

Méthodes déterministes de résolution des équations de Vlasov-Maxwell relativistes en vue du calcul de la dynamique des ceintures de Van Allen

Solène Le Bourdiec

▶ **To cite this version:**

Solène Le Bourdiec. Méthodes déterministes de résolution des équations de Vlasov-Maxwell relativistes en vue du calcul de la dynamique des ceintures de Van Allen. Modélisation et simulation. Ecole Centrale Paris, 2007. Français. NNT : . tel-00146258

HAL Id: tel-00146258

https://theses.hal.science/tel-00146258

Submitted on 14 May 2007

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.



ÉCOLE CENTRALE DES ARTS
ET MANUFACTURES
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'École Centrale Paris
Spécialité Mathématiques Appliquées

par

Solène Le Bourdiec

Méthodes déterministes de résolution des équations de Vlasov-Maxwell relativistes en vue du calcul de la dynamique des ceintures de Van Allen

Soutenue publiquement le 30 mars 2007, devant le jury composé de :

M.	Daniel Bouche	Examinateur
M.	Alain Ghizzo	Président du jury
M.	Serge Piperno	Rapporteur
M.	Jacques Segré	Examinateur
M.	Eric Sonnendrücker	Rapporteur
M.	Florian de Vuyst	Directeur de thèse

2007-14

A mes parents,
à M.J.,

Tenant la barre fermement
Pour remonter au vent,
Les marins chancelant
Partent pour un voyage enivrant.

Le navire glisse lentement
Sur l'océan chantant,
Son clapot éclaboussant
Les pieds des marins à l'avant.

Bordant les voiles aux grés du vent,
Leurs airs entraînant
Croisent à chaque instant
Le souffle du noroît hurlant.

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier chaleureusement mon directeur de thèse M. Florian de Vuyst pour ses qualités scientifiques, sa disponibilité, ses encouragements, son optimisme et pour la confiance qu'il m'a accordée dans la réalisation de ce travail. Je remercie MM. Eric Sonnendrücker et Serge Piperno pour m'avoir fait l'honneur d'être rapporteurs de cette thèse ainsi que pour l'attention qu'ils ont portés à mon travail et la qualité de leurs remarques. MM. Jacques Segré et Alain Ghizzo ont accepté de faire partie de mon jury de thèse et je leur en suis reconnaissante. Mes remerciements vont également à M. Daniel Bouche pour m'avoir proposé ce sujet de thèse et pour sa présence dans mon jury.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Mme Laurence Bonnet, la chef du service PPE et à M. Michel Primout le chef du laboratoire PMP du Commissariat à l'Energie Atomique pour leur soutien au cours des derniers mois. Merci à Laurent Grémillet pour son aide, pour les calculs PIC qu'il a réalisé à des fins de comparaison avec mon code et pour le cas test très intéressant qu'il m'a proposé. Je ne remercierai jamais assez Anne Sinquin pour avoir osé agir. Benoît Canaud a été un véritable coach pendant la dernière ligne droite de cette thèse. Je tiens à lui exprimer toute ma gratitude pour ses conseils avisés. Merci à Sylvie Dulac et Rachel Nuter pour leur soutien, leurs conseils et leurs discours encourageants et réconfortants.

Je tiens à remercier Jean-Bernard Lekien du CEA pour le temps passé à m'aider à adapter le code au super-calculateur Tera 10, pour sa disponibilité et sa patience. Je remercie vivement Nathan Maman pour ses idées lumineuses en parallélisme ; celles-ci m'ont été fort utiles. Mes remerciements vont également à André Mangeney de l'observatoire de Meudon pour ses remarques intéressantes et pour m'avoir donné les routines fortran de sa méthode de Galerkin discontinue VL3. Le logiciel m'ayant permis de visualiser des coupes des fonctions de distribution dans l'espace des phases est l'outil "plasmaViz" développé par Mathieu Haeffele de Strasbourg. Je le remercie de m'avoir fourni son logiciel et pour son aide à l'installation. Merci à Yvon Maday de l'Université Paris 6 de nous avoir aiguillé vers des méthodes pseudo-spectrales lors du congrès SMAI 05.

Je remercie les membres du laboratoire MAS de l'Ecole Centrale Paris pour leur accueil chaleureux lors de chacun de mes passages au laboratoire, en particulier Sylvie, Fatima, Christophe A., Lucie, Marc, Ioané et Amélie.

Mes remerciements vont également aux thésards, post-doc et stagiaires, du service PPE et du “couloir”, sans oublier bien sûr les participants des “séminaires nucléaire et escalade” et les participants des “repas-bus” : David, Emeric, Michel (for his fruitful discussions et le reste), Mathieu D., Xavier, Constant, Julien, Lisl, Hugues, Marc-Antoine, Virginie, Franck, Christophe F., Mathieu P., Pascale, Anne R., Axel, Séverine, Jean-Noel, Olaf, Julie... Tout ce petit monde que j'ai connu tout au long de ma thèse a rendu la vie sur le centre tellement plus agréable que je leur en suis vraiment reconnaissante. Merci pour leur amitié et pour tous les moments de convivialité passés ensemble. Je voudrais adresser une dédicace spéciale à Hugues, en particulier pour son écoute attentive et son affection qui m'ont beaucoup aidé.

Je remercie très chaleureusement ma famille pour m'avoir toujours guidé vers la réussite : mes parents à qui je dois tout, mon frère qui m'a ouvert la voie, ma sœur, pour son admiration. Je souhaite qu'elle soit heureuse dans les études qu'elle va entreprendre. Merci au petit Zéphir d'apporter beaucoup de bonheur autour de lui.

