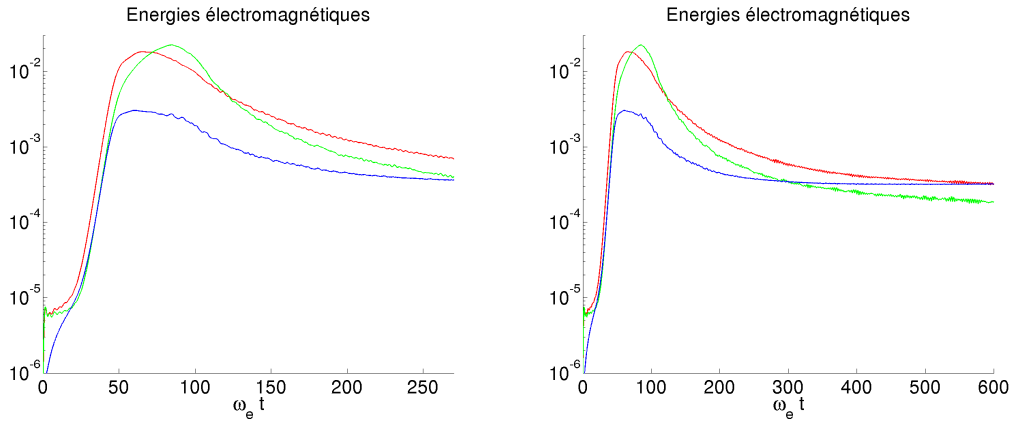


FIGURE 5.24 – Evolution temporelle des énergies électromagnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation explicite avec 100 particules par maille et espèce. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et B_z (en bleu).

théorique de modes dominants électrostatiques. Les niveaux de saturation des énergies électromagnétiques sont comparables, mais un écart apparaît au cours de l'évolution ultérieure de l'énergie magnétique. Cette différence est résorbée en augmentant le nombre de particules dans la simulation explicite (Fig. 5.24). En outre, le niveau de bruit initial est légèrement diminué par la méthode implicite.

Pour approfondir la validation de ces simulations, nous avons construit les cartes de taux de croissance des champs $|E_x(\mathbf{k})|$ et $|B_z(\mathbf{k})|$ entre les instants $\omega_e t = 20$ et 30 de la phase linéaire. Les Figs. 5.25 et 5.26 ont été construites respectivement à partir des spectres électrique $|E_x(\mathbf{k})|$ et magnétique $|B_z(\mathbf{k})|$. Les cartes $\Gamma(k_x, k_y)$ correspondantes ont une résolution spectrale $\Delta k_x = \Delta k_y = 0.1$. Ces cartes confirment le rôle dominant des modes obliques, avec notamment $\Gamma_{max} \approx 0.17$ autour de $(k_x, k_y) \approx (2, 1)$, des valeurs proches de la théorie. L'absence des modes de filamentation ($k_y = 0$) dans la figure associée à $|E_x(\mathbf{k})|$ provient du fait qu'ils correspondent à des valeurs de $|E_x|$ trop faibles, en-deçà du seuil de filtrage appliqué aux spectres pour en réduire le bruit. En revanche, on retrouve ces modes de filamentation en construisant $\Gamma(k_x, k_y)$ à partir de $|B_z(\mathbf{k})|$. Comme en attestent ces deux figures, on retrouve les caractéristiques essentielles de la figure 5.20, ce qui valide le code implicite lorsque $c\Delta t > \frac{\Delta x}{\sqrt{2}}$.

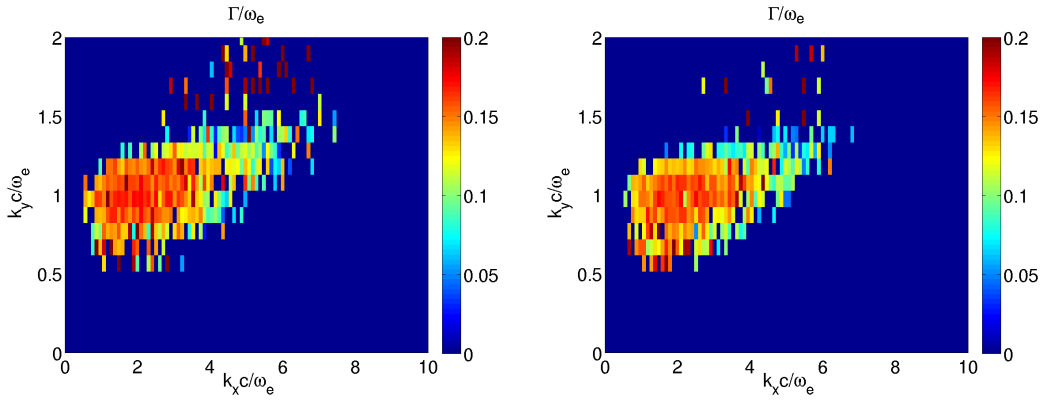


FIGURE 5.25 – Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminés avec $|E_x|$ et $20 < \omega_e t < 30$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite).

A partir de $\omega_e t \approx 50$, la croissance du mode électrostatique dominant ralentit du fait du piégeage des électrons du faisceau. Comme le montre la Fig. 5.27, le ralentissement du faisceau se poursuit de façon marquée jusqu'à $\omega_e t \sim 100$, instant au bout duquel il a perdu environ 30% de son énergie initiale. Cette énergie est quasi-intégralement fournie au plasma. Ce chauffage efficace est dû à la faible vitesse de phase $v_\varphi = \frac{\omega_r}{|k|} \approx 0.36c \sim v_t$ du mode oblique dominant, propice à un important amortissement Landau.

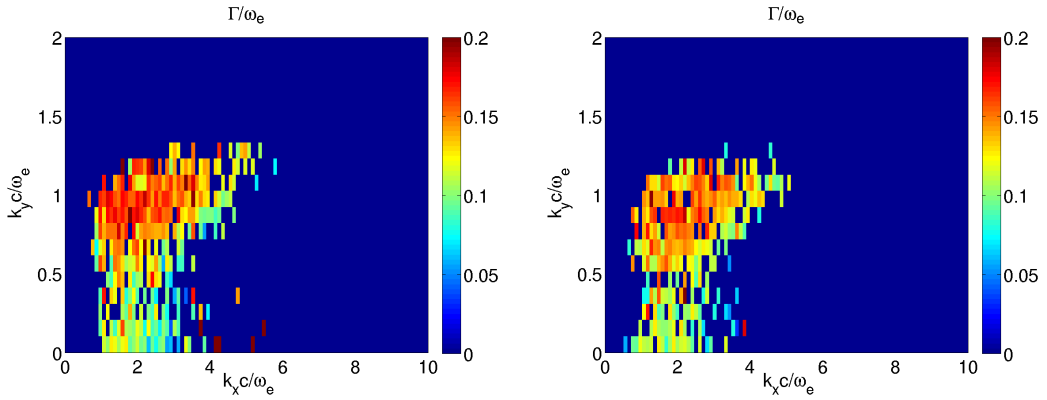


FIGURE 5.26 – Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminés avec $|B_z|$ et $20 < \omega_e t < 30$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite).

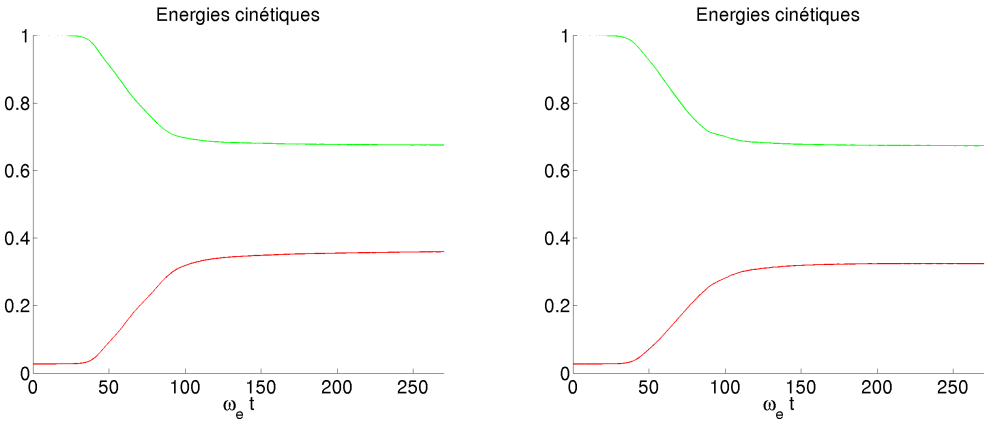


FIGURE 5.27 – Evolution temporelle des énergies cinétiques du plasma (rouge) et du faisceau (vert) normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Simulation avec 14 particules/maille par espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite).

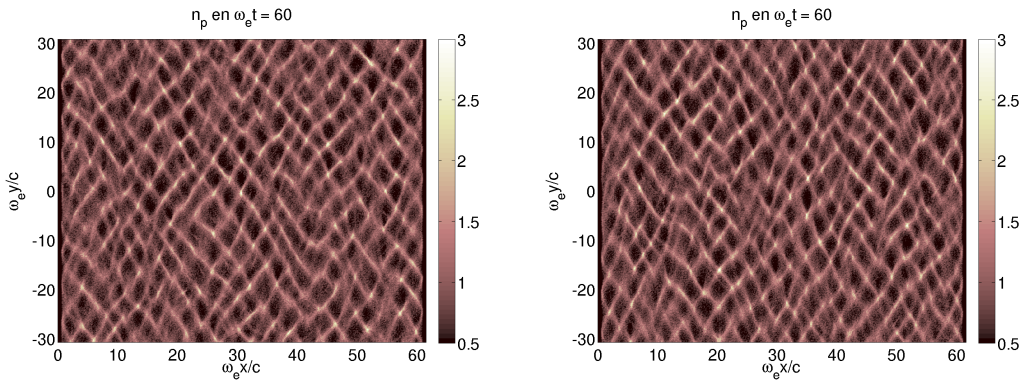


FIGURE 5.28 – Cartes de densité des électrons du plasma à $\omega_e t = 60$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite).

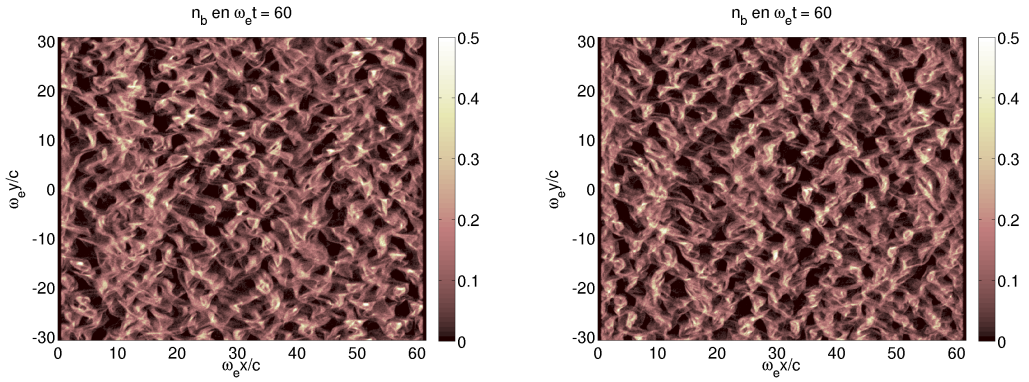


FIGURE 5.29 – Cartes de densité des électrons du faisceau à $\omega_e t = 60$. Simulation avec 14 particules par maille et espèce cinétique : Calder (à gauche) et ELIXIRS (à droite).

Les figures 5.28 et 5.29 illustrent l'influence de la croissance des champs E_x, E_y, et B_z sur les profils de densité électronique du faisceau et du plasma au moment de la saturation de l'instabilité ($\omega_e t = 60$). La carte de densité du faisceau met en évidence une structure de filaments entrelacés dans deux directions obliques avec une symétrie par rapport à la direction de dérive du faisceau. Du fait de leur densité plus élevée, les électrons du plasma sont soumis quant à eux à une modulation oblique plus superficielle. Dans les deux cas, les calculs explicite et implicite donnent des résultats similaires.

5.6 Instabilité de filamentation relativiste

5.6.1 Théorie linéaire

L'instabilité de filamentation appartient à une catégorie d'instabilités électromagnétiques gouvernées par l'anisotropie de la fonction de distribution dont les premières études remontent à Weibel [104]. Cette instabilité prend sa source dans la déflexion magnétique de deux faisceaux contra-propagatifs de particules portant une charge de même signe et aboutit à la formation de filaments de courant. Dans ce qui suit, l'anisotropie résulte d'une dérive perpendiculaire au plan (xy) (dans lequel évoluent les particules) imposée aux deux populations électroniques. Du fait de la symétrie de révolution du système autour de l'axe z, nous pouvons restreindre notre analyse linéaire à des vecteurs d'onde parallèles à Oy. La relation de dispersion qui régit les fluctuations électromagnétiques dans un plasma homogène, non magnétisé et en l'absence de collision s'écrit :

$$\epsilon_{yy}\left(\omega^2\epsilon_{zz} - k_y^2\right) - \epsilon_{yz} = 0 \tag{5.9}$$

A la différence de la section précédente nous avons considéré des espèces électroniques décrites par des fonctions de Maxwell-Jüttner [105, 106] :

$$f_\alpha^{(0)}(\vec{p}) = \frac{\mu_\alpha}{4\pi\gamma_\alpha^2 K_2\left(\frac{\mu_\alpha}{\gamma_\alpha}\right)} \exp\left[-\mu_\alpha(\gamma_\alpha - \beta_\alpha p_z)\right], \quad \alpha = b, p \tag{5.10}$$

où γ_α est le facteur relativiste, K_2 une fonction de Bessel de deuxième espèce, $\beta_\alpha = (1-1/\gamma_\alpha^2)^{1/2}$ et $\mu_\alpha = \frac{mc^2}{k_B T_\alpha}$ l'inverse de la température de chaque composante.

Le taux de croissance de l'instabilité $\Gamma = +\Im(\omega)$ est donné en fonction du mode k sur la Fig. 5.30 (gauche), pour un rapport de densité du faisceau et du plasma $n_b/n_p = 0.8$, $\gamma_b = 4$, $T_b = 100$ keV et $T_p = 5$ keV. Le taux de croissance culmine en $k_{max} \approx 0.93$ où il atteint $\Gamma_{max} \approx 0.28$. La Fig. 5.30 (droite) représente le rapport $\frac{E_y}{E_z}$. Elle révèle l'importance de la composante électrostatique (E_y) du mode dominant de filamentation. Cette propriété, longtemps occultée, est caractéristique d'un plasma constitué de populations de facteurs relativistes et/ou de températures distinctes [105, 107].

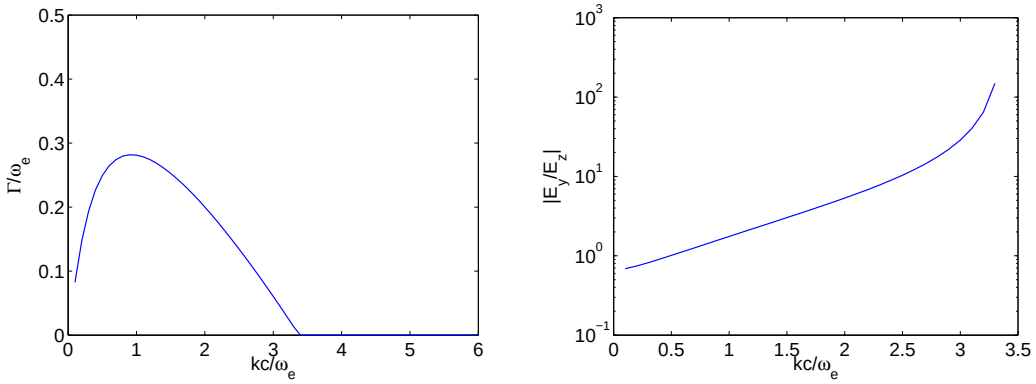
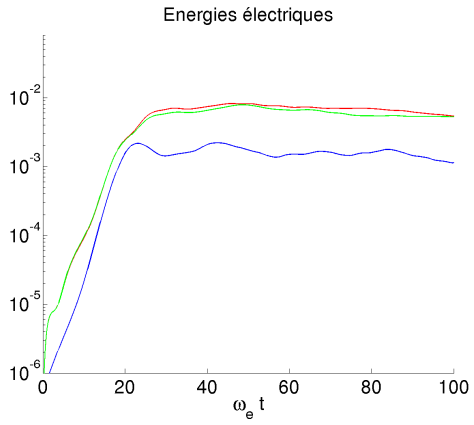


FIGURE 5.30 – Taux de croissance (gauche) et rapport des composantes électrostatique et électromagnétique du champ électrique (droite) pour $n_b/n_p = 0.8$, $\gamma_b = 4$, $T_b = 100$ keV et $T_p = 5$ keV.