Table des matières

Introduction **11**

I La dynamique des ceintures de Van Allen : description et modélisation 15

1 Contexte physique de l'étude 17

I Les ceintures de Van Allen 17
I.1 Historique 17
I.2 Composition 18
II La dynamique des ceintures 19
II.1 Mouvement des particules énergétiques 19
II.2 Les ondes whistlers : "bruit dans la magnétosphère" 22
II.3 Critère de piégeage des particules, dépiégeage et cône de perte . . 22
III Les satellites géostationnaires en péril 24
IV Etudes sur la simulation des ceintures de Van Allen 24
V Etudes effectuées au CEA et motivations de la thèse 25

2 Modélisation des phénomènes et méthodes de résolution 27

I Le modèle de Vlasov-Maxwell 27
I.1 Modèle hydrodynamique 27
I.2 Modèle cinétique 29
I.3 Domaine de calcul 30
II Méthodes de résolution du modèle 31
II.1 Par l'analyse mathématique 31
II.2 A partir des théories linéaires et quasi-linéaires 31
II.3 Par une méthode de résolution numérique 36
III Choix d'une méthode numérique 36
III.1 Propriétés du modèle 36
III.2 Les méthodes PIC 39
III.3 Les méthodes "Vlasov" 40
III.4 Choix d'une méthode de résolution des équations de Vlasov-Maxwell dans le cadre de la simulation des ceintures de Van Allen 45

II Méthodes spectrale et pseudo-spectrales pour la résolution numérique du système de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv 47

3 Présentation des méthodes 49
I Introduction . . . 50
I.1 Rappels sur les méthodes spectrales . . . 50
I.2 Choix des fonctions de base . . . 51
I.3 Propriétés mathématiques et numériques des méthodes spectrales de Hermite . . . 53
I.4 Méthodes spectrales pour la résolution de l'équation de Vlasov et filamentation . . . 58
I.5 Facteur d'échelle . . . 61
I.6 Propriétés de conservation des méthodes spectrales de Hermite symétriquement pondérées et asymétriquement pondérées appliquées à l'équation de Vlasov . . . 62
II Méthode de Galerkin basée sur des fonctions de Hermite : SGM . . . 63
II.1 Principe de la méthode SGM . . . 63
II.2 Estimations d'erreur . . . 63
III Méthodes pseudo spectrales LSCM et HSCM : deux procédés d'interpolation . . . 64
III.1 Quadrature de Gauss-Hermite avec facteur d'échelle . . . 64
III.2 Procédé d'interpolation construit sur les polynômes de Lagrange : méthode LSCM . . . 66
III.3 Procédé d'interpolation basé sur des fonctions de Hermite : méthode HSCM . . . 66
III.4 Estimation de l'erreur . . . 67
IV Choix et apports du facteur d'échelle . . . 68
IV.1 Choix du facteur d'échelle optimal pour SGM . . . 68
IV.2 Choix du facteur d'échelle optimal pour LSCM . . . 69
IV.3 Choix du facteur d'échelle optimal pour HSCM . . . 69

4 Application au système de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv 75
I Le système de Vlasov Poisson . . . 75
II Discrétisation en vitesse . . . 76
II.1 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode SGM . . . 76
II.2 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode LSCM . . . 78
II.3 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode HSCM . . . 79
III Semi-discrétisation en temps . . . 80
III.1 Deux méthodes de splitting d'ordre deux . . . 81
III.2 Méthode de splitting pour SGM . . . 82
III.3 Méthode de splitting pour LSCM et HSCM . . . 83
IV Discrétisation spatiale . . . 83
IV.1 Méthode de Galerkin discontinue *VL3* . . . 83
IV.2 Autres schémas possibles . . . 86
V Discrétisation de l'équation de Poisson . . . 87
VI Optimisation : Méthode de subcycling . . . 89

VI.1 Principe de la méthode de subcycling 89
VI.2 Application aux algorithmes utilisés 90

5 Résultats 1Dx-1Dv 93
I Effet Landau linéaire 93
I.1 Présentation du cas test 93
I.2 Amortissement exponentiel du champ électrique 94
I.3 L'effet de récurrence 96
I.4 Remarque sur la CFL du schéma d'advection *VL3* 98
II Effet landau non linéaire. 98
II.1 Présentation du cas test 98
II.2 Evolution en temps du champ électrique 99
II.3 Evolution de la fonction de distribution 99
III L'instabilité two-stream 100
III.1 Présentation du cas test 100
III.2 Evolution en temps des premiers modes de Fourier du champ électrique et de l'énergie électrique 100
III.3 Evolution de la distribution de particules 103
IV Comparaison des schémas d'advection 108
V Simulations en temps longs 108
V.1 Instabilité two-stream en temps longs 111
V.2 Amortissement Landau non-linéaire en temps longs 111
VI Tests de conservation 111

III Résolution numérique du système de Vlasov-Maxwell relativiste 1Dx-3Dv, parallélisation et résultats 117

6 Extension des méthodes au problème de Vlasov-Maxwell relativiste 1Dx-3Dv 119
I Méthode spectrale pour la semi-discrétisation en impulsion 120
I.1 Généralisation de la méthode SGM en dimensions supérieures en hypothèse non relativiste 120
I.2 Difficultés de la discrétisation spectrale du problème relativiste . . 120
I.3 Résolution spectrale à l'aide d'harmoniques sphériques 121
II Méthode de collocation pseudo-spectrale pour la semi-discrétisation en impulsion 122
II.1 Méthodes de collocation et problème relativiste 122
II.2 Application aux équations de Vlasov-Maxwell 3Dx-3Dv 124
III Discrétisations spatiale et temporelle de l'équation de Vlasov 125
IV Algorithme de résolution de l'équation de Vlasov tridimensionnelle sur une itération en temps 127
V Discrétisation des équations de Maxwell 129
V.1 Equations de Maxwell et réduction 2D 129
V.2 Méthodes de résolution des équations de Maxwell 130
V.3 Méthode FDTD et schéma de Yee 131

VI Le code cinétique 1Dx-3Dv HELIOS 133

7 Optimisation et parallélisme **135**
I Parallélisation de la méthode de collocation 135
I.1 Performance de la parallélisation *(speed-up)* 138
II Travail d'optimisation du code HELIOS sur le supercalculateur TERA 10 140
II.1 Le supercalculateur TERA 10 141
II.2 Etude de performance du code *(profiling)* 141
II.3 Optimisation des boucles 142
II.4 Parallélisation dans une seule direction d'impulsion 143
II.5 Passage à un code de production 144
III Résultats : gains en performance obtenus avec le code parallèle optimisé . 146

8 Résultats 1Dx-3Dv **149**
I Cas tests classiques avec une espèce d'électrons 149
I.1 Instabilité de type Weibel 149
I.2 Instabilités de type whistler 151
II Cas tests relativistes à deux espèces d'électrons 159
II.1 Instabilité Weibel 159
II.2 Instabilité whistler et ceintures de Van Allen 161

Conclusion et perspectives **167**

Annexes **175**

A Méthode spectrale de discrétisation en impulsion de l'équation de Vlasov 1Dx-3Dv **175**
I Bases de polynômes de Laguerre associés L_n^k et bases d'harmoniques sphériques 175
I.1 Polynômes de Laguerre associés 175
I.2 Harmoniques sphériques 176
II Application aux équations de Vlasov-Maxwell relativistes tridimensionnelles 177

B Eléments du code HELIOS **183**

Bibliographie **187**

Introduction

Les prévisions sont difficiles,
surtout lorsqu'elles concernent l'avenir.
Pierre Dac

Les satellites artificiels baignent dans un environnement radiatif qui conditionne en partie leur fiabilité et leur durée de vie en opération. Afin de les protéger de cet environnement hostile, on cherche à prévoir les phénomènes radiatifs qui constituent des sources d'agression au cours de leur mission. L'environnement spatial terrestre est peuplé de particules de hautes énergies, issues principalement du vent solaire. Piégées par le champ magnétique dipolaire terrestre, ces particules sont confinées en régions : les ceintures de Van Allen.

Afin de déterminer de façon précise l'environnement spatial, hostile aux satellites en opération, il apparaît nécessaire d'étudier la dynamique des ceintures radiatives : comprendre les phénomènes physiques qui les composent, les modéliser et les résoudre par une méthode numérique adaptée. Nous nous intéressons en particulier à l'évolution des densités et des flux d'électrons énergétiques piégés dans les ceintures radiatives. Cette évolution est déterminée essentiellement par les interactions entre les électrons énergétiques et les ondes électromagnétiques existant dans la magnétosphère. Ces interactions se modélisent via les équations de Vlasov-Maxwell relativistes (3Dx-3Dv),

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} & + & \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & + & \nabla\times\mathbf{E} = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} & - & c^2\nabla\times\mathbf{B} = -\dfrac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \\ \nabla.\mathbf{E} & = & \dfrac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla.\mathbf{B} & = & 0, \end{cases} \tag{1}$$

où $\rho(\mathbf{x},t) = \int f d\mathbf{p}$ et $\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \int \mathbf{v} f d\mathbf{p}$.

Le travail de cette thèse consiste à concevoir un schéma numérique original pour la résolution du système de Vlasov-Maxwell appliqué à la dynamique des ceintures de Van Allen. La complexité algorithmique du problème discret et la présence possible de petites structures dans la solution conditionnent le choix d'une méthode de résolution numérique adaptée. Afin de pouvoir calculer le développement d'ondes excitées par des

instabilités à faible taux de croissance et leur rétroaction non linéaire sur la population électronique, notre choix s'est orienté vers des méthodes d'intégration directe, intrinsèquement non bruitées, et tout particulièrement vers des méthodes spectrales pour la discrétisation en impulsion, ces méthodes d'ordre élevé étant moins coûteuses que les méthodes eulériennes.

Les premiers essais d'application de méthodes spectrales pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov, dans les années 1960, ont apporté des résultats peu satisfaisants. Les simulations étaient instables et, en particulier, la norme L^2 de la fonction de distribution n'est pas conservée (Armstrong 1967). Mais de récents travaux de Holloway (1996) et de Schumer-Holloway (1998) ont apporté des résultats très probants. Les fonctions de base choisies sont des fonctions de Hermite de la forme,

$$\tilde{H}_{N+1}(v) = H_{N+1}(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2},$$

où $H_{N+1}(v)$ est le polynôme de Hermite de degré $N+1$. La nouveauté réside dans l'ajout d'un facteur d'échelle en vitesse, noté α, dans la base de fonctions de Hermite. Ce facteur d'échelle, qu'il est nécessaire de choisir de manière adaptée aux solutions de la simulation, permet d'obtenir une résolution convenable en vitesse avec un petit nombre de fonctions de base. Cette fine résolution permet de rendre compte des petites structures en vitesse, la filamentation de la solution, à moindre coût. Les méthodes spectrales de Hermite conviennent particulièrement pour la simulation de faisceaux maxwelliens en vitesse, les fonctions de Hermite ayant un profil asymptotique exponentiellement décroissant à l'infini et étant orthogonales sur un domaine non borné.

S'appuyant sur les idées introduites par Holloway, nous proposons trois nouvelles méthodes déterministes pour la résolution numérique des équations de Vlasov-Maxwell. Ces méthodes sont basées sur une discrétisation spectrale en vitesse utilisant des fonctions de Hermite dépendant d'un facteur d'échelle. Les trois méthodes spectrales en vitesse sont les suivantes.