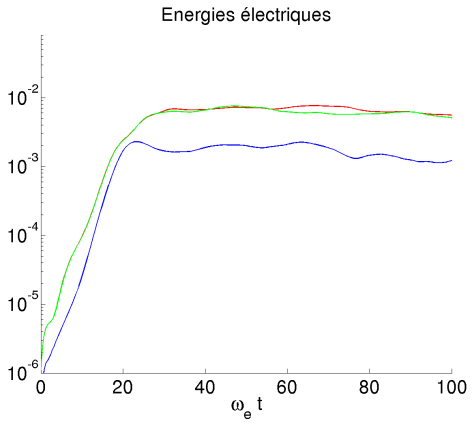
5.6.2 Simulations numériques

Deux simulations $2D$ en espace et $3D$ en vitesse ont été réalisées avec les codes Calder et ELIXIRS dans la configuration faisceau-plasma de Fig. 5.30 afin de reproduire les caractéristiques des modes instables dominants prédits par la théorie linéaire. Les deux simulations emploient des conditions aux limites périodiques sur les champs et les particules dans la direction y, et réfléchissantes dans la direction x. La boîte de simulation contient 512×512 mailles dont 5 mailles de vide aux bords gauche et droit. Nous avons des pas spatiaux $\frac{\omega_e}{c}\Delta x = \frac{\omega_e}{c}\Delta y = 0.2$, et un pas temporel $\omega_e \Delta t = 0.1$ et $\omega_e \Delta t = 0.4$ pour les simulations explicite et implicite respectivement. Nous pourrions utiliser un pas de temps bien plus grand dans le cas implicite, la limite physique contraignante étant cette fois ci associée au taux de croissance du mode le plus instable, il en découle $\omega_e^{max}\Delta t \lesssim 10$. En cela, la simulation implicite qui suit ne constitue qu'un résultat préliminaire. Comme précédemment nous utilisons 14 macro-particules par maille et un facteur de forme d'ordre deux.

L'évolution temporelle des énergies électriques et magnétiques est donnée sur les Figs. 5.31 et 5.32 respectivement. Les résultats obtenus par les approches explicite et implicite sont quasiment identiques. Les taux de croissance moyens calculés à partir de l'énergie des champs B_x et B_y entre les instants $\omega_e t = 8$ et 16 ont la même valeur $\Gamma \approx 0.2$. Comme prévu par la théorie linéaire, la composante électrostatique du champ électrique prévaut sur la composante électromagnétique comme en atteste la mesure du rapport $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{E_x^2(t)+E_y^2(t)}{E_z^2(t)}\right)^{1/2}$, qui durant la phase linéaire varie entre 1.4 et 2.2 (Figs. 5.31 et 5.35) en bon accord avec la prédiction théorique (≈ 1.7) de la Fig. 5.30 (droite). De même la contribution de la force élec-

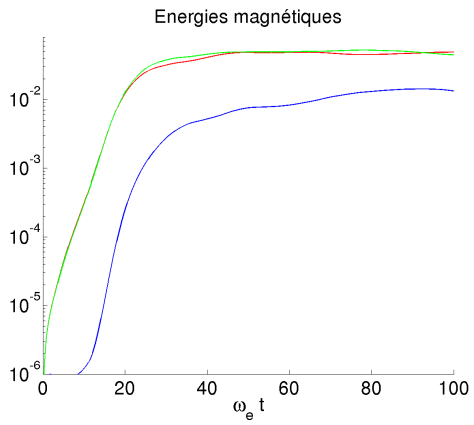


(a) Simulation explicite

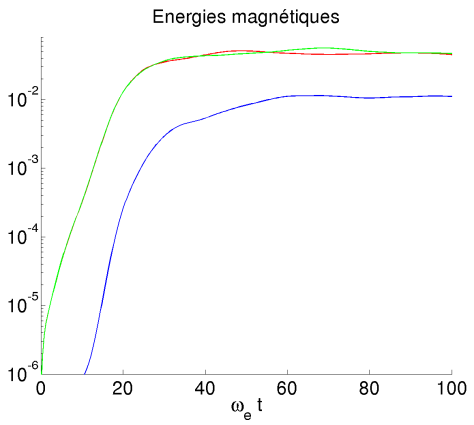


(b) Simulation implicite

FIGURE 5.31 – Evolution temporelle des énergies électriques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Énergie du champ E_x (en rouge), E_y (en vert) et E_z (en bleu).



(a) Simulation explicite



(b) Simulation implicite

FIGURE 5.32 – Evolution temporelle des énergies magnétiques du plasma normalisées par l'énergie cinétique initiale du faisceau. Énergie du champ B_x (en rouge), B_y (en vert) et B_z (en bleu).

trique relativement à la force de Laplace mesurée par le rapport $\left(\frac{E_x^2(t)+E_y^2(t)}{B_x^2(t)+B_y^2(t)}\right)^{1/2}$ évolue entre 0.45 et 0.6 (Figs. 5.32 et 5.35) en accord avec la prédiction (≈ 0.5).

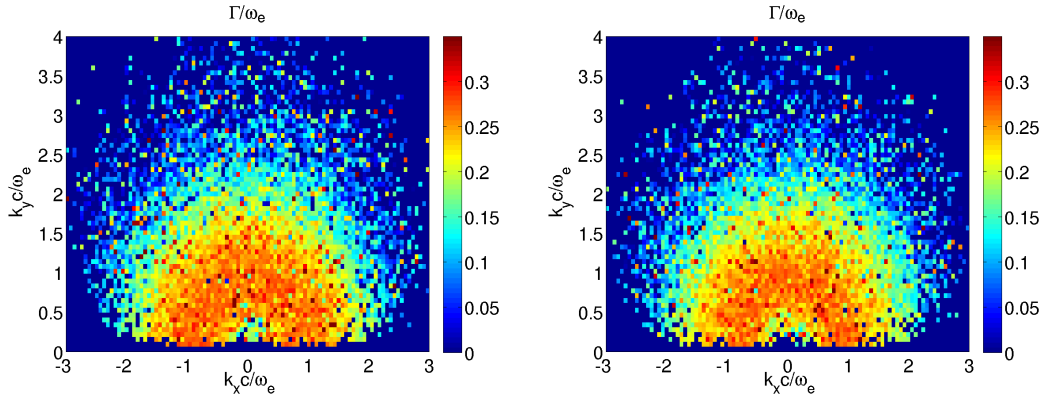


FIGURE 5.33 – Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminé avec $|B_x|$ et $8 < \omega_e t < 16$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite).

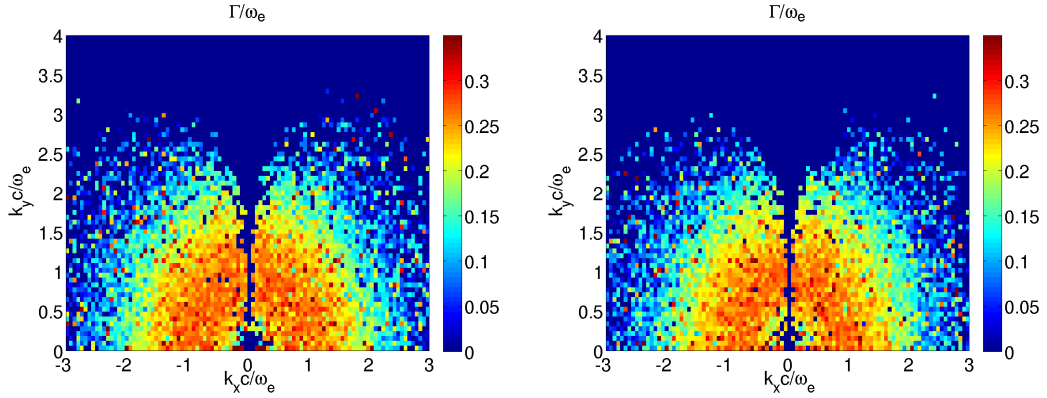
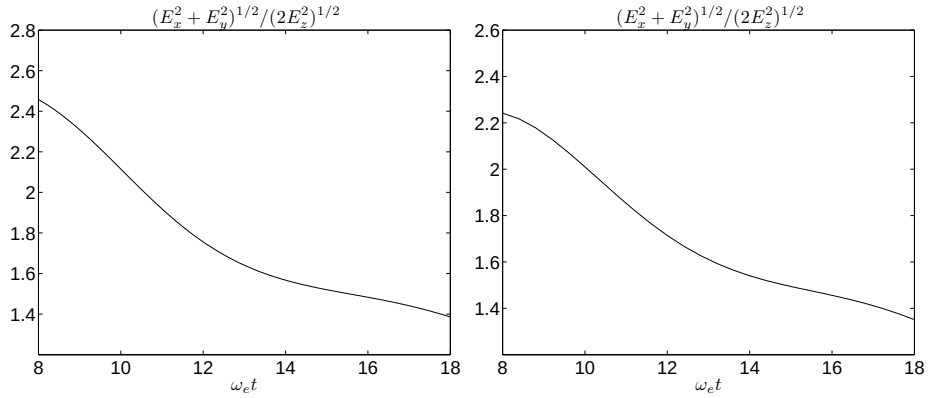


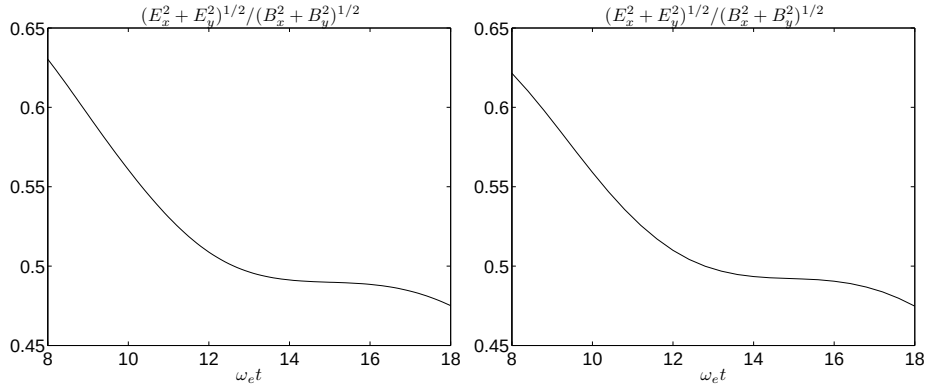
FIGURE 5.34 – Taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ déterminé avec $|B_y|$ et $8 < \omega_e t < 16$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite).

Les Figs. 5.33 et 5.34 donnent le taux de croissance $\Gamma(k_x, k_y)$ mesuré pendant la phase linéaire à partir des champs B_x et B_y respectivement. Chacune de ces cartes présente un taux de croissance $\Gamma_{max} \approx 0.3$ au voisinage du cercle d'équation $k_x^2 + k_y^2 \approx 1$, conformément à la prédiction théorique $(k_{max}, \Gamma_{max}) = (0.93, 0.28)$ de Fig. 5.30 (gauche). Là encore, aucune différence significative n'apparaît entre spectres explicite et implicite.

Le développement spatial de l'instabilité est illustré sur la Fig. 5.36 la phase linéaire conduit à la formation de micro-filaments de courant ($\omega_e t = 24$). Bien qu'écranté, le champ magnétique propre à chaque filament permet à celui-ci d'interagir avec ses voisins se propageant dans le même sens. L'attraction entre courants de même signe entraîne alors des coalescences ($\omega_e t = 40$ et 60). Chaque



(a) Simulation Calder (b) Simulation ELIXIRS



(c) Simulation Calder (d) Simulation ELIXIRS

FIGURE 5.35 – Prédominance des effets électrostatiques sur les effets électromagnétiques pendant la phase linéaire de l'instabilité.

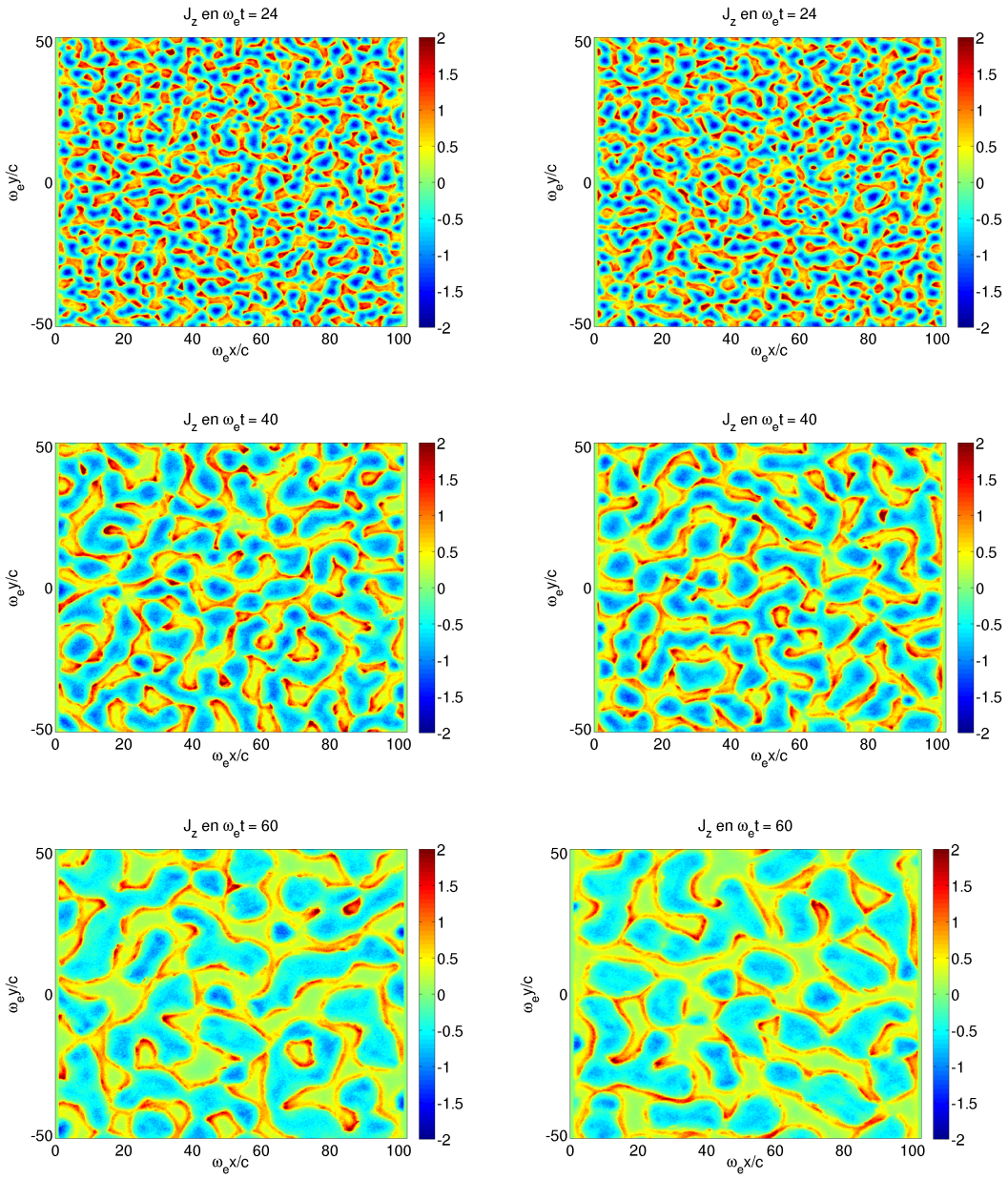


FIGURE 5.36 – Densités de courant $J_z(x, y)$ à différents instants $\omega_e t = 24, 40, 60$. Simulations explicite (gauche) et implicite (droite).

coalescence donne lieu à une croissance de l'énergie magnétique qui, en retour, ralentit le faisceau [108].

5.7 Interaction laser-plasma dense en régime relativiste

Abordons maintenant le problème de l'interaction d'une impulsion laser d'intensité relativiste avec un plasma sur-critique, cette application constituant l'objectif essentiel de la méthode implicite généralisée développée dans cette thèse.