- La méthode SGM (*Spectral Galerkin Method*) est une méthode de Galerkin sur une base de fonctions asymétriquement pondérées (de poids $\omega(v) \neq 1$). Grâce aux bonnes propriétés des fonctions de base, en particulier les relations de récurrence qu'elles vérifient, cette méthode a pour intérêt de conduire à des systèmes matriciels creux.

- La méthode LSCM (*Lagrange Spectral Collocation Method*) est une méthode de collocation, dont les points associés sont les points de Gauss-Hermite : les zéros du polynôme de Hermite de degré $N+1$. La fonction d'interpolation de la fonction de distribution est construite à partir des polynômes de Lagrange multipliés par une maxwellienne.

- La méthode HSCM (*Hermite Spectral Collocation Method*) est une deuxième méthode de collocation aux points de Gauss-Hermite dont l'interpolation s'appuie sur des fonctions de Hermite symétriquement pondérées ($\omega(v) \equiv 1$).

Les deux méthodes de collocation sont associées à une quadrature de Gauss-Hermite dépendant du facteur d'échelle.

Le problème continu est alors ramené à un problème semi-discret de grande taille. Pour résoudre ce système, un schéma de Strang d'ordre deux en temps est utilisé. Différents schémas d'advection sont testés pour la discrétisation spatiale : une méthode de Galerkin discontinue d'ordre trois (Mangeney 2002) et deux schémas classiques de différences finies, le schéma de Lax Wendroff et le schéma "upwind". Les conditions aux bords de la boîte de simulation sont périodiques.

Cette thèse est organisée en trois parties.

Partie 1 : La dynamique des ceintures de Van Allen : description et modélisation.

Un premier chapitre présente le contexte physique de la thèse. Nous verrons la nature des particules piégées dans les ceintures radiatives, leur provenance et l'origine du piégeage. Nous expliquerons comment l'analyse des interactions entre des ondes électromagnétiques et les électrons énergétiques piégés constituent la dynamique des ceintures radiatives. Nous déduirons de cette partie les motivations d'une étude sur la dynamique des ceintures de Van Allen.

Nous verrons au deuxième chapitre, comment les phénomènes constituant la dynamique des ceintures radiatives, se modélisent via le système des équations relativistes de Vlasov-Maxwell. Deux études analytiques du système, à partir des théories linéaire et quasi-linéaire, sont présentées et nous verrons les résultats qu'elles apportent. Afin de choisir une méthode de résolution numérique adaptée à l'étude, les principales méthodes de résolution numérique du système de Vlasov-Maxwell seront rappelées. A partir des propriétés de l'équation de Vlasov et des caractéristiques de l'étude, les méthodes spectrales seront choisies pour la discrétisation en vitesse du modèle.

Partie 2 : Méthodes spectrale et pseudo-spectrales pour la résolution numérique du système de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv.

Cette partie commencera par un état de l'art des méthodes spectrales utilisées pour la résolution numérique du système des équations de Vlasov-Maxwell et en particulier les travaux d'Holloway seront présentés. Puis nous détaillerons les trois méthodes spectrales SGM, LSCM et HSCM, choisies pour la discrétisation en vitesse de l'équation de Vlasov.

Dans un deuxième temps, nous présenterons en détail les calculs conduisant à la discrétisation et à la résolution du problème de Vlasov-Poisson monodimensionnel en espace et en vitesse, à partir des méthodes spectrales de discrétisation en vitesse et de différentes méthodes proposées pour la discrétisation spatiale.

Au chapitre suivant, nous comparerons les performances des différentes méthodes mises en œuvre, à partir de plusieurs cas tests numériques issus de la physique des plasmas tels que les effets Landau linéaire et non linéaire, ou encore l'instabilité "two-stream".

Partie 3 : Résolution numérique du système de Vlasov-Maxwell relativiste 1Dx-3Dv et parallélisation.

Nous verrons au début de cette partie, les extensions possibles des méthodes spec-

trales de discrétisation en vitesse, au problème de Vlasov-Maxwell relativiste tridimensionnel (1), puis la discrétisation en temps et en espace du système complet. Nous verrons quelle méthode est choisie pour l'implémentation d'un code cinétique, le code HELIOS, permettant de traiter plusieurs espèces de particules dans le plasma sur une dimension d'espace et trois dimensions d'impulsion. Pour pouvoir réaliser des simulations réalistes, il est nécessaire de réduire le temps de calcul du code. Pour ce faire, une technique de parallélisation en vitesse des algorithmes de résolution a été mise en œuvre et sera présentée, ainsi qu'un travail d'optimisation de code, adapté au supercalculateur TERA 10 du CEA.

Nous présenterons les calculs de validation du code 1Dx-3Dv à partir de cas tests classiques et relativistes à une ou deux espèces d'électrons : le développement linéaire et la saturation non-linéaire d'instabilités de type Weibel et d'instabilités de type "whistler". Nous montrons que le code restitue bien les phénomènes liés à l'excitation d'ondes, les modes de type Weibel dans le cas d'un plasma sans champ magnétique statique et les ondes "whistlers" dans le cas d'un plasma magnétisé anisotrope.

Ce travail de thèse a été encadré par Florian de Vuyst[1] et en partie par Laurent Jacquet[2].

[1]Laboratoire MAS, Ecole Centrale Paris

[2]Département de Physique Théorique et Appliquée, CEA Bruyères-Le-Châtel.

Première partie

La dynamique des ceintures de Van Allen : description et modélisation

Chapitre 1

Contexte physique de l'étude

Les satellites artificiels baignent dans un environnement radiatif qui conditionne en partie leur fiabilité et leur durée de vie en opération. Afin de les protéger de cet environnement hostile, on cherche à prévoir les phénomènes radiatifs qui constituent des sources d'agression pour les satellites au cours de leur mission. L'environnement spatial terrestre est peuplé de particules de hautes énergies, issues principalement du vent solaire. Piégées par le champ magnétique dipolaire terrestre, ces particules sont confinées en régions ayant une structure de révolution autour de la Terre et coupant le plan équatorial : les ceintures de Van Allen.

Après une description de la nature des ceintures de radiation, nous détaillerons les phénomènes prépondérants qui déterminent leur dynamique, c'est à dire l'évolution temporelle des distributions et des flux de particules qui constituent ces ceintures. Ces différents phénomènes sont le piégeage stable des particules, lié aux propriétés de leurs trajectoires dans le champ magnétique terrestre, l'interaction résonnante entre les particules et les ondes présentes à l'état naturel dans la magnétosphère, en particulier les ondes électromagnétiques de mode whistler et le dépiégeage des particules par diffusion en énergie et en angle d'attaque dans le cône de perte, due aux interactions ondes-particules. Puis nous verrons que les flux de particules piégées dans les ceintures de radiation représentent une menace pour les satellites en opération, en particulier pour les nombreux satellites gravitant sur l'orbite géostationnaire. Cette menace justifie une étude approfondie des mécanismes physiques déterminant la dynamique des ceintures de Van Allen et l'élaboration de modèles permettant de quantifier les niveaux de flux de particules énergétiques. Enfin nous présenterons les motivations de cette étude.

I Les ceintures de Van Allen

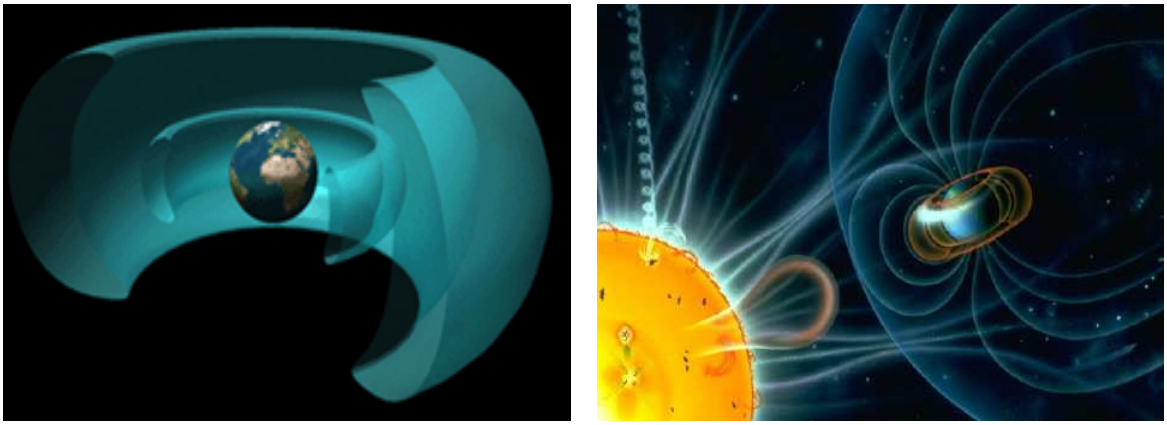
I.1 Historique

Le 31 janvier 1958, le satellite artificiel américain Explorer I est envoyé dans l'espace dans le but d'étudier le rayonnement cosmique. Il est le premier satellite scientifique dédié à l'étude de l'environnement. En analysant les données fournies par Explorer I, Van Allen et Vernov découvrent l'existence de zones de flux intenses d'électrons et d'ions où le niveau de radiations pourrait être mortel pour un spationaute sans pro-

tection. Ces régions de particules entourant la Terre sont alors appelées ceintures de Van Allen ([125], [126], [127]). Dans les années qui vont suivrent, une grande partie des instruments envoyés dans l'espace vont être dédiés à la détection des électrons et des protons énergétiques présents dans les ceintures de Van Allen.

I.2 Composition

La magnétosphère est la région entourant la Terre dans laquelle se trouve confiné le champ magnétique terrestre sous l'action du vent solaire (cf figure 1.1). Le mouvement des particules chargées à l'intérieur de la magnétosphère est contrôlé par le champ magnétique. La magnétosphère agit comme un écran et protège la surface terrestre des excès d'irradiation dus au vent solaire, dont les particules ont des énergies de l'ordre de 100eV.



a *b*

FIG. 1.1 – *Les ceintures de Van Allen ou ceintures de radiation (a) constituées en particulier de particules énergétiques provenant du vent solaire (b).*

La magnétosphère est constituée d'un plasma froid engendré par la fuite d'ions et d'électrons de l'ionosphère. Dans les ceintures de Van Allen, au plasma froid magnétosphérique s'ajoute des électrons et des protons beaucoup plus énergétiques. Ces particules peuvent atteindre des énergies comparables à celles obtenues dans les grands accélérateurs de particules (quelques 100MeV ou GeV). Elles sont injectées dans la magnétosphère par divers phénomènes : des évenements naturels (le vent solaire) ou artificiels.

Le vent solaire, un flux de particules chargées éjectées par le Soleil dans toutes les directions à des vitesses pouvant atteindre 8000km/s, est le principal acteur contribuant à peupler les ceintures.

Cependant, des particules énergétiques issues d'événements artificiels peuvent également être piégées dans les ceintures. Dans les années 50-60, des bombes atomiques russes et américaines, explosant à plusieurs centaines de kilomètres d'altitude, ont injecté des électrons de hautes énergies dans la magnétosphère. Ainsi l'expérience "Starfish" du 7

septembre 1962, une explosion dans la gamme mégatonique (1,4MT) située à 400km d'altitude a libéré de l'ordre de 10^{29} électrons de forte énergie. Une partie d'entre eux ont immédiatement précipité dans l'ionosphère, provoquant des aurores boréales en des endroits parfois assez inattendus. Mais des électrons piégés dans les ceintures de radiation, issus de cet évènement, ont été ensuite identifiés pendant des mois voire plus d'un an après l'explosion.