5.7.1 Cible épaisse quasi-1D

Dans un premier temps, nous considérons un système laser-plasma quasi-1D. Nous irradions une lame de plasma de densité $200n_c$, de longueur $60c/\omega_0$ précédée par une région de longueur $18c/\omega_0$ où la densité croît linéairement de 0 à $200n_c$, les espèces électronique et ionique ont une température initiale de 1 keV. Cette cible est éclairée par une onde plane électromagnétique d'intensité constante pendant $120\omega_0^{-1}$ avec un temps de montée de $22\omega_0^{-1}$ et une amplitude normalisée $a_0 = eE_0/m_e c\omega_0 = 3$. La simulation implicite emploie un maillage $2048\Delta x \times 4\Delta y$, avec $\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$ et $\Delta t = 0.14\omega_0^{-1}$, ce qui correspond en unités plasma à $\Delta x/\lambda_D = 32$ et $\omega_p \Delta t = 2$ (soit $v_t \Delta t/\Delta x = 0.06$). On utilise des conditions aux limites ouverte et périodique pour les champs électromagnétiques suivant les axes x et y, respectivement. Les particules sont soumises à des conditions aux limites périodiques suivant y, et ré-injectantes avec leur température initiale suivant x. Le paramètre d'amortissement du solveur électromagnétique, de même que celui du pousseur de particules, est pris nul dans le vide et la région modérément dense du plasma jusqu'à $n_e = 60n_c$. Ailleurs, c'est à dire dans les régions les plus denses du plasma, il est pris égal à 1. Guidés par les résultats de Sec. 5.3, nous utilisons un facteur de forme quadratique pour réduire le chauffage numérique. Le nombre de macro-particule par cellule N_p varie de 100 à 1300. Les résultats obtenus sont comparés avec des simulations explicites de mêmes paramètres, à l'exception d'un pas de temps $\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$ afin de satisfaire la condition de stabilité de Courant.

Le tableau 5.10 compare les variations de l'énergie totale (calculées après réflexion complète de l'impulsion laser sur la cible) dans les cas explicite et implicite. Les résultats des simulations implicites sans amortissement sont aussi donnés. Dans l'ensemble, les simulations implicites conservent mieux l'énergie que leurs équivalents explicites. Pour $N_p = 100$ la dégradation des résultats par auto-chauffage excessif des électrons est moindre dans le cas implicite amorti en tout point ($\theta_f = 1$). Les avantages d'un schéma fortement amorti dans la région la plus dense du plasma ($n_e > 60n_c$) sont plus clairs à $N_p = 1300$ et 400. Les

	Explicite	Implicite ($\theta_f = 0$)	Implicite ($\theta_f = 1$ si $n_e > 60n_c$)
$N_p = 1300$	$+14.4\%$	$+6\%$	-3%
$N_p = 400$	$+15.3\%$	$+10.5\%$	-1%
$N_p = 100$	$+22\%$	$+25.5\%$	$+12.7\%$

TABLE 5.10 – Interaction laser-plasma quasi-1D : variation de l'énergie dans les simulations explicite ($\Delta t = 0.05\omega_0^{-1}$) et implicite ($\Delta t = 0.14\omega_0^{-1}$) pour différentes valeurs de θ_f. Les autres paramètres de simulation sont précisés dans le texte.

performances en demi-teinte obtenues par les calculs explicites nous ont poussé à effectuer une simulation explicite additionnelle, mieux résolue afin de disposer d'une référence fiable. Cette simulation a requis un maillage $4096\Delta x \times 8\Delta y$ avec $\Delta x = \Delta y = 0.05c/\omega_0$ et $\Delta t = 0.03\omega_0^{-1}$, ainsi qu'un facteur de forme d'ordre 3 et $N_p = 650$. Nous avons obtenu dans ce cas une variation de l'énergie totale d'environ 4%.

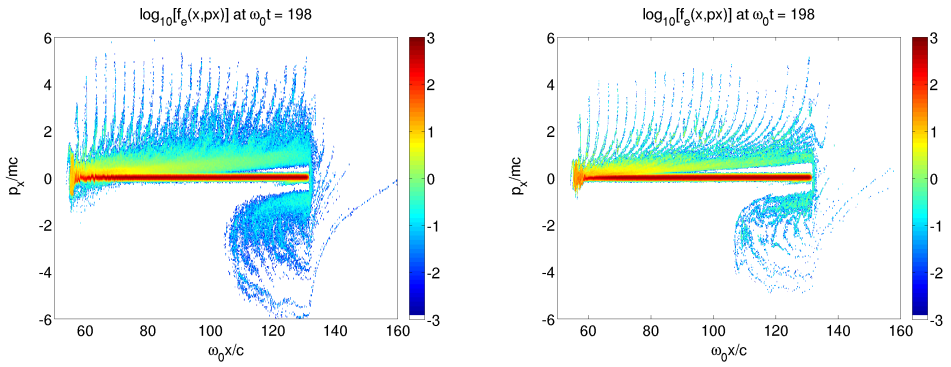


FIGURE 5.37 – Espace des phases (x, p_x) des électrons à $t = 198\omega_0^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte.

L'espace des phases (x, p_x) des électrons (intégré dans la direction y) est donné par la Fig. 5.37 pour les schémas explicite (finement résolu) et implicite. En accord avec le mécanisme de chauffage par effet pondéromoteur qui se manifeste pour les intensités laser relativistes, les électrons rapides sont accélérés dans la cible par paquets séparés d'une demi-longueur d'onde laser [66, 67]. La simulation explicite prédit des impulsions électroniques maximales 20% supérieures à celles prédites par la simulation implicite. L'amortissement des modes électrostatiques faisceau-plasma longitudinaux entraîne une séparation plus marquée entre les populations d'électrons thermiques et rapides lorsque ces derniers se propagent à travers la cible. Dans le cas d'une configuration réaliste mettant en jeu un plasma de densité solide, le chauffage non-collisionnel dû au mélange d'ondes créé par interaction

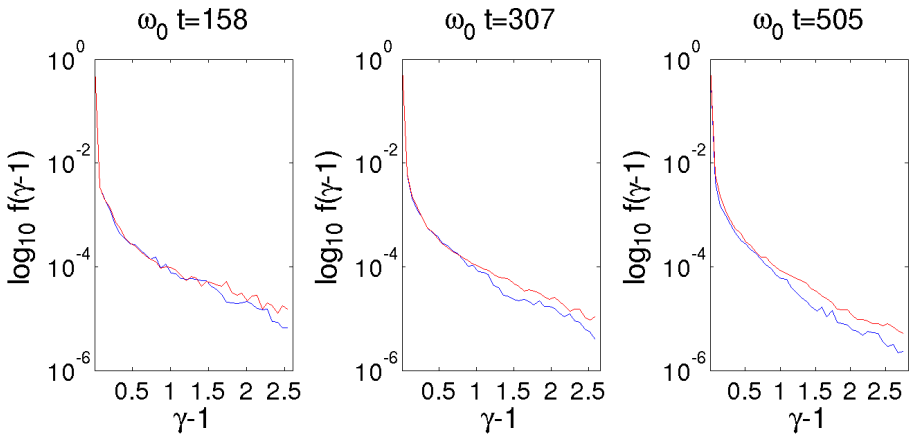


FIGURE 5.38 – Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulations explicite (en rouge) et implicite (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$.

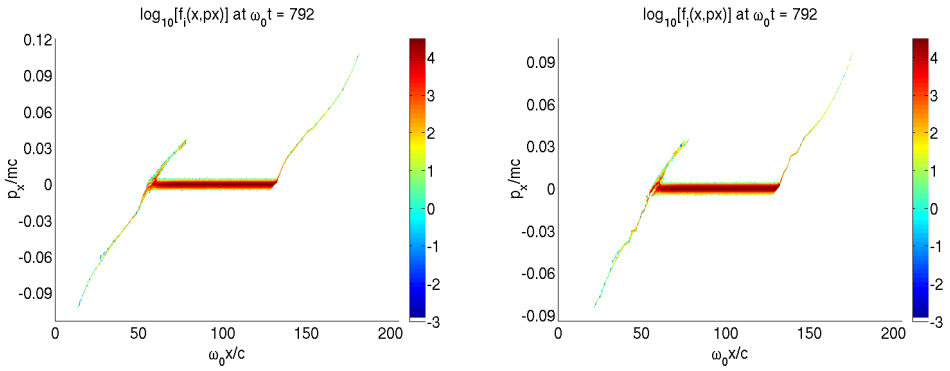


FIGURE 5.39 – Espace des phases (x, p_x) des ions à $t = 792\omega_0^{-1}$: simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte.

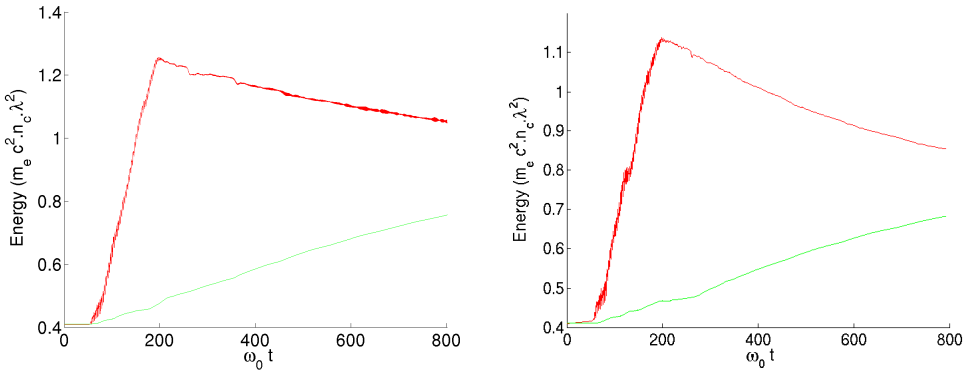


FIGURE 5.40 – Evolution temporelle des énergies cinétiques des électrons (en rouge) et des ions (en vert) : simulations explicite (à gauche) et implicite avec $\theta_f = 1$ (à droite). Dans les deux cas, $N_p = 1300$. Les autres paramètres de simulation sont fournis dans le texte.

faisceau-plasma que l'on observe dans le cas explicite devrait être supprimé par les collisions, comme démontré par Kemp et al. [40]. Cependant, ces écarts dans les espaces des phases ne se traduisent pas par des différences significatives dans les distributions en énergie des électrons comme montré à trois instants successifs dans Fig. 5.38. En particulier, la pente de la partie haute énergie du spectre est correctement reproduite. L'espace des phases (x,p_x) ionique est représenté sur la Fig. 5.39. On y retrouve les trois populations énergétiques attendues : les ions entraînés dans le vide par les électrons rapides de part et d'autre de la cible, et ceux poussés dans la cible par la pression radiative. L'impulsion maximale atteinte par les ions en fin de simulation est $\sim 15\%$ en deçà de la valeur atteinte dans le cas explicite.

5.7.2 Cible 2D de dimensions réalistes

Nous considérons à présent un système laser-plasma complètement bidimensionnel. La lame de plasma constituée d'électrons et d'ions a une densité maximale de $200n_c$, une température de 1 keV et une épaisseur de $6c/\omega_0$. Une rampe de densité linéaire longue de $12c/\omega_0$ est ajoutée à l'avant de la cible. La boîte de simulation contient 1024×512 mailles avec $\Delta x = \Delta y = 0.1c/\omega_0$ ($\Delta x/\lambda_D = 32$). Les paramètres du laser incident sont inchangés, à l'exception du profil transverse que l'on prend gaussien avec une largeur à mi-hauteur de $12c/\omega_0$. A cause des contraintes de mémoire, nous nous limitons à un faible nombre de macroparticules par maille $N_p = 40$. Afin de stabiliser le système, en plus d'utiliser un facteur de forme d'ordre deux, nous augmentons significativement le pas de temps par rapport aux simulations précédentes : $\Delta t = 0.3\omega_0^{-1}$, ce qui correspond à $\omega_p \Delta t = 4.2$ et $v_t \Delta t/\Delta x = 0.13$. Les paramètres d'amortissement ajustables

du solveur électromagnétique et du pousseur de particule sont identiques. Nous avons $\theta_f = 0$ dans les régions de faible densité ($n_e \leq 30 n_c$). Dans les régions plus denses du plasma nous avons testé deux valeurs de ce paramètre : $\theta_f = 0.1$ et 0.5. La simulation explicite de référence utilise un facteur de forme cubique avec les paramètres $\Delta x = \Delta y = 0.08 c/\omega_0$, $\Delta t = 0.05 \omega_0^{-1}$ et $N_p = 160$. Ce calcul parallèle prend 4.5h sur 64 processeurs 1.6 GHz Itanium 2. En comparaison, les simulations implicites (séquentielles) prennent $\sim$ 27h sur un processeur 2.66 GHz X5355 Intel Xeon .

L'évolution temporelle des énergies cinétiques est tracée sur la Fig. 5.41. Toutes les simulation prédisent quasiment le même pic d'énergie électronique. Une fois encore l'amortissement propre aux simulations implicites est reflété par la décroissance plus rapide de l'énergie électronique. La variation de l'énergie totale déterminée sur l'intervalle $215 < \omega_0 t < 715$ (c'est-à-dire après réflexion complète de l'impulsion laser et avant que les ions les plus énergétiques atteignent les bords de la boîte de simulation) vaut -12% et -15% pour les cas implicites avec $\theta_f = 0.1$ et $\theta_f = 0.5$, respectivement, à comparer au $+5\%$ du cas explicite.

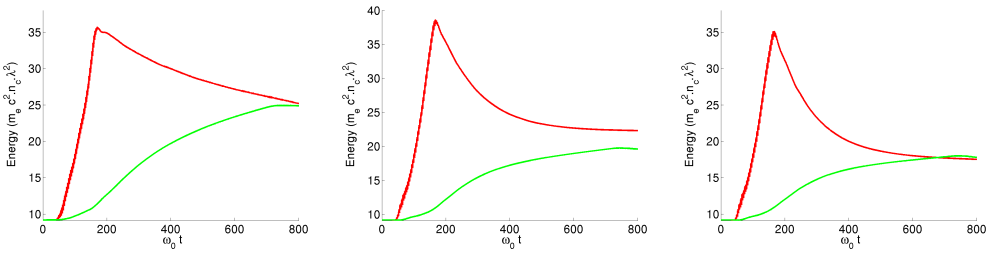
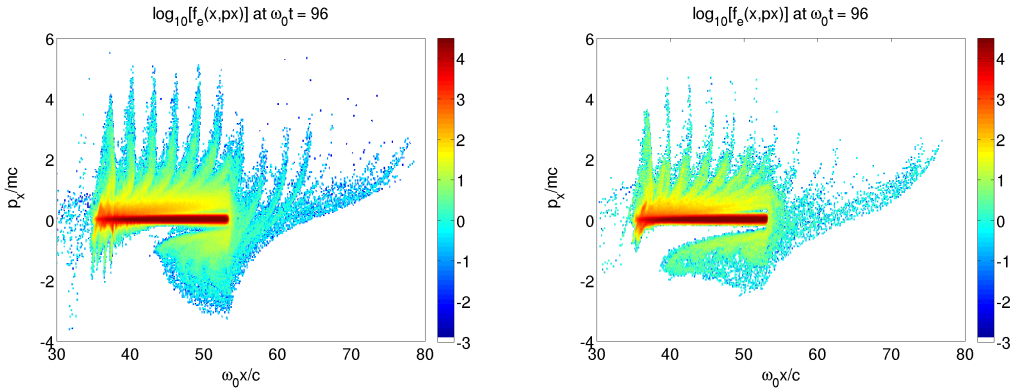
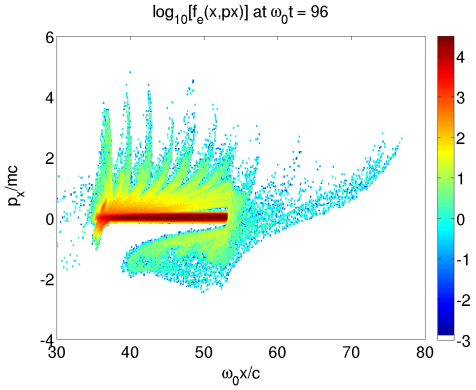


FIGURE 5.41 – Evolution temporelle de l'énergie cinétique des électrons (en rouge) et des ions (en vert) : simulation explicite (à gauche), simulations implicites avec $\theta_f = 0.1$ (au centre) et $\theta_f = 0.5$ (à droite).