II La dynamique des ceintures

II.1 Mouvement des particules énergétiques

Issues principalement du vent solaire, les particules énergétiques constituant les ceintures de Van Allen sont piégées par le champ magnétique dipolaire terrestre de manière plus ou moins stable. Il existe deux zones de piégeage stable pour les électrons, une ceinture interne et une ceinture externe et une zone de piégeage stable pour les protons (cf figure 1.2).

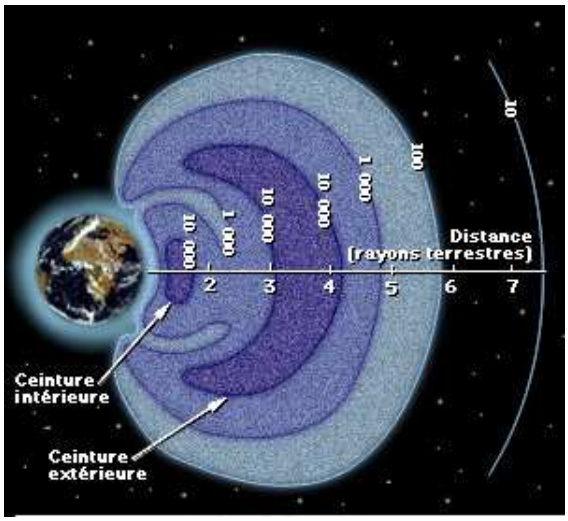


FIG. 1.2 – *Les ceintures intérieure et extérieure, deux zones de piégeage stable pour les électrons.*

La configuration dipolaire du champ magnétique terrestre est inhomogène spatialement et les lignes de champ sont courbes. Cette topologie détermine les trajectoires des particules et explique leur piégeage dans les ceintures de Van Allen.

Les particules se déplacent selon un mouvement complexe que l'on peut décomposer en trois mouvements élémentaires et quasi-périodiques auxquels sont associées des périodes très différentes (cf le tableau des temps caractéristiques 1.1) : un mouvement de gyration autour des lignes de champ, un mouvement de rebond entre deux points appelés miroirs magnétiques et un mouvement de dérive azimutale. A chacun de ces trois mouvements est associée une quantité restant constante, appelée invariant adiabatique (cf le tableau 1.2).

mouvement élémentaire	temps caractéristique
gyration	10^{-4} secondes
rebond	1 seconde
dérive	15 minutes

TAB. 1.1 – *Temps caractéristiques des différents mouvements élémentaires pour des électrons énergétiques de l'ordre du MeV piégés dans les ceintures radiatives.*

gyration	rebond	dérive
moment magnétique orbital $\mu = \frac{mv_\perp^2}{2B}$	flux magnétique $\phi = \int p_\parallel ds$ avec ds l'abscisse curviligne le long de la ligne de champ	flux magnétique à travers la surface délimitée par le mouvement de dérive (surface de dérive)

TAB. 1.2 – *Les invariants adiabatiques associés aux mouvements élémentaires des particules dans les ceintures radiatives, où l'on a noté $v_\perp$ la vitesse perpendiculaire des particules, $p_\parallel$ leur impulsion parallèle, m leur masse et B le champ magnétique moyenné en espace.*

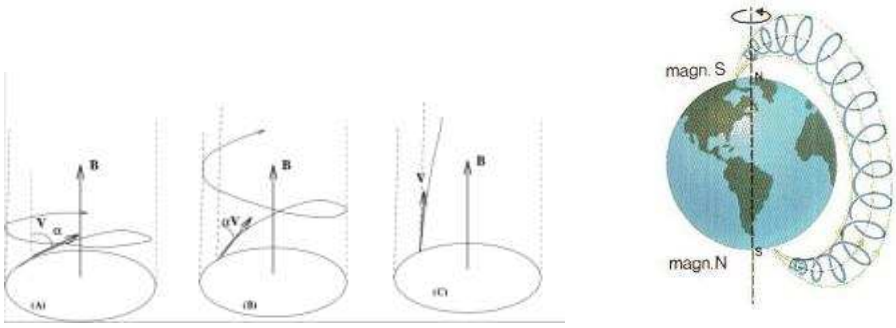
Mouvement de gyration autour des lignes de champs

Les particules chargées sont soumises à la composante magnétique de la force de Lorentz, $\mathbf{F} = q\ \mathbf{v} \times \mathbf{B}$, où $\mathbf{B}$ est le champ magnétique terrestre et q la charge des particules. Les variations temporelles de $\mathbf{B}$ étant négligées, il en résulte que l'énergie cinétique d'une particule sur sa trajectoire reste constante. Dans un champ magnétique spatiallement constant, une particule a un mouvement de gyration autour d'une ligne de champ et sa trajectoire est une hélice dont le rayon est égal au rayon de Larmor de la particule (cf figure 1.3) :

$$r_L = \frac{mv_\perp}{qB} = \frac{v_\perp}{\omega_B}, \tag{1.1}$$

où ω_B est la pulsation du mouvement cyclotron.