En dépit de leur résolution temporelle grossière et du nombre limité de macroparticules, les simulations implicites reproduisent convenablement les caractéristiques essentielles de l'accélération électronique et ionique. Ces propriétés sont mises en évidence par les espaces des phases électroniques et ioniques Figs. 5.42 et 5.43, ainsi que par les spectres électroniques de la Fig. 5.46. De même que dans la section précèdente, mais dans une moindre mesure grâce à l'amortissement numérique plus faible employé ici, les simulations implicites sous-estiment les énergies électroniques finales. Les caractéristiques spatiales des électrons rapides sont particulièrement mises en évidence sur la carte $2D$ de densité d'énergie cinétique de la Fig. 5.44. Les trois cas test sont en bon accord. Chaque calcul montre la propagation caractéristique de paquets d'électrons émis à $2\omega_0$ et leur sortie dans le vide.

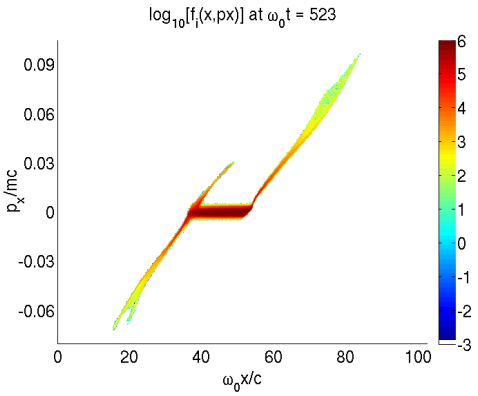


(a) Explicite (b) Implicite $\theta_f = 0.1$

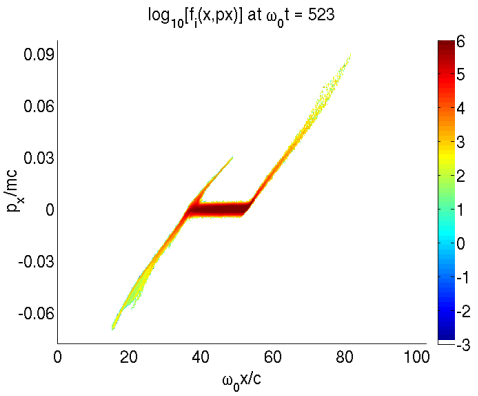


(c) Implicite $\theta_f = 0.5$

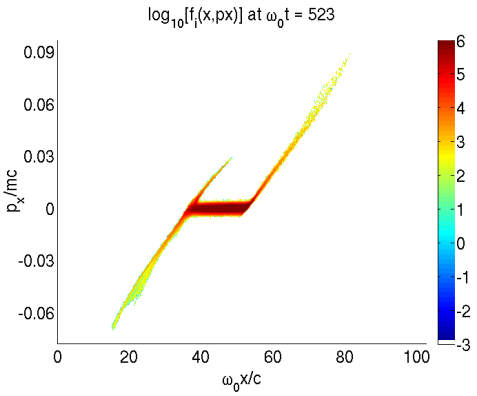
FIGURE 5.42 – Espace des phases (x, p_x) des électrons à $t = 96\omega_0^{-1}$: simulation explicite et implicites avec $\theta_f = 0.1$ et $\theta_f = 0.5$.



(a) Explicite



(b) Implicite $\theta_f = 0.1$



(c) Implicite $\theta_f = 0.5$

FIGURE 5.43 – Espace des phases (x, p_x) des ions à $t = 523\omega_0^{-1}$: simulation explicite et implicites avec $\theta_f = 0.1$ et $\theta_f = 0.5$.

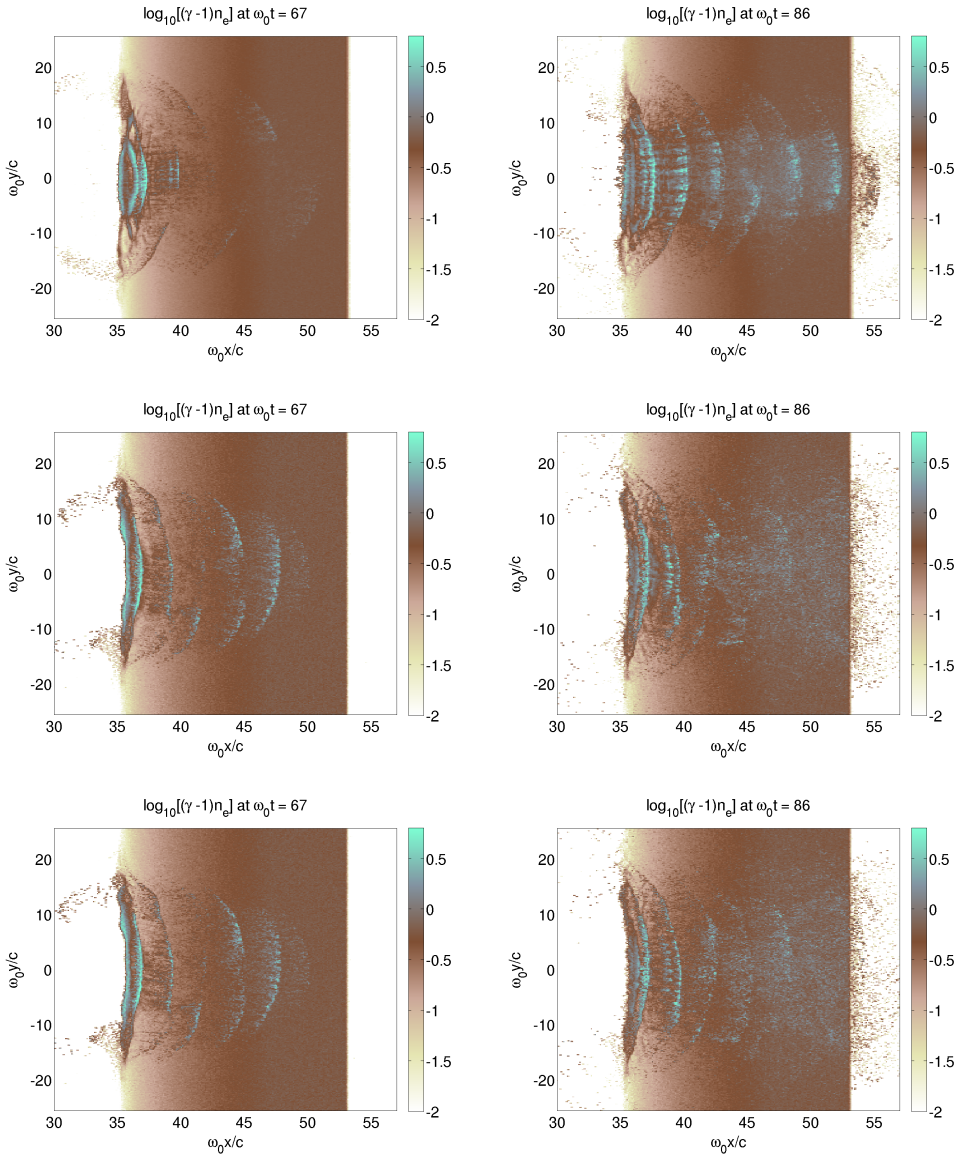


FIGURE 5.44 – Densité d'énergie cinétique des électrons (normalisée par $m_e c^2 n_c$) à $t = 67\omega_0^{-1}$ et $t = 86\omega_0^{-1}$: simulation explicite (en haut) et simulations implicites avec $\theta_f = 0.1$ (au centre) et $\theta_f = 0.5$ (en bas).

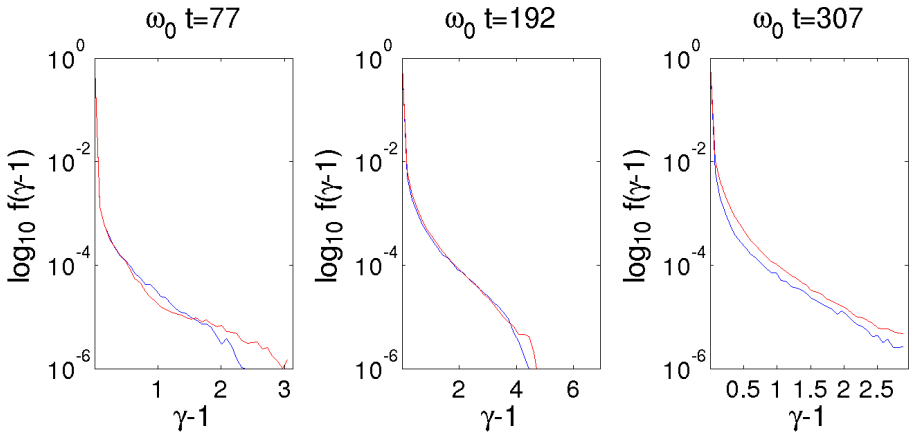


FIGURE 5.45 – Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulation explicite (en rouge) et simulation implicite avec $\theta_f = 0.1$ (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$.

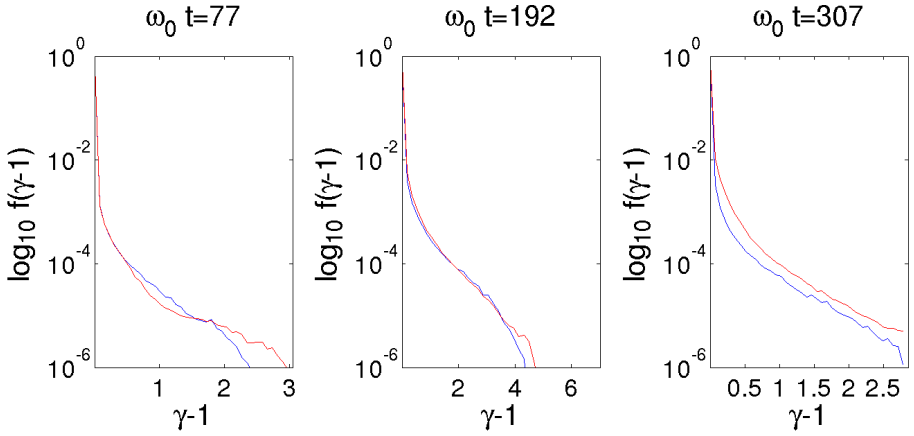


FIGURE 5.46 – Distribution en énergie des électrons à différents instants : simulation explicite (en rouge) et simulation implicite avec $\theta_f = 0.5$ (en bleu). L'énergie est normalisée par $m_e c^2$.

5.8 Conclusions

A la différence de travaux récents [88, 26, 87] réalisés à l'aide du code implicite LSP, notre schéma implicite direct relativiste, mis en oeuvre dans le code ELIXIRS 2Dx-3Dv, permet l'emploi de fonctions de forme d'ordre élevé et l'amortissement ajustable des ondes hautes fréquences. Cette propriété, qui étend aux ondes électromagnétiques une méthode initialement conçue par Friedman [41] pour les ondes électrostatiques, autorise au sein d'un même algorithme la propagation sans dissipation, et sans condition de Courant, de l'impulsion laser incidente dans le vide, tout en s'affranchissant de la nécessité de résoudre les modes collectifs haute fréquence dans la région dense du plasma. Après une démonstration originale de la méthode implicite directe, avec amortissement ajustable, comme un schéma de Newton simplifié à une itération, nous avons mené une analyse minutieuse des propriétés électromagnétiques et électrostatiques du schéma. Cette étude, qui prend en compte l'influence des pas Δt et Δx, l'ordre de la fonction de forme et le paramètre d'amortissement fournit des indications en bon accord avec les simulations.

Nous avons effectué de nombreux tests dont les résultats sont comparables à ceux obtenus par des simulations explicites finement résolues. En particulier, nous avons montré que notre code pouvait capturer les principales caractéristiques de l'interaction laser-plasma malgré une faible résolution spatio-temporelle. Dans le domaine des instabilités faisceau-plasma, nous avons montré que la méthode implicite permet également d'obtenir des gains substantiels en temps de calcul par rapport aux simulations explicites. La méthode implicite directe se révèle, de surcroît, particulièrement robuste pour un faible nombre de macro-particules par maille. Néanmoins, pour rivaliser pleinement avec les codes PIC explicites, qui bénéficient des progrès constants des calculateurs parallèles, ELIXIRS devra être parallélisé.

Perspectives

Parmi les perspectives, on peut distinguer des développements relativement simples portant sur certains aspects du schéma PIC implicite, et un développement de fond à plus long terme visant à paralléliser le code ELIXIRS.

A l'instar des résultats PIC explicites, nous pouvons à coup sûr étendre le domaine de fonctionnement du code implicite en utilisant des fonctions d'interpolation d'ordre trois ou quatre. Cette modification rendrait le schéma moins sensible à l'instabilité d'*aliasing*, autorisant une meilleure conservation de l'énergie lorsque $v_t \Delta t / \Delta x < 0.1$.

Une modification de l'algorithme de Newton pourrait être envisagée en retenant le terme $\nabla \mathbf{E}$, négligé jusque là, et en utilisant les conditions initiales présentées dans la Sec. 4.2.4. De même, nous résolvons les équations de Lorentz avec un schéma prédicteur-correcteur dont l'étape de prédiction est formellement celle d'un schéma d'Euler explicite et l'étape de correction celle d'un schéma d'Euler implicite. En nous appuyant sur le formalisme mis en place dans la section 4.2, nous pourrions facilement utiliser d'autres schémas prédicteur-correcteur, par exemple du type multi-pas en temps. Néanmoins, les méthodes multi-pas sont bien adaptées pour les problèmes non-raides, c'est à dire ne présentant pas de fortes variations temporelles. Une éventuelle préférence pour un schéma prédicteur-correcteur multi-pas dépendra donc sensiblement du problème physique étudié.

En outre, nous n'avons pour le moment envisagé que le cas d'une variation abrupte du paramètre d'amortissement ajustable. Une variation spatiale de ce paramètre en fonction de la densité locale du plasma pourrait permettre de rendre compte, de façon plus réaliste, de la diminution progressive de l'influence des oscillations plasmas aux densités solides.

Notre code n'étant à ce jour que séquentiel, son domaine de stabilité, bien qu'étendu, reste insuffisant pour traiter les problèmes à grande échelle déjà accessibles aux codes explicites massivement parallèles. Sa parallélisation apparaît donc nécessaire. On peut pour cela distinguer deux grandes catégories d'opérations : celles portant sur les macro-particules (interpolation, déplacement, projection ...) et celles liées à la résolution des champs. Une parallélisation efficace

doit donc d'une part répartir la charge associée aux calculs des grandeurs particulaires, et doit d'autre part permettre de résoudre l'équation d'onde sur un sous-domaine du domaine global. La parallélisation des opérations portant sur les particules est relativement simple et nous pourrions pour cela nous appuyer sur les routines déjà mises en oeuvre dans le code Calder. Pour la résolution des champs, nous envisageons de mettre en place un solveur linéaire itératif (de type Krylov), plus général que la méthode de Concus et Golub limitée à des conditions aux limites transverses périodiques. Les méthodes GMRES ("Generalized Minimal Residual"), efficacement parallélisables [109, 110], semblent les mieux adaptées à cette fin.

Troisième partie

Annexes

Annexe A

Relation de dispersion généralisée d'un plasma Maxwellien incluant les discrétisations en temps et en espace

Nous restreignons notre analyse à un plasma électrostatique, non relativiste, mono-dimensionnel avec des ions immobiles. Dans la suite nous adoptons la méthodologie et les notations de la Ref. [21]. Pour une macro-particule, le schéma avec amortissement ajustable (4.62)-(4.65) s'écrit de la façon suivante

$$\begin{aligned} x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} &= \frac{\Delta t^2}{2}\left\{a_{n+1} + \frac{a_n}{2} + \frac{a_{n-1}}{2^2} + \frac{a_{n-2}}{2^3} + \dots\right\} \\ &= \frac{\Delta t^2}{2}\left\{a_{n+1} + \frac{\theta_f}{2}a_n + \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2\left[a_{n-1} + \frac{\theta_f}{2}a_{n-2} + \left(\frac{\theta_f}{2}\right)^2 a_{n-3} + \dots\right]\right\} \end{aligned} \tag{A.1}$$

où n est l'indice temporel. Nous supposons que la force électrique interpolée a une forme harmonique $F^{(1)} = F(k)e^{i(kx-\omega t)}$. En conséquence directe du schéma d'interpolation PIC, nous avons la relation [21]

$$F(k) = qE(k)S(-k) \tag{A.2}$$

où $E(k)$ et $S(k)$ représentent les transformées de Fourier discrètes du champ électrique et du facteur de forme d'ordre m, respectivement. Ce dernier s'écrit

$$S(k) = \left[\frac{\sin\left(k\Delta x/2\right)}{k\Delta x/2}\right]^{m+1} . \tag{A.3}$$

Le terme d'accélération du premier ordre peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{F(k)}{m} \exp\left[i(kx_n^{(0)} - \omega t_n)\right] \\ &= \frac{F(k)}{m} \exp\left[ik(x_0 + v^{(0)} t_n) - i\omega t_n\right] \\ &= \frac{F(k)}{m} \exp ikx_0 \exp\left[i(kv - \omega)n\Delta t\right] . \end{aligned} \tag{A.4}$$

En définissant $A(k) = \frac{F(k)}{m} e^{ikx_0}$ et $z = e^{i(kv-\omega)\Delta t}$, l'Eq. (A.4) devient

$$\begin{aligned} x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} &= \frac{\Delta t^2}{2} A(k) \left\{ z^{n+1} + \frac{1}{2} z^n + \left(\frac{1}{2}\right)^2 z^{n-1} + \left(\frac{1}{2}\right)^3 z^{n-2} + \dots \right\} \\ x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} &= \frac{\Delta t^2}{2} A(k) z^n \left\{ z^{-1} \left[\left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 + \frac{\theta_f}{2} z + z^2 \right] \right. \\ &\quad \left. + \left(1 - \frac{\theta_f}{2}\right)^2 \frac{\theta_f}{2} z^{-2} \left(1 + \frac{\theta_f}{2} z^{-1} + \left(\frac{\theta_f}{2}\right)^2 z^{-2} + \dots \right) \right\} . \end{aligned} \tag{A.5}$$

Cette équation peut être simplifiée sous la forme

$$x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} = \frac{\Delta t^2}{2} A(k) 2z^n \frac{[(1 - \theta_f) + z^2]}{2z - \theta_f} . \tag{A.6}$$

En linéarisant $x_n = x_n^{(0)} + x_n^{(1)}$ avec $x_n^{(0)} = x_0^{(0)} + v_0^{(0)} t_n$, nous obtenons

$$x_{n+1}^{(1)} - 2x_n^{(1)} + x_{n-1}^{(1)} = \frac{\Delta t^2}{2} A(k) \mathcal{P}(k), \tag{A.7}$$

où le polynôme $\mathcal{P}$ s'écrit

$$\mathcal{P}(k) = 2z^n \frac{[(1 - \theta_f) + z^2]}{2z - \theta_f} \tag{A.8}$$

$$\tag{A.9}$$

Nous en déduisons que $x_n^{(1)}(x_0, v_0, t_n)$ varie comme $e^{i(kv-\omega)n\Delta t} = z^n$. Et finalement nous obtenons la solution

$$x_n^{(1)} = \frac{\Delta t^2}{m} F(k) e^{i(kx - \omega t)} \left[\frac{z}{(z-1)^2} + \frac{z}{2z - \theta_f} \right] \tag{A.10}$$

Pour déterminer la densité de charge, nous introduisons la polarisation

$$\begin{aligned} P(x,t) &= n_0 q \int dv f_0(v) x_n^{(1)}(x,v,t) \\ &= -\frac{n_0 q}{m} F(k) e^{i(kx-\omega t)} \int dv f_0(v) \frac{1}{\left(\frac{2}{\Delta t}\sin(\omega - kv)\frac{\Delta t}{2}\right)^2} \\ &+ \frac{n_0 q \Delta t^2}{2m} F(k) e^{i(kx-\omega t)} \int dv f_0(v) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i(\omega-kv)s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} \end{aligned} \tag{A.11}$$

Le premier et le second terme du membre de droite correspondent respectivement au schéma standard saute-mouton explicite et à la correction implicite. En faisant l'hypothèse d'une fonction de distribution Maxwellienne $f_0(v) = \frac{1}{v_t\sqrt{2\pi}} exp\left[-\left(\frac{v}{\sqrt{2}v_t}\right)^2\right]$, ce-dernier peut s'écrire

$$\begin{aligned} \int dv f_0(v) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i(\omega-kv)s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} \int dv f_0(v) e^{-ikvs\Delta t} \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} \mathcal{F}(f_0)(ks\Delta t) \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} e^{-\frac{v_t^2}{2}(sk\Delta t)^2} \end{aligned} \tag{A.12}$$

où $\mathcal{F}$ désigne la transformée de Fourier. Ainsi la polarisation devient

$$\begin{aligned} P(x,t) = \frac{n_0 q}{m} F(k) e^{i(kx-\omega t)} \frac{\Delta t^2}{4} \int f_0'(v) \frac{2}{k\Delta t} \operatorname{cotan}\left[(\omega - kv)\frac{\Delta t}{2}\right] dv \\ + \frac{n_0 q \Delta t^2}{2m} F(k) e^{i(kx-\omega t)} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta_f)^s} e^{-\frac{v_t^2}{2}(sk\Delta t)^2} \end{aligned} \tag{A.13}$$

Nous pouvons développer la fonction cotan comme une série sous la forme

$$\operatorname{cotan}\left[(\omega - kv)\frac{\Delta t}{2}\right] = \frac{2}{\Delta t} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\omega - kv - q\omega_g} \tag{A.14}$$

La densité de charge continue est donnée par $\rho_p = -\nabla\cdot\mathbf{P}$, qui s'écrit dans l'espace de Fourier $\rho_p(k) = -ikP(k)$. Par suite la densité de charge discrète est donnée

par

$$\begin{aligned}\rho(k) &= \sum_p S(k_p)\rho_p(k_p) \\ &= -i\sum_p k_p S(k_p)P(k_p) \\ &= -i\sum_p |S(k_p)|^2 \frac{n_0 q^2}{m} E(k_p) \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \int dv \frac{\partial f_0(v)/\partial v}{\omega - k_p v - q\omega_g} \\ &\quad -i\sum_p k_p |S(k_p)|^2 \frac{n_0 q^2 \Delta t^2}{2m} E(k_p) \sum_{s=0}^{\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta)^s} e^{-\frac{v_t^2}{2}(sk\Delta t)^2} \,. \end{aligned} \tag{A.15}$$

En utilisant des différences finies centrées, la transformée de Fourier discrète de la relation $E = -\partial\phi/\partial x$ s'écrit

$$E(k) = -iK_2(k)\phi(k)\,, \tag{A.16}$$

où

$$K_2(k) = k\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}\,. \tag{A.17}$$

L'équation de Poisson modifiée par la méthode implicite directe devient alors

$$\nabla\cdot(\nabla\phi_{n+1}) = -\frac{\rho_{n+1}}{\epsilon_0} \tag{A.18}$$

Des différences finies centrées suivies par une transformation de Fourier nous donnent

$$K_1^2(k)\phi(k) = \frac{\rho(k)}{\epsilon_0} \tag{A.19}$$

où nous avons défini

$$K_1^2(k) = k^2\left[\frac{\sin\left(k\Delta x/2\right)}{k\Delta x/2}\right]^2 \,. \tag{A.20}$$

En combinant les Eqs. (A.15)-(A.20), nous obtenons la relation de dispersion pour un plasma électrostatique, mono-dimensionnel, et infini tenant compte des discrétisations d'espace et de temps

$$\begin{aligned}\epsilon(\omega,k) = 1 &+ \frac{\omega_p^2}{K_1^2(k)}\sum_p |S(k_p)|^2 K_2(k_p) \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \int dv \frac{\partial f_0(v)/\partial v}{\omega - k_p v - q\omega_g} \\ &+ \frac{\omega_p^2}{K_1^2(k)}\frac{\Delta t^2}{2}\sum_p k_p |S(k_p)|^2 K_2(k_p) \sum_{s=0}^{+\infty} \frac{e^{i\omega s\Delta t}}{(2/\theta)^s} e^{-\frac{1}{2}v_t^2(sk\Delta t)^2} = 0\,, \end{aligned} \tag{A.21}$$

où $k_g = 2\pi/\Delta x$, $\omega_g = 2\pi/\Delta t$, $\omega_q = \omega - q\omega_g$ et $k_p = k - pk_g$.

En exploitant la forme Maxwellienne de f_0, nous obtenons

$$\int dv \frac{\partial f_0/\partial v}{\omega_q - k_p v} = \frac{1}{k_p v_t^2} \left[1 + \xi_q \mathcal{Z}(\xi_q)\right] , \tag{A.22}$$

où $\xi_q = \frac{\omega_q}{\sqrt{2} k_p v_t}$ et $\mathcal{Z}$ désigne la fonction de dispersion du plasma dite de Fried et Conte [48], définie par

$$\mathcal{Z}(\xi) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{e^{-u^2}}{u - \xi} \text{ avec } \Im(\xi) > 0 \, . \tag{A.23}$$

Finalement, en substituant l'Eq. (A.22) dans l'Eq. A.21 nous en déduisons l'Eq. (4.169).

Annexe B

Transformation de Fourier de l'équation d'onde

En supposant le champ électrique périodique suivant y, nous appliquons une transformation de Fourier aux Eqs. (4.138)-(4.140) dans cette direction. Nous introduisons E_k^R et E_k^I les parties réelle et imaginaire associées au mode k de la transformée de Fourier du champ électrique. Pour simplifier les notations nous omettrons l'indice k par la suite. La partie réelle de la transformée de Fourier de Eq. (4.138) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^R\right)_i \left\{\frac{-c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)+\frac{\chi_i^{12,0}}{4}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{32,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_i \left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}-\frac{\chi_i^{12,0}}{4}+\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{32,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_z^R\right)_i \left\{\frac{\chi_i^{13,0}}{2}\right\}+\left(E_z^I\right)_i \left\{\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2} \left\{1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta y^2}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)+\chi_{i+1/2}^{11,0}\right\}+\left(E_x^I\right)_{i+1/2} \left\{\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i+1} \left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)+\frac{\chi_{i+1}^{12,0}}{4}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{32,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_{i+1} \left\{\frac{-c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}-\frac{\chi_{i+1}^{12,0}}{4}+\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{32,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_z^R\right)_{i+1} \left\{\frac{\chi_{i+1}^{13,0}}{2}\right\}+\left(E_z^I\right)_{i+1} \left\{\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}=\left(\widetilde{Q}_x^R\right)_{i+1/2}. \qquad \text{(B.1)}
\end{aligned}
$$

La partie imaginaire de la transformée de Fourier de Eq. (4.138) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^R\right)_i \left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}+\frac{\chi_i^{12,0}}{4}-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{32,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_y^I\right)_i \left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)+\frac{\chi_i^{12,0}}{4}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{32,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_i \left\{-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_z^I\right)_i \left\{\frac{\chi_i^{13,0}}{2}\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2} \left\{-\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_x^I\right)_{i+1/2} \left\{1-\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta y^2}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)+\chi_{i+1/2}^{11,0}\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i+1} \left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}+\frac{\chi_{i+1}^{12,0}}{4}-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{32,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_y^I\right)_{i+1} \left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)+\frac{\chi_{i+1}^{12,0}}{4}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{32,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i+1} \left\{-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_{i+1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i+1} \left\{\frac{\chi_{i+1}^{13,0}}{2}\right\}=\left(\widetilde{Q}_x^I\right)_{i+1/2}. \qquad \text{(B.2)}
\end{aligned}
$$

La partie réelle de la transformée de Fourier de Eq. (4.139) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^R\right)_{i-1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1}^{32,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i-1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{33,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i-1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i-1/2}\left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{31,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}\\
&+\left(E_x^I\right)_{i-1/2}\left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{31,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_y^R\right)_{i}\left\{1+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}+\chi_i^{22,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{23,0}}{2}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{23,0}}{2}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}\\
&+\left(E_x^I\right)_{i+1/2}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\right\}\sin(\tilde{k}\Delta y)\\
&+\left(E_y^R\right)_{i+1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1}^{32,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i+1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{33,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i+1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}=\left(\widetilde{Q}_y^R\right)_i.
\end{aligned}
\tag{B.3}
$$

La partie imaginaire de la transformée de Fourier de Eq. (4.139) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^I\right)_{i-1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1}^{32,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i-1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i-1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{33,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i-1/2}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\sin(\tilde{k}\Delta y)-\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\sin(\tilde{k}\Delta y)+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{31,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^I\right)_{i-1/2}\left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{31,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_{i}\left\{1+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}+\chi_i^{22,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i}\left\{-\frac{\chi_i^{23,0}}{2}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{23,0}}{2}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2}\left\{\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\sin(\tilde{k}\Delta y)-\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\sin(\tilde{k}\Delta y)-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^I\right)_{i+1/2}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x\Delta y}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)+\frac{\chi_i^{21,0}}{4}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{31,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_{i+1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1}^{32,0}\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i+1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{33,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_z^I\right)_{i+1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{33,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}=\left(\widetilde{Q}_y^I\right)_i.
\end{aligned}
\tag{B.4}
$$

La partie réelle de la transformée de Fourier de Eq. (4.140) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^R\right)_{i-1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{22,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}+\left(E_y^I\right)_{i-1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{22,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i-1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1}^{23,0}\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i-1/2}\left\{\frac{\chi_i^{31,0}}{2}+\frac{\Delta t}{\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{21,0}\right\}+\left(E_x^I\right)_{i-1/2}\left\{-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{11,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{32,0}}{2}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)+\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{12,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\right)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_{i}\left\{-\frac{\chi_i^{32,0}}{2}\sin(\tilde{k}\Delta y)-\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{12,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i}\left\{1+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta y^2}\left(1-\cos(\tilde{k}\Delta y)\right)+\chi_i^{33,0}\right\}\\
&+\left(E_z^I\right)_{i}\left\{-\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{13,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2}\left\{\frac{\chi_i^{31,0}}{2}-\frac{\Delta t}{\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{21,0}\right\}+\left(E_x^I\right)_{i+1/2}\left\{-\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{11,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i+1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{22,0}\left(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\right)\right\}+\left(E_y^I\right)_{i+1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{22,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i+1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1}^{23,0}\right\}=\left(\widetilde{Q}_z^R\right)_i. \qquad \text{(B.5)}
\end{aligned}
$$

La partie imaginaire de la transformée de Fourier de Eq. (4.140) s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\left(E_y^R\right)_{i-1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{22,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_y^I\right)_{i-1}\left\{\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i-1}^{22,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_z^I\right)_{i-1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}+\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i-1}^{23,0}\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i-1/2}\left\{\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{11,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_x^I\right)_{i-1/2}\left\{\frac{\chi_i^{31,0}}{2}+\frac{\Delta t}{\Delta x}\zeta_{i-1/2}^{21,0}\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{32,0}}{2}\sin(\tilde{k}\Delta y)+\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{12,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_y^I\right)_{i}\left\{\frac{\chi_i^{32,0}}{2}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)+\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{12,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)-1\Big)\right\}\\
&+\left(E_z^R\right)_{i}\left\{\frac{\Delta t}{\Delta y}\zeta_i^{13,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}\\
&+\left(E_z^I\right)_{i}\left\{1+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta x^2}+\frac{c^2\Delta t^2}{\Delta y^2}\Big(1-\cos(\tilde{k}\Delta y)\Big)+\chi_i^{33,0}\right\}\\
&+\left(E_x^R\right)_{i+1/2}\left\{\frac{\Delta t}{2\Delta y}\zeta_i^{11,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_x^I\right)_{i+1/2}\left\{\frac{\chi_i^{31,0}}{2}-\frac{\Delta t}{\Delta x}\zeta_{i+1/2}^{21,0}\right\}\\
&+\left(E_y^R\right)_{i+1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{22,0}\sin(\tilde{k}\Delta y)\right\}+\left(E_y^I\right)_{i+1}\left\{-\frac{\Delta t}{4\Delta x}\zeta_{i+1}^{22,0}\Big(\cos(\tilde{k}\Delta y)+1\Big)\right\}\\
&+\left(E_z^I\right)_{i+1}\left\{-\frac{c^2\Delta t^2}{2\Delta x^2}-\frac{\Delta t}{2\Delta x}\zeta_{i+1}^{23,0}\right\}=\left(\widetilde{Q}_z^I\right)_i. \qquad \text{(B.6)}
\end{aligned}
$$

En prenant N_x points dans la direction x les Eqs. (B.1)-(B.6) peuvent être formulées comme un système d'équations diagonal par bande, que nous résolvons en utilisant une méthode LU [97] pour chacun des N_y modes de la transformée de Fourier discrète. Enfin nous calculons le champ solution dans l'espace réel par transformation de Fourier inverse.