Les rayons de Larmor des particules des ceintures étant très petits devant l'échelle spatiale de variation du champ magnétique terrestre, leurs trajectoires varient le long de la ligne de champ en respectant la conservation du premier invariant adiabatique.



a *b*

FIG. 1.3 – *Mouvement de gyration.*

Effet miroir magnétique

Le mouvement de rebond entre les points miroirs est dû à la conservation de l'énergie et du premier invariant adiabatique le long de la ligne de champ. En effet, l'amplitude du champ magnétique terrestre augmentant le long de la ligne de champ quand on s'approche de la Terre, cela entraîne une augmentation de la vitesse perpendiculaire afin de conserver le premier invariant adiabatique. Il en résulte une diminution de la vitesse parallèle liée à la conservation de l'énergie cinétique. La vitesse parallèle diminue jusqu'à s'annuler au point miroir et s'inverser. La particule repart alors vers le pôle opposé. Elle effectue ainsi un mouvement de va-et-vient entre les deux hémisphères et plus précisément entre ses deux points miroirs (cf figure 1.4).

Mouvement de dérive azimutale

Les lignes de champ magnétique terrestre étant courbées, une particule est soumise à une force centrifuge proportionnelle au carré de sa vitesse parallèle et inversement proportionnelle au rayon de courbure de la ligne de champ suivie que la particule suit. Cette force étant normale à la ligne de champ, elle induit un mouvement de dérive azimutale de la particule. De plus, les équations de Maxwell imposent l'existence d'un gradient de champ magnétique, également dans la direction normale aux lignes de champ, ce qui se traduit par un mouvement de dérive. La dérive azimutale des particules chargées résulte de ces deux effets ; le sens de la dérive dépend de la charge de la particule : elle s'effectue vers l'est pour les électrons et vers l'ouest pour les protons. Ce mouvement de dérive contraint les particules chargées à se déplacer tout autour de la Terre sur une "coquille magnétique".

Les échelles de temps des trois mouvements élémentaires décrits précédemment étant très différentes (cf tableau 1.1), on peut superposer ces mouvements et ainsi décrire la trajectoire des particules piégées dans les ceintures par une hélice tournant "lentement" autour de la Terre (cf figure 1.4).

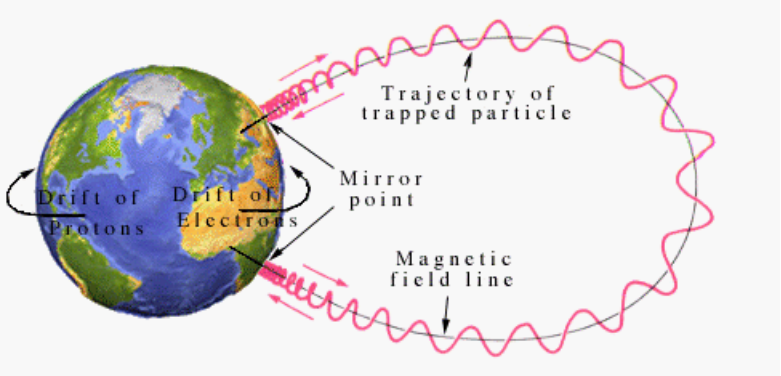


FIG. 1.4 – *Trajectoire en hélice des particules piégées dans les ceintures de Van Allen.*

II.2 Les ondes whistlers : "bruit dans la magnétosphère"

Les ondes whistlers ou "siffleurs" sont des ondes électromagnétiques de basses fréquences qui existent à l'état naturel en tant que bruit dans la magnétosphère (cf figure 1.5). Détectées par Barkhausen en 1919, elles tirent leur nom des effets de dispersion du milieu dans lequel elles se propagent. En effet, celui-ci étale dans le temps la réception au sol des fréquences : les plus basses arrivent le plus tard, produisant un son glissant des aigüs vers les graves. Les ondes whistlers sont des modes cyclotroniques polarisés circulairement ; quand la relation de résonance est satisfaite, le champ électromagnétique des ondes en propagation parallèle au champ magnétique terrestre tourne à la même fréquence que les particules chargées, la fréquence cyclotronique. Dans la magnétosphère, les particules ayant des vitesses parallèles suffisantes pour satisfaire la relation de résonance vont pouvoir interagir de manière efficace avec les ondes whistlers de basse fréquence et inversement. Les ondes whistlers de polarisation circulaire gauche vont interagir préférentiellement avec les ions et les ondes whistlers de polarisation circulaire droite préférentiellement avec les électrons. L'interaction avec les ondes whistlers est le mécanisme prépondérant de dépiégeage des électrons des ceintures de Van Allen.

II.3 Critère de piégeage des particules, dépiégeage et cône de perte

Afin de savoir si les particules injectées seront confinées dans les ceintures, on définit un critère de piégeage à partir de l'angle d'attaque équatorial ("pitch angle") de chaque particule : cet angle est l'angle que fait le vecteur vitesse de la particule avec le champ magnétique à l'équateur de la ligne de champ et est noté θ.

Pour cela, on considère une particule dont le point miroir se situe à la limite des couches denses de l'atmosphère, soit à une altitude de 100km. En effet, si le point miroir se situe à une altitude inférieure, la particule subit de nombreuses collisions et est considérée comme perdue.