Annexe C

Trajectoire d'une charge dans une onde plane

C.1 Intégration des équations du mouvement

Le potentiel vecteur est noté $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$, le champ électrique $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ et le champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$ ces grandeurs sont régies par le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathbf{E}(\mathbf{r},t) & = -\partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r},t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{r},t) & = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r},t) \end{array} \right. \tag{C.1}$$

Nous prenons la convention de jauge de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, et nous supposons que les champs ne dépendent que de x et t. Si l'on désigne par // la composante longitudinale et par $\perp$ la composante transverse, le champ électromagnétique se met sous la forme simplifiée :

$$E_{//} = E_x = 0; \quad B_{//} = B_x = 0; \quad \mathbf{E}_\perp = -\partial_t \mathbf{A}_\perp; \quad \mathbf{B}_\perp = \nabla \times \mathbf{A}$$

La dynamique de l'électron est régie par

$$d_t \mathbf{p} = -e\mathbf{E} - \frac{e\mathbf{p}}{m_e \gamma} \times \mathbf{B} \tag{C.2}$$

$$d_t \mathbf{p} = e\partial_t \mathbf{A}_\perp - \frac{e\mathbf{p}}{m_e \gamma} \times \mathbf{B}_\perp \tag{C.3}$$

où $\mathbf{p} = (p_x, p_\perp)$ représente la quantité de mouvement, e la charge élémentaire, m_e la masse électronique, et γ le facteur de Lorentz. Le symbole d_t représente la dérivée totale par rapport au temps.

On en déduit les équations gouvernant les composantes longitudinales et transverses :

$$d_t p_x = -\frac{e}{m_e\gamma}\mathbf{p}_\perp \cdot \partial_x \mathbf{A}_\perp \tag{C.4}$$

$$d_t \mathbf{p}_\perp = e\partial_t \mathbf{A}_\perp + \frac{e}{m_e\gamma} p_x \partial_x \mathbf{A}_\perp = e d_t \mathbf{A}_\perp \tag{C.5}$$

L'équation $(C.5)$ traduit la conservation du moment canonique transverse de l'électron dans l'onde au cours de l'interaction, soit

$$\mathbf{p}_\perp(t) - e\mathbf{A}_\perp(x,t) = \mathbf{p}_\perp(0) - e\mathbf{A}_\perp(x,0) \tag{C.6}$$

Or $\mathbf{A}_\perp(x,t) = \mathrm{A}_\perp(\omega t - kx)$, on pose $\varphi = \omega t - kx$ et $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$ la vitesse de phase de l'onde. Dans ces conditions, on peut écrire

$$\partial_x \mathbf{A}_\perp = d_\varphi \mathbf{A}_\perp \partial_x \varphi = -k d_\varphi \mathbf{A}_\perp$$

et $(C.4)$ peut se mettre sous la forme :

$$d_t p_x = \frac{ke}{m_e\gamma}\mathbf{p}_\perp \cdot d_\varphi \mathbf{A}_\perp \tag{C.7}$$

De même $(C.5)$ sur $\mathbf{p}_\perp$ donne :

$$d_t \mathbf{p}_\perp = e d_\varphi \mathbf{A}_\perp \left(\omega - \frac{k p_x}{m_e\gamma}\right) \tag{C.8}$$

et en injectant l'expression de $d_\varphi \mathbf{A}_\perp$ dans $(C.7)$, on obtient :

$$d_t p_x = \frac{k}{m_e\gamma}\frac{\mathbf{p}_\perp \cdot d_t \mathbf{p}_\perp}{\omega - \frac{k p_x}{m_e\gamma}} \tag{C.9}$$

soit encore,

$$d_t p_x = \frac{d_t(\mathbf{p}_\perp^2)}{2(m_e\gamma v_\varphi - p_x)} \tag{C.10}$$

L'équation de la dynamique reliant $\mathbf{p}_\perp$ et p_x donne pour une onde se propageant avec une vitesse v_φ :

$$2(m_e\gamma v_\varphi - p_x) d_t p_x = d_t \mathbf{p}_\perp^2 \tag{C.11}$$

$$2 m_e\gamma v_\varphi d_t p_x = d_t(\gamma^2 - 1) m_e^2 c^2 \tag{C.12}$$

$$\frac{v_\varphi}{m_e c^2} d_t p_x = d_t \gamma \tag{C.13}$$

$$d_t\left(\frac{v_\varphi p_x}{m_e c^2} - \gamma\right) = 0 \tag{C.14}$$

Une intégration aboutit à :

$$\frac{v_\varphi}{m_e c^2} p_x - \gamma = \frac{v_\varphi}{m_e c^2} p_x(0) - \gamma(0) \tag{C.15}$$

Et en élevant γ au carré on obtient :

$$1 + \frac{p_x^2}{m_e^2 c^2}\left(1 - \frac{v_\varphi^2}{c^2}\right) + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{m_e^2 c^2} = 2\frac{v_\varphi}{m_e c^2} p_x \left[\gamma(0) - \frac{v_\varphi p_x(0)}{m_e c^2}\right] + \left[\gamma(0) - \frac{v_\varphi p_x(0)}{m_e c^2}\right]^2 \tag{C.16}$$

On peut dégager trois types de solution en p_x suivant la valeur du rapport v_φ/c, mais on ne développe ici que le cas où l'onde se propage dans le vide *i.e* $v_\varphi/c = 1$ et l'expression de φ devient $\varphi = \omega_0\left(t - \frac{x}{c}\right)$. L'équation $(C.16)$ est dans ce cas un monôme en p_x, et on déduit γ via l'équation $(C.15)$:

$$\frac{p_x}{m_e c} = \frac{1 + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{m_e^2 c^2} - \left[\gamma(0) - \frac{p_x(0)}{m_e c}\right]^2}{2\left[\gamma(0) - \frac{p_x(0)}{m_e c}\right]} \tag{C.17}$$

$$\gamma = \frac{1 + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{m_e^2 c^2} + \left[\gamma(0) - \frac{p_x(0)}{m_e c}\right]^2}{2\left[\gamma(0) - \frac{p_x(0)}{m_e c}\right]} \tag{C.18}$$

Si l'électron est initialement au repos *i.e* $p_x(0) = 0$ et $\gamma(0) = 1$ ces équations deviennent :

$$\frac{p_x}{m_e c} = \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e^2 c^2} \tag{C.19}$$

$$\gamma = 1 + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e^2 c^2} \tag{C.20}$$

Par ailleurs, l'impulsion de la particule fait un angle θ avec la direction de propagation de l'onde tel que :

$$\theta = \arctan\left(\frac{p_\perp}{p_x}\right) = \arctan\left(\frac{2m_e c}{p_\perp}\right) = \arctan\left(\sqrt{\frac{2}{\gamma - 1}}\right) \tag{C.21}$$

Afin d'expliciter complètement $(p_x, p_\perp)$ on introduit un potentiel vecteur de la forme :

$$\mathbf{A}_\perp = \frac{a_0 m_e c}{e} f(\varphi) \begin{pmatrix} 0 \\ u\sin(\varphi) \\ \bar{u}\cos(\varphi) \end{pmatrix} \text{ avec } \bar{u} = (1 - u^2)^{1/2} \tag{C.22}$$

où a_0 désigne l'amplitude du champ laser, f représente l'enveloppe lentement variable de l'onde et u détermine la polarisation de l'onde. Etant donné les conditions initiales, la conservation du moment canonique transverse ($C.6$) s'écrit $\mathbf{p}_\perp = e\mathbf{A}_\perp$ ainsi nous pouvons déterminer complètement le quadri-vecteur impulsion-énergie défini par $(cp_x, cp_y, cp_z, m\gamma c^2)$. La conservation du moment canonique transverse et le système ($C.17$,$C.18$) donnent dans le référentiel du laboratoire :

$$\begin{pmatrix} cp_x \\ cp_y \\ cp_z \\ m_e\gamma c^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} \\ a_0 m_e c^2 f(\varphi) u \sin(\varphi) \\ a_0 m_e c^2 f(\varphi) \bar{u} \cos(\varphi) \\ m_e c^2 + \frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} \end{pmatrix} \tag{C.23}$$

avec

$$\frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2m_e} = \frac{m_e c^2 a_0^2}{4} f^2(\varphi)[1 + (1 - 2u^2)\cos(2\varphi)].$$

Exprimons maintenant le quadri-vecteur $(c\mathbf{p}, E)$ dans un référentiel d'inertie se déplaçant à $V = \beta c$ suivant l'axe des x. Posons $\Gamma = \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}}$, la transformation de Lorentz sous forme matricielle s'écrit

$$\begin{pmatrix} cp'_x \\ cp'_y \\ cp'_z \\ m_e\gamma' c^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma & 0 & 0 & -\Gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\Gamma\beta & 0 & 0 & \Gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} cp_x \\ cp_y \\ cp_z \\ m_e\gamma c^2 \end{pmatrix} \tag{C.24}$$

On en déduit après quelques manipulations algébriques :

$$\begin{cases} cp'_x & = \Gamma\left\{(1-\beta)\frac{m_e c^2 a_0^2}{4} f^2(\varphi)\,[1 + (1-2u^2)\cos(2\varphi)] - m_e\beta c^2\right\} \\ cp'_y & = cp_y \\ cp'_z & = cp_z \\ m_e\gamma' c^2 & = \Gamma\left\{m_e c^2 + (1-\beta)\frac{m_e c^2 a_0^2}{4} f^2(\varphi)\,[1 + (1-2u^2)\cos(2\varphi)]\right\} \end{cases} \tag{C.25}$$

Il est possible de choisir le paramètre β de telle sorte que les moyennes temporelles des quantités de mouvement dans le référentiel de dérive soient nulles, comme $< p'_y >_t = < p'_z >_t = 0$ on détermine β tel que $< p'_x >_t = 0$, il vient :

$$\beta = \frac{1}{1 + \frac{4}{a_0^2}} \tag{C.26}$$

Soit τ le temps propre entre deux événements dans le référentiel de dérive, la géodésique d'espace-temps donne la relation :

$$d\tau^2 = dt^2\left(1 - \frac{dx^2}{c^2 dt^2}\right)$$

soit finalement

$$\frac{dt}{d\tau} = \gamma \tag{C.27}$$

La vitesse longitudinale de l'électron s'écrit :

$$v_x = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{\gamma d\tau}$$

on en déduit

$$\frac{dx}{d\tau} = \gamma v_x = \frac{p_x}{m_e} \tag{C.28}$$

On montre ainsi que la phase de l'onde est un invariant relativiste :

$$\frac{d\varphi}{\omega d\tau} = \gamma - \frac{p_x}{m_e c} = \gamma_0 = 1 \tag{C.29}$$

En tenant compte de $(C.28)$ le quadri-vecteur impulsion-énergie peut se mettre sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{ll} cp_x & = m_e c \frac{dx}{d\tau} \\ cp_y & = m_e c \frac{dy}{d\tau} \\ cp_z & = m_e c \frac{dz}{d\tau} \\ m_e \gamma c^2 & = m_e c^2 \frac{dt}{d\tau} \end{array} \right. \tag{C.30}$$

On en déduit les coordonnées $(x(\tau), y(\tau), z(\tau), t(\tau))$ de l'électron dans le référentiel du laboratoire après une durée τ, et en négligeant l'influence de la fonction d'enveloppe $(i.e f(\omega_0 \tau) = 1)$:

$$\left\{ \begin{array}{lll} x(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p_x}{m_e} dt & = \frac{c a_0^2}{4} \left[\tau + \frac{(1-2u^2)}{2\omega_0} sin(2\omega_0 \tau) \right] \\ y(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p_y}{m_e} dt & = \frac{a_0 c}{\omega_0} u \left[1 - \cos(\omega_0 \tau) \right] \\ z(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p_z}{m_e} dt & = \frac{a_0 c}{\omega_0} \bar{u} \sin(\omega_0 \tau) \\ t(\tau) & = \int_0^\tau \gamma dt & = \tau + \frac{a_0^2}{4} \left[\tau + \frac{(1-2u^2)}{2\omega_0} \sin(2\omega_0 \tau) \right] \end{array} \right. \tag{C.31}$$

Les coordonnées de l'électron dans le référentiel mobile $(x'(\tau), y'(\tau), z'(\tau), t'(\tau))$ peuvent être calculées sachant $\frac{dt'}{d\tau} = \gamma$, $\frac{dx'}{d\tau} = \frac{p'_x}{m_e}$, on obtient aisément :

$$\left\{ \begin{array}{lll} x'(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p'_x}{m_e} dt & = \frac{\Gamma c}{\omega_0} (1-\beta)(a_0^2/8)(1-2u^2) \sin(2\omega_0 \tau) + \Gamma c \tau \left[\frac{a_0^2}{4} - \beta \left(1 + \frac{a_0^2}{4} \right) \right] \\ y'(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p'_y}{m_e} dt & = y(\tau) \\ z'(\tau) & = \int_0^\tau \frac{p'_z}{m_e} dt & = z(\tau) \\ t'(\tau) & = \int_0^\tau \gamma' dt & = \Gamma \tau \left[1 + (1-\beta) \frac{a_0^2}{4} \right] + \frac{\Gamma(1-\beta)}{\omega_0} (a_0^2/8)(1-2u^2) \sin(2\omega_0 \tau) \end{array} \right. \tag{C.32}$$

Il est possible d'exprimer cette trajectoire en fonction du temps dans le repère mobile, la phase de l'onde étant un invariant relativiste $\omega_0 \tau = \varphi = \varphi'$ $i.e$ $\omega_0 \tau = \omega_0 \left(t - \frac{x}{c} \right) = \omega'_0 \left(t' - \frac{x'}{c} \right)$. On en déduit $\omega'_0 = \frac{\omega_0}{\Gamma(1+\beta)} = \frac{\omega_0}{\left[1 + \frac{a_0^2}{2} \right]^{1/2}}$.

Soit finalement en remplaçant ω_0 par ω_0' et en tenant compte de la valeur de β donnée par $(C.26)$ on obtient :

$$\left\{\begin{array}{lll} x' & = & \frac{c(1-2u^2)}{\omega_0'}\frac{a_0^2/8}{1+\frac{a_0^2}{2}}\sin(2\varphi') \\ y' & = & \frac{ca_0u}{\omega_0'}\frac{1}{\left(1+\frac{a_0^2}{2}\right)^{1/2}}\left[1-\cos(\varphi')\right] \\ z' & = & \frac{ca_0\bar{u}}{\omega_0'}\frac{1}{\left(1+\frac{a_0^2}{2}\right)^{1/2}}\sin(\varphi') \\ t' & = & \left(\frac{\varphi'}{\omega_0}\right)\left(1+\frac{a_0^2}{4}\right)+\frac{a_0^2}{4}\frac{(1-2u^2)}{2\omega_0'} * \frac{1}{\left(1+\frac{a_0^2}{2}\right)^{1/2}}\sin(2\varphi') \end{array}\right. \tag{C.33}$$

C.2 Influence d'une équation d'enveloppe

Il est apparu au cour des expériences numériques que la fonction d'enveloppe de l'onde et les conditions initiales conditionnent de façon déterminante la dynamique de la particule. Les calculs qui suivent visent à mettre en évidence quelques aspects de ce problème. Nous rappelons ici la forme du quadri-vecteur impulsion-énergie :

$$\left(\begin{array}{c} cp_x \\ cp_y \\ cp_z \\ m_e\gamma c^2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \frac{p_\perp^2}{2m_e} \\ ceA_y \\ ceA_z \\ m_ec^2+\frac{p_\perp^2}{2m_e} \end{array}\right) \tag{C.34}$$

Considérons une enveloppe trapézoïdale fonction de la phase de l'onde, on suppose ici que le champ électrique adimensionné $\tilde{E}_y$ est de la forme :

$$\tilde{E}_y = \frac{a_0}{\varphi_{max}}\varphi\sin(\varphi)\,\xi_{[0,\varphi_{max}]} + a_0\sin(\varphi)\,\xi_{[\varphi_{max},\varphi_1]} + \frac{a_0}{\varphi_{max}}\left[\varphi-\varphi_1\right]\sin(\varphi)\,\xi_{[\varphi_1,\varphi_2]} \tag{C.35}$$

où on a posé $\varphi = \omega_0\left(t-x/c\right)$ et on définit $\xi_{[a,b]}(u) = \left\{\begin{array}{l} 1 \text{ si } a<u<b \\ 0 \text{ sinon} \end{array}\right.$.

Nous obtenons le potentiel vecteur par intégration pour $\varphi \in [\varphi_0, \varphi_{max}]$ nous avons :

$$\widetilde{A}_y(\varphi) = -\frac{a_0}{\varphi_{max}}\int_{\varphi_0}^{\varphi} u\sin(u)du, \tag{C.36}$$

et pour $\varphi \in [\varphi_{max}, \varphi_1]$

$$\widetilde{A}_y(\varphi) = -\frac{a_0}{\varphi_{max}}\int_{\varphi_0}^{\varphi} u\sin(u)du. \tag{C.37}$$

On obtient finalement l'expression de $\widetilde{A}_y(\varphi)$ suivante

$$\widetilde{A}_y(\varphi) = \begin{cases} \frac{a_0}{\varphi_{max}} \left[\varphi \cos(\varphi) - \varphi_0 \cos(\varphi_0)\right] - \frac{a_0}{\varphi_{max}} \left[\sin(\varphi) - \sin(\varphi_0)\right] & \text{si } \varphi \in [\varphi_0, \varphi_{max}] \\ \frac{a_0}{\varphi_{max}} \left[\sin(\varphi_0) - \varphi_0 \cos(\varphi_0) - \sin(\varphi_{max})\right] + a_0 \cos(\varphi) & \text{si } \varphi \in [\varphi_{max}, \varphi_1] \end{cases} \tag{C.38}$$

Notons que $\widetilde{A}_y(\varphi_0) = 0$. Où la phase initiale φ_0 est définie par $\varphi_0 = \omega_0 \left(t_0 - x(t_0)/c\right)$, et nous posons $K = -\sin(\varphi_{max})/\varphi_{max}$. Ainsi pour $\varphi \in [\varphi_{max}, \varphi_1]$ nous avons

$$\widetilde{A}_y(\varphi) = \frac{a_0}{\varphi_{max}} \left[\sin(\varphi_0) - \varphi_0 \cos(\varphi_0)\right] + a_0 \left(\cos(\varphi) + K\right). \tag{C.39}$$

Pour la suite nous faisons l'approximation $\varphi_0 << 1$, on en déduit

$$\widetilde{A}_y(\varphi) = a_0 \left(\cos(\varphi) + K\right) + O(\varphi_0^3) \tag{C.40}$$

La quantité de mouvement p_y est reliée au potentiel vecteur grâce à la conservation du moment canonique transverse, on a pour un électron initialement au repos

$$\frac{p_y(\varphi)}{m_e} = c\widetilde{A}_y(\varphi). \tag{C.41}$$

Déterminons la trajectoire de l'électron $(x(\varphi), y(\varphi))$ dans le repère du laboratoire. Nous avons pour $y(\varphi)$:

$$y(\varphi) = \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{p_y(u)}{m_e} \frac{du}{\omega_0} = \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{c}{\omega_0} \widetilde{A}_y(u) du, \tag{C.42}$$

on obtient

$$y(\varphi) = \frac{ca_0}{\omega_0} \left[\left(\sin(\varphi) - \sin(\varphi_0)\right) + K\left(\varphi - \varphi_0\right)\right]. \tag{C.43}$$

Et nous avons pour $x(\varphi)$:

$$x(\varphi) = \int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{p_x(u)}{m_e} \frac{du}{\omega_0} = \frac{c}{2\omega_0} \int_{\varphi_0}^{\varphi} \widetilde{A}_y^2(u) du, \tag{C.44}$$

soit

$$\begin{aligned} x(\varphi) = {} & \frac{ca_0^2}{4\omega_0} \left\{\left[\sin(2\varphi) - \sin(2\varphi_0)\right]/2 + (\varphi - \varphi_0)\right\} \\ & + \frac{ca_0^2 K}{\omega_0} \left\{\left[\sin(\varphi) - \sin(\varphi_0)\right] + K(\varphi - \varphi_0)/2\right\}. \end{aligned} \tag{C.45}$$

Afin d'annuler la dérive de y on choisit $\varphi_{max} = 2n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$, d'où $K = 0$. Finalement les expressions de Eqs. (C.45) et (C.43) deviennent

$$x(\varphi) = \frac{ca_0^2}{4\omega_0} \left\{\left[\sin(2\varphi) - \sin(2\varphi_0)\right]/2 + \varphi - \varphi_0\right\} \tag{C.46}$$

$$y(\varphi) = \frac{ca_0}{\omega_0} \left[\sin(\varphi) - \sin(\varphi_0)\right] \tag{C.47}$$

Annexe D

Détermination du bilan d'énergie dans les simulations laser-plasma

Pour mesurer l'écart à la conservation de l'énergie dans la boîte de simulation nous comparons bilan des énergies cinétiques et bilan des énergies électromagnétiques, respectivement notés $\mathcal{A}_K(t)$ et $\mathcal{A}_P(t)$.

Le bilan d'énergie cinétique $\mathcal{A}_K(t)$ est défini par :

$$\mathcal{A}_K(t) = \left(\varepsilon_{Kp}(t) + \varepsilon_K(t) - \varepsilon_K(0)\right)/\varepsilon_S(t), \tag{D.1}$$

où ε_K est l'énergie cinétique totale, ε_{Kp} désigne l'énergie cinétique perdue par les particules lorsque celles-ci sont absorbées ou ré-injectées thermiquement aux limites, et ε_S désigne le flux de Poynting source (du laser) intégré en temps dans la direction de l'onde incidente. Pour une onde se propageant en $2D$ spatial nous avons :

$$\frac{\varepsilon_S(t)}{\lambda_0} = \int_0^t \left[\int_{y_1}^{y_2} \left(\widetilde{E}_S \times \widetilde{B}_S\right)_{x_{min}} \cdot \mathbf{e}_x d\widetilde{y}\right] d\widetilde{t} \tag{D.2}$$

où $\widetilde{E}_S$, $\widetilde{B}_S$ désignent respectivement les champs électrique et magnétique normalisés selon $\widetilde{E} = eE/mc\omega_0$ et $\widetilde{B} = eB/m\omega_0$ (où ω_0 est la pulsation de l'onde laser incidente). Le bilan d'énergie électromagnétique $\mathcal{A}_p(t)$ est défini par :

$$\mathcal{A}_P(t) = \left(\varepsilon_p(t) + \varepsilon_{em}(0) - \varepsilon_{em}(t)\right)/\varepsilon_S(t), \tag{D.3}$$

où ε_p désigne le bilan intégré en temps des flux de Poynting entrant et sortant suivant chaque direction de la boîte de simulation, et ε_{em} désigne l'énergie électromagnétique totale. L'énergie totale est conservée si ces deux mesures se compensent, soit : $\mathcal{A}_K(t) - \mathcal{A}_P(t) = 0$.

Le bilan d'énergie cinétique, peut être développé plus en détail, il prend alors la forme :

$$\mathcal{A}_K(t) = \frac{\sum_s \sum_{i=1}^{N_s} \widetilde{m}_s \left(\gamma_{i,s}(t) + \delta\gamma_{i,s} - 1\right) - \sum_s \sum_{i=1}^{N_s} \widetilde{m}_s \left(\gamma_{i,s}(0) - 1\right)}{\lambda_0 \int_0^t \int_{y_1}^{y_2} \left(\widetilde{E}_S \times \widetilde{B}_S\right)_{x_{min}} \cdot \mathbf{e}_x d\widetilde{y} d\widetilde{t}} \tag{D.4}$$

avec $\widetilde{m}_s = \frac{m_s}{m_e}$ la masse normalisée de l'espèce s, et $\gamma_{i,s}$ le facteur de Lorentz de la particule i. Ainsi $(\gamma_{i,s} - 1)$ représente l'énergie cinétique normalisée et $\delta\gamma_{i,s}$ rend compte des variations éventuelles de l'énergie cinétique associées à des conditions aux limites inélastiques. Quant au bilan d'énergie électromagnétique, il peut s'écrire sous la forme détaillée suivante :

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_P(t) =& \frac{1}{2\varepsilon_S(t)} \int\int \left(\widetilde{E}_0^2 + \widetilde{B}_0^2\right) - \left(\widetilde{E}^2(\widetilde{x},\widetilde{y}) + \widetilde{B}^2(\widetilde{x},\widetilde{y})\right) d\widetilde{x}d\widetilde{y} \\ &+ \frac{\lambda_0}{\varepsilon_S(t)} \Bigg[\int_0^t \int_{y_1}^{y_2} \left(\widetilde{E} \times \widetilde{B}\right)_{x_{min}} \cdot \mathbf{e}_x d\widetilde{y}d\widetilde{t} - \int_0^t \int_{y_1}^{y_2} \left(\widetilde{E} \times \widetilde{B}\right)_{x_{max}} \cdot \mathbf{e}_x d\widetilde{y}d\widetilde{t} \\ &+ \int_0^t \int_{x_1}^{x_2} \left(\widetilde{E} \times \widetilde{B}\right)_{y_{min}} \cdot \mathbf{e}_y d\widetilde{x}d\widetilde{t} - \int_0^t \int_{x_1}^{x_2} \left(\widetilde{E} \times \widetilde{B}\right)_{y_{max}} \cdot \mathbf{e}_y d\widetilde{x}d\widetilde{t} \Bigg]. \quad \text{(D.5)}\end{aligned}$$

Bibliographie

[1] D. Strickland, G. Mourou, Compression of amplified chirped optical pulses, optics communications 56 (1985) 219–221.

[2] K. L. Lancaster, J. S. Green, D. S. Hey, K. U. Akli, J. R. Davies, R. J. Clarke, R. R. Freeman, H. Habara, M. H. Key, R. Kodama, K. Krushelnick, C. D. Murphy, M. Nakatsutsumi, P. Simpson, R. Stephens, C. Stoeckl, T. Yabuuchi, M. Zepf, P. A. Norreys, Measurements of energy transport patterns in solid density laser plasma interactions at intensities of $5 \times 10^{20}\mathrm{Wcm}^{-2}$, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 125002.

[3] F. electron generation in cones with ultraintense laser pulses, L. van woerkom and k. u. akli and t. bartal and f. n. beg and s. chawla and c. d. chen and e. chowdhury and r. r. freeman and d. hey and m. h. key and j. a. king and a. link and t. ma and a. j. mackinnon and a. g. macphee and d. offermann and v. ovchinnikov and p. k. patel and d. w. schumacher and r. b. stephens and y. y. tsui, Phys. Plasmas 15 (2008) 056304.

[4] A. Pukhov, J. Meyer-Ter-Vehn, Laser wake field acceleration : the highly non-linear broken-wave regime, Appl. Phys. B 74 (355-361).

[5] X. Davoine, E. Lefebvre, C. Rechatin, J. Faure, V. Malka, Cold optical injection producing monoenergetic, multi-gev electron bunches, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 065001.

[6] K. T. Phuoc, A. Rousse, M. Pittman, J. P. Rousseau, V. Malka, S. Fritzler, D. Umstadter, D. Hulin, X-ray radiation from nonlinear thomson scattering of an intense femtosecond laser on relativistic electrons in a helium plasma, Phys. Rev. Lett. 91 (19) (2003) 195001.

[7] A. Rousse, K. T. Phuoc, R. Shah, A. Pukhov, E. Lefebvre, V. Malka, S. Kiselev, F. Burgy, J.-P. Rousseau, D. Umstadter, D. Hulin, Production of a kev x-ray beam from synchrotron radiation in relativistic laser-plasma interaction, Phys. Rev. Lett. 93 (13) (2004) 135005.

[8] S. Kneip, S. R. Nagel, C. Bellei, N. Bourgeois, A. E. Dangor, A. Gopal, R. Heathcote, S. P. D. Mangles, J. R. Marquès, A. Maksimchuk, P. M. Nilson, K. T. Phuoc, S. Reed, M. Tzoufras, F. S. Tsung, L. Willingale, W. B. Mori, A. Rousse, K. Krushelnick, Z. Najmudin, Observation of synchrotron

radiation from electrons accelerated in a petawatt-laser-generated plasma cavity, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 105006.

[9] Y. Glinec, J. Faure, L. L. Dain, S. Darbon, T. Hosokai, J. J. Santos, E. Lefebvre, J. P. Rousseau, F. Burgy, B. Mercier, V. Malka, High-resolution γ-ray radiography produced by a laser-plasma driven electron source, Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 025003.

[10] P. M. Nilson, W. Theobald, J. F. Myatt, C. Stoeckl, M. Storm, J. D. Zuegel, R. Betti, D. D. Meyerhofer, T. C. Sangster, Bulk heating of solid-density plasmas during high-intensity-laser plasma interactions, Phys. Rev. E 79 (2009) 016406.

[11] S. D. Baton, M. Koenig, P. Guillou, B. Loupias, A. Benuzzi-Mounaix, J. Fuchs, C. Rousseaux, L. Gremillet, D. Batani, A. Morace, M. Nakatsutsumi, R. Kodama, Y. Aglitskiy, Relativistic electron transport and confinment within charge-insulated, mass-limited targets, High Energy Density Physics 3 (2007) 358–364.

[12] M. Borghesi, D. H. Campbell, A. Schiavi, M. G. Haines, O. Willi, A. J. MacKinnon, P. Patel, L. A. Gizzi, M. Galimberti, R. J. Clarke, *et al.*, Electric field detection in laser-plasma interaction experiments via the proton imaging technique, Phys. Plasmas 9 (2002) 2214.

[13] P. K. Patel, A. J. MacKinnon, M. H. Key, T. E. Cowan, M. E. Foord, M. Allen, D. F. Price, H. Ruhl, P. T. Springer, R. E. Stephens, Isochoric heating of solid-density matter with an ultrafast proton beam, Phys. Rev. Lett. 91 (2003) 125004.

[14] S. V. Bulanov, V. S. Khoroshkov, Feasibility of using laser ion accelerators in proton therapy, Plasma Phys. Rep. 28 (5) (2002) 453.

[15] M. Tabak, J. Hammer, M. E. Glinsky, W. L. Kruer, S. C. Wilks, J. Woodworth, E. M. Campbell, M. D. Perry, R. J. Mason, Ignition and high gain with ultrapowerful lasers, Phys. Plasmas 1 (5) (1994) 1626–1634.

[16] S. Atzeni, A. Schiavi, J. J. Honrubia, X. Ribeyre, G. Schurtz, P. Nicolaï, M. Olazabal-Loumé, C. Bellei, R. G. Evans, J. R. Davies, Fast ignitor target studies for the HiPER project, Phys. Plasmas 15 (5) (2008) 056311.

[17] C. Cavailler, Inertial fusion with the lmj, Plasma Phys. Controlled Fusion 47 (12B) (2005) B389.

[18] J. D. Lindl, Inertial Confinement Fusion : The Quest for Ignition and Energy Gain Using Indirect Drive, Springer-Verlag, New York, 1998.

[19] J. J. Honrubia, J. Meyer-ter-Vehn, Three-dimensional fast electron transport for ignition-scale inertial fusion capsules, Nucl. Fus. 46 (2006) 25–28.

[20] S. Atzeni, C. Bellei, J. R. Davies, R. G. Evans, J. J. Honrubia, P. Nicolaï, X. Ribeyre, G. Schurtz, A. Schiavi, J. Badziak, J. M. ter Vehn, M. Olazabal,

L. Silva, G. Sorasio, Fast ignitor target studies for hiper, J. Phys. : Conf. Ser. 112 (2008) 022062.

[21] C. K. Birdsall, A. B. Langdon, Plasma physics via computer simulation, McGraw-Hill, New York, 1985.

[22] C. Ren, M. Tzoufras, J. Tongue, W. B. Mori, F. S. Tsung, M. Fiore, R. A. Fonseca, L. O. Silva, J.-C. Adam, A. Heron, A global simulation for laser-driven mev electrons in 50-μm-diameter fast ignition targets, Phys. Plasmas 13 (2006) 056308.

[23] J. R. Davies, A. R. Bell, M. G. Haines, Short-pulse high-intensity laser-generated fast electron transport into thick solid targets, Phys. Rev. E 56 (1997) 7193–7203.

[24] A. S. Lipatov, The Hybrid Multiscale Simulation Technology. An Introduction with Application to Astrophysical and Laboratory Plasmas, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002.

[25] L. Gremillet, G. Bonnaud, F. Amiranoff, Filamented transport of laser-generated relativistic electrons penetrating a solid target, Phys. Plasmas 9 (3) (2002) 941–948.

[26] R. G. Evans, Modelling short pulse, high intensity laser plasma interactions, High Energy Density Phys. 2 (2006) 35–47.

[27] J. Liljo, A. Karmakar, A. Pukhov, M. Hochbruck, One-dimensional electromagnetic relativistic PIC-hydrodynamic hybrid simulation code H-VLPL (hybrid virtual laser plasma lab), Comp. Phys. Comm. 179 (2008) 371–379.

[28] A. A. Solodov, K. S. Anderson, R. Betti, V. Gotcheva, J. Myatt, J. A. Delettrez, Simulations of electrons transport and ignition for direct-drive fast-ignition targets, Phys. Plasmas 15 (2008) 112702.

[29] M. Sherlock, A. R. Bell, R. J. Kingham, A. P. L. Robinson, R. Bingham, Non-spitzer return currents in intense laser-plasma interactions, Phys. Plasmas 14 (2007) 102708.