On définit par $(v_{\perp_0}, v_{\parallel_0})$ sa vitesse à l'équateur où la norme du champ est minimale et notée B_0, et par $(v_{\perp_l}, v_{\parallel_l}) = (v_\perp, 0)$ sa vitesse au point miroir où la norme du champ

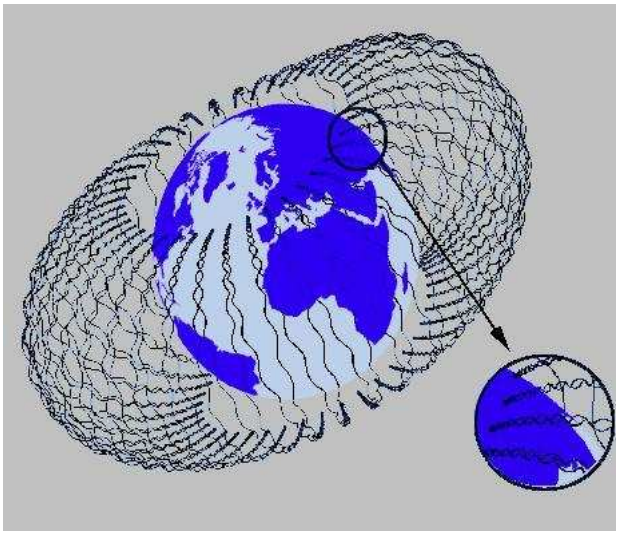


FIG. 1.5 – *Ondes whistlers dans la magnétosphère terrestre.*

est notée B_l. L'invariance du moment magnétique μ (cf tableau 1.2) impose :

$$\frac{1}{2}\frac{mv_{\perp_0}^2}{B_0} = \frac{1}{2}\frac{mv_{\perp_l}^2}{B_l}. \tag{1.2}$$

Comme on a d'autre part, à l'équateur,

$$v_{\perp_0} = v \sin\theta_c, \tag{1.3}$$

et au point limite,

$$v_{\perp_l} = v, \tag{1.4}$$

on en déduit :

$$\sin^2\theta_c = \frac{B_0}{B_l}. \tag{1.5}$$

Cette relation définit θ_c, l'angle de cône de perte ou angle d'attaque critique. Le point miroir de toute particule ayant un angle d'attaque équatorial θ tel que :

$$\theta \leq \theta_c, \tag{1.6}$$

est situé dans les couches denses. Par conséquent une telle particule ne sera pas piégée ou bien sera dépiégée.

Une particule possède un certain angle d'attaque, au moment de son injection dans les ceintures. Si celle-ci est piégée, son angle d'attaque peut être modifié pendant son mouvement de rebond, la particule peut alors entrer dans le cône de perte et être dépiégée. Le principal mécanisme pouvant modifier l'angle d'attaque des particules des ceintures est l'interaction résonnante entre les ondes whistlers et les particules qui entraîne une diffusion de celles-ci dans l'espace des vitesses.

Une particule dépiégée est précipitée dans l'atmosphère ou éventuellement repiégée sur une autre ligne de champ. Dans ce cas la particule est perdue pour la ligne de champ considérée initialement et ne contribue plus au flux existant sur celle-ci.

Les mécanismes de piégeage et de dépiégeage des particules sont illustrés sur la figure 1.6.

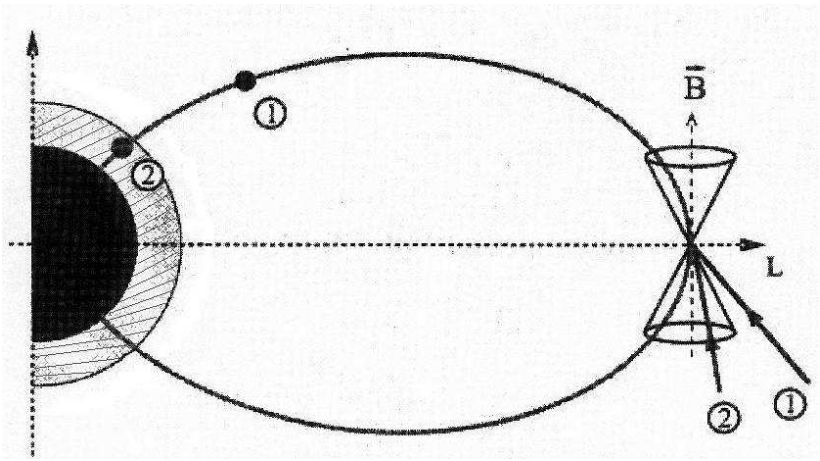


FIG. 1.6 – *Angle d'attaque des particules des ceintures et cône de perte. La particule ayant l'angle d'attaque 1 restera piégée tandis que la particule d'angle d'attaque 2 dans le cône de perte sera dépiégée.*

III Les satellites géostationnaires en péril

L'environnement spatial est à l'origine de nombreuses défaillances des systèmes spatiaux en opération. Tous les satellites, à l'exception de ceux gravitant à basse altitude (quelques centaines de kilomètres), traversent les ceintures de Van Allen et sont menacés par cet environnement radiatif hostile. C'est particulièrement vrai pour les nombreux satellites qui peuplent l'orbite géostationnaire, orbite circulaire dans le plan équatorial de rayon égal à $6,6$ fois le rayon terrestre, et qui sont dédiés aux télécommunications, aux mesures météorologiques...

Ainsi, le 14 juillet 2000, onze parmi les plus importants satellites furent touchés par la même éruption solaire en l'espace de quelques minutes. Certains d'entre eux ont subi des problèmes temporaires, d'autres sont considérés comme perdus aujourd'hui.

Les électrons d'énergie de l'ordre du MeV, issus des éruptions solaires ou d'événements artificiels, sont particulièrement dangereux pour les satellites. Ces flux intenses d'électrons endommagent les satellites par des effets de charge associés tels que la formation d'arcs électriques sur les panneaux solaires et les effets de doses sur les composants électroniques. Les protons relativistes et les ions de très haute énergie représentent également une menace sévère pour les satellites ; ils peuvent entraîner des dysfonctionnements des instruments embarqués menant à la perte du satellite.

IV Etudes sur la simulation des ceintures de Van Allen

La communauté scientifique, en particulier les chercheurs des agences spatiales européenne (ESA) et américaine (NASA), cherchent à prévoir l'état de l'environnement spatial radiatif que va rencontrer un satellite tout au long de sa mission, celle-ci durant en général plusieurs années. Deux approches sont utilisées pour construire les modèles

de prévision des flux d'électrons et de protons : une