[30] S. M. Weng, Z. M. Sheng, M. Q. He, J. Zhang, P. A. Norreys, M. Sherlock, A. P. L. Robinson, Plasma currents and electron distribution functions under a dc electric field of arbitrary strength, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 185001.

[31] Y. Sentoku, A. J. Kemp, Numerical methods for particle simulations at extreme densities and temperatures : Weighted particles, relativistic collisions and reduced currents, J. Comput. Phys. 227 (2008) 6846–6861.

[32] D. R. Welch, D. V. Rose, B. V. Oliver, R. E. Clark, Implementation of a non-iterative implicit electromagnetic field solver for dense plasma simulation, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A 464 (2001) 134–139.

[33] D. R. Welch, D. V. Rose, R. E. Clark, T. C. Genoni, T. P. Hughes, Implementation of a non-iterative implicit electromagnetic field solver for dense plasma simulation, Comp. Phys. Comm. 164 (2004) 183–188.

[34] D. R. Welch, D. V. Rose, M. E. Cuneo, R. B. Campbell, T. A. Mehlhorn, Integrated simulation of the generation and transport of proton beams from laser-target interaction, Phys. Plasmas 13 (2006) 063105.

[35] A. Friedman, A. B. Langdon, B. I. Cohen, A direct method for implicit particle-in-cell simulation, Comments Plasma Phys. Controlled Fusion 6 (1981) 225–236.

[36] B. I. Cohen, A. B. Langdon, A. Friedman, Implicit time integration for plasma simulation, J. Comput. Phys. 46 (1982) 15–38.

[37] A. B. Langdon, B. I. Cohen, A. Friedman, Direct implicit large time-step particle simulation of plasmas, J. Comput. Phys. 51 (1983) 107–138.

[38] D. W. Hewett, A. B. Langdon, Electromagnetic direct implicit plasma simulation, J. Comput. Phys. 72 (1987) 121–155.

[39] A. B. Langdon, D. W. Hewett, Relativistic extension of the electromagnetic direct implicit PIC algorithm, in : 12th Plasmas Num. Sim. Conf., 1987.

[40] A. J. Kemp, Y. Sentoku, V. Sotnikov, S. C. Wilks, Collisional relaxation of superthermal electrons generated in relativistic laser pulses in dense plasmas, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 235001.

[41] A. Friedman, A second-order implicit particle mover with adjustable damping, J. Comput. Phys. 90 (1990) 292–312.

[42] K. Noguchi, C. Tronci, G. Zuccaro, G. Lapenta, Formulation of the relativistic moment implicit particle-in-cell method, Phys. Plasmas 14 (2007) 042308.

[43] R. W. Hockney, J. W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles, McGraw-Hill, New York, 1981.

[44] R. Barthelmé, Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de vlasov et de maxwell, Ph.D. thesis, Université Louis Pasteur (Strasbourg I) (2005).

[45] J. P. Boris, Relativistic plasma simulations - Optimization of a hybrid code, Proc. 4th Conf. Num. Sim. of Plasmas (1970) 3–67.

[46] J. Villasenor, O. Buneman, Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers, Comp. Phys. Comm. 69 (1992) 306–316.

[47] T. Z. Esirkepov, Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor, Comp. Phys. Comm. 135 (2001) 144–153.

[48] B. D. Fried, S. D. Conte, The Plasma Dispersion Function, Academic Press Inc., New York, 1961.

[49] J. D. Huba, Nrl plasma formulary.

[50] S. Bellavia, M. Macconi, B. Morini, STRSCNE : A scaled trust-region solver for constrained nonlinear equations, Comput. Optim. Appl. 28 (1) (2004) 31–50.

[51] A. Weideman, Computation of the complex error function, SIAM J. Numer. Anal. 31 (1994) 1497–1518.

[52] H. Okuda, A. T. Lin, C. C. Lin, J. M. Dawson, Splines and high order interpolations in plasma simulations, Comp. Phys. Comm. 17 (1979) 227–231.

[53] H. Abe, N. Sakairi, R. Itatani, High-Order Spline Interpolations in the Particle Simulation, J. Comput. Phys. 63 (1986) 247–267.

[54] R. W. Hockney, Measurements of collision and heating times in a two-dimensional thermal computer plasma, J. Comput. Phys. 8 (1971) 19–44.

[55] H. Ueda, Y. Omura, H. Mastumoto, T. Okuzawa, A study of the numerical heating in electrostatic particle simulations, Comp. Phys. Comm. 79 (1994) 249–259.

[56] A. B. Langdon, Kinetic theory for fluctuations and noise in computer simulation of plasma, Phys. Fluids 22 (1979) 163–171.

[57] K. Nanbu, Theory of cumulative small-angle collisions in plasmas, Phys. Rev. E 55 (4) (1997) 4642.

[58] K. Nanbu, S. Yonemura, Weighted particles in coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle, J. Comput. Phys. 145 (1998) 639–654.

[59] T. Takizuka, H. Abé, A binary collision model for plasma simulation with a particle code, J. Comput. Phys. 25 (1977) 205.

[60] N. E. Frankel, K. C. Hines, R. L. Dewar, Energy loss due to binary collisions in a relativstic plasma, Phys. Rev. A 20 (5) (1979) 2120–2129.

[61] F. Perez, Thèse de doctorat, luli, ecole polytechnique (2010).

[62] A. Decoster, P. A. Markowich, B. Perthame, P. A. Raviart, Modelling of collisions, Elsevier-Gauthier-Villars, Paris, 1998.

[63] A. Pukhov, Three-dimensional simulations of ion acceleration from a foil irradiated by a short-pulse laser, Phys. Rev. Lett. 86 (16) (2001) 3562.

[64] S. Atzeni, A. Schiavi, F. Califano, F. Cattani, F. Cornolti, D. D. Sarto, T. Liseykin, A. Macchi, F. Pegoraro, Fluid and kinetic simulation of inertial confinement fusion plasma, Comp. Phys. Comm. 169 (2005) 153.

[65] S. D. Baton, M. Koenig, J. Fuchs, A. Benuzzi-Mounaix, P. Guillou, B. Loupias, T. Vinci, L. Gremillet, C. Rousseaux, M. Drouin, E. Lefebvre, F. Dorchies, C. Fourment, J. Santos, D. Batani, A. Morace, R. Redaelli, M. Nakatsutsumi, R. Kodama, A. Nishida, N. Ozaki, T. Norimatsu, Y. Aglitskiy, S. Atzeni, A. Schiavi, Inhibition of fast electron energy deposition due to preplasma filling of cone-attached targets, Phys. Plasmas 15 (2008) 042706.

[66] H. Popescu, S. D. Baton, F. Amiranoff, C. Rousseaux, M. R. L. Gloahec, J. J. Santos, L. Gremillet, M. Koenig, E. Martinolli, T. Hall, J. C. Adam,

A. Héron, D. Batani, Subfemtosecond, coherent, relativistic, and ballistic electron bunches generated at ω_0 and $2\omega_0$ in high intensity laser-matter interaction, Phys. Plasmas 12 (1) (2005) 063106.

[67] J. C. Adam, A. Héron, G. Laval, Dispersion and transport of energetic particles created during the interaction of intense laser pulses with overdense plasmas, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 205006.

[68] R. Nuter, L. Gremillet, P. Combis, M. Drouin, E. Lefebvre, A. Flacco, V. Malka, Influence of a preplasma on electron heating and proton acceleration in ultraintense laser-foil interaction, J. Appl. Phys. 104 (2008) 103307.

[69] A. Lévy, R. Nuter, L. Gremillet, M. Drouin, *et al*, Wave breaking of laser accelerated ion beams, New Journal of Physics 11 (2009) 093036.

[70] E. Michel, B. A. Shadwick, C. B. Schroeder, C. G. R. Geddes, E. Esarey, W. P. Leemans, H. Ruhl, T. Cowan, Accurate modeling of laser-plasma accelerators with particle-in-cell codes, in : ADVANCED ACCELERATOR CONCEPTS : 12th Advanced Accelerator Concepts Workshop. AIP Conference Proceedings„ Vol. 877, 2006, pp. 213–219.

[71] K. J. Bowers, B. J. Albright, L. Yin, B. Bergen, T. J. T. Kwan, Ultrahigh performance three-dimensionnal electromagnetic relativistic kinetic plasma simulation, Phys. Plasmas 15 (2008) 055703.

[72] D. W. Hewett, Low-frequency electromagnetic (Darwin) applications in plasma simulations, Comput. Phys. Commun. 84 (1994) 243–277.

[73] T. Taguchi, T. M. Antonsen, K. Mima, Study of hot electron beam transport in high density plasma using 3D hybrid-Darwin code, Comp. Phys. Comm. 164 (1) (2004) 269–278.

[74] M. R. Gibbons, D. W. Hewett, The darwin direct implicit particle-in-cell (dadipic) method for simulation of low frequency plasma phenomena, J. Comput. Phys. 120 (1995) 231–247.

[75] M. R. Gibbons, D. W. Hewett, Characterization of the darwin direct implicit particle-in-cell method and resulting guidelines for operation, J. Comput. Phys. 130 (1997) 54–66.

[76] J. Candy, R. E. Waltz, An Eulerian gyrokinetic-Maxwell solver, J. Comput. Phys. 186 (2) (2003) 545–581.

[77] R. J. Mason, Monte Carlo hybrid modeling of electron transport in laser produced plasmas, Phys. Fluids 23 (1980) 2204.

[78] A. P. L. Robinson, M. Sherlock, Magnetic collimation of fast electrons produced by ultraintense laser irradiation by structuring the target composition, Phys. Plasmas 14 (2007) 083105.

[79] C. G. Darwin, Phil. Mag. 39 (1920) 537.

[80] J. Denavit, Time-filtering particle simulations with $\omega_{pe}\delta t \gg 1$, J. Comput. Phys. 42 (1981) 337–366.

[81] R. J. Mason, Implicit moment simulation of plasmas, J. Comput. Phys. 41 (1981) 233–244.

[82] J. U. Brackbill, D. W. Forslund, An implicit method for electromagnetic plasma simulation in two dimensions, J. Comput. Phys. 46 (1982) 271.

[83] R. J. Mason, An electromagnetic field algorithm for 2d implicit plasma simulation, J. Comput. Phys. 71 (1987) 429–473.

[84] H. X. Vu, J. U. Brackbill, CELEST1D : an implicit, fully kinetic-model for low-frequency, electromagnetic plasma simulation, Comp. Phys. Comm. 69 (1992) 253.

[85] G. Lapenta, J. U. Brackbill, P. Ricci, Kinetic approach to microscopic-macroscopic coupling in space and laboratory plasmas, Phys. Plasmas 13 (2006) 055904.

[86] B. I. Cohen, A. B. Langdon, D. W. Hewett, R. J. Procassini, Performance and optimization of direct implicit particle simulation, J. Comput. Phys. 81 (1989) 151–168.

[87] M. S. Wei, A. A. Solodov, J. Pasley, R. B. Stephens, D. R. Welch, F. N. Beg, Study of relativistic electron beam production and transport in high intensity laser interaction with a wire target by integrated LSP modeling, Phys. Plasmas 15 (2008) 083101.

[88] R. B. Campbell, J. S. DeGroot, T. A. Melhorn, D. R. Welch, B. V. Oliver, Collimation of PetaWatt laser-generated relativistic electron beams propagating though solid matter, Phys. Plasmas 10 (10) (2004) 4169.

[89] R. J. Mason, Heating mechanisms in short-pulse laser-driven cone targets, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 035001.

[90] B. Chrisman, Y. Sentoku, A. J. Kemp, Intensity scaling in hot electron energy coupling in cone-guided fast ignition, Phys. Plasmas 15 (2009) 056309.

[91] E. Martinolli, M. Koenig, S. D. Baton, J. J. Santos, F. Amiranoff, D. Batani, E. Perelli-Cippo, F. Scianitti, L. Gremillet, R. Mélizzi, A. Decoster, C. Rousseaux, T. A. Hall, M. H. Key, R. Snavely, A. J. MacKinnon, R. R. Freeman, J. A. King, R. Stephens, D. Neely, R. J. Clarke, Fast-electron transport and heating of solid targets in high-intensity laser interactions measured by K_α fluorescence, Phys. Rev. E 73 (4) (2006) 046402.

[92] K. U. Akli, S. B. Hansen, A. J. Kemp, R. R. Freeman, F. N. Beg, D. C. Clark, S. D. Chen, D. Hey, S. P. Hatchett, K. Highbarger, E. Giraldez, J. S. Green, G. Gregori, K. L. Lancaster, T. Ma, A. J. MacKinnon, P. Norreys, N. Patel, J. Pasley, C. Shearer, R. B. Stephens, C. Stoeckl, M. Storm, W. Theobald, L. D. van Woerkom, R. Weber, M. H. Key, Laser heating of

solid matter by light-pressure-driven shocks at ultrarelativistic intensities, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 165002.

[93] T. E. Cowan, A. W. Hunt, T. W. Phillips, S. C. Wilks, M. D. Perry, C. Brown, W. Fountain, S. Hatchett, J. Johnson, M. H. Key, T. Parnell, D. M. Pennington, R. A. Snavely, Y. Takahashi, Photonuclear fission from high energy electrons from ultraintense laser-solid interactions, Phys. Rev. Lett. 84 (5) (2000) 903–906.

[94] K. W. D. Ledingham, P. McKenna, R. P. Singhal, Applications for nuclear phenomena generated by ultra-intense lasers, Science 300 (2003) 1107–1111.

[95] B. Bodin, Sur la méthode directe implicite, Internal report CMAP.

[96] P. Concus, G. H. Golub, Use of fast direct methods for the efficient numerical solution of nonseparable elliptic equations, SIAM J. Numer. Anal. 10 (6) (1973) 1103–1120.

[97] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. Vetterling, Numerical Recipes in Fortran 90 : The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1996.

[98] A. D. Greenwood, K. L. Cartwright, J. W. Luginsland, E. A. Baca, On the elimination of numerical Cerenkov radiation in PIC simulations, J. Comput. Phys. 201 (2) (2004) 665–684.

[99] A. B. Langdon, Analysis of the time integration in plasma simulation, J. Comput. Phys. 30 (1979) 202–221.

[100] B. I. Cohen, A. B. Langdon, A. Friedman, Smoothing and spatial grid effects in implicit particle simulation, J. Comput. Phys. 56 (1984) 51–64.

[101] E. Lefebvre, N. Cochet, S. Frizler, V. Malka, M.-M. Aléonard, J.-F. Chemin, S. Darbon, L. Disdier, J. Faure, A. Fedotoff, O. Landoas, G. Malka, V. Méot, P. Morel, M. Rabec Le Goahec, A. Rouyer, C. Rubbelynck, V. Tikhonchuk, R. Wrobel, P. Audebert, C. Rousseaux, Electron and photon production from relativistic laser-plasma interactions, Nucl. Fusion 43 (2003) 629–633.

[102] L. Gremillet, D. Bénisti, E. Lefebvre, Linear and nonlinear development of oblique beam-plasma instabilities in the relativistic kinetic regime, Phys. Plasmas 14 (2007) 040704.

[103] L. Gremillet, Communication privée.

[104] E. S. Weibel, Spontaneously growing transverse waves in a plasma due to an anysotropic velocity distribution, Physical Review Letters 2 (3).

[105] A. Bret, L. Gremillet, J. C. Bellido, How really transverse is the filamentation instability ?, Phys. Plasmas 14 (2007) 032103.

[106] A. Bret, L. Gremillet, D. Bénisti, E. Lefebvre, Exact relativstic kinetic theory of an electron-beam-plasma system : Hierarchy of the competing modes in the system-parameter space, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 205008.

[107] M.Tzoufras, C. Ren, F. S. Tsung, J. W. Tongue, W. Mori, M. Fiore, R. Fonseca, L. O. Silva, Space-charge effects in the current-filamentation or weibel instability, Phys. Rev. Lett. 96 (105002).

[108] M. Honda, J. Meyer-Ter-Vehn, A. Pukhov, Two-dimensionnal, particle-in-cell simulations for magnetized transport of ultra-high relativstic currents in plasma, Phys. Plasmas 7 (4) (2000) 1302–1308.

[109] E. de Sturler, H. A. van der Vorst, Reducing the effect of global communication in gmres(m) and cg on parallel distributed memory computers, Applied Numerical Mathematics 18 (1995) 441–459.

[110] G. Li, A block variant of the gmres method on massively parallel processors, Parallel Computing 23 (1997) 1005–1019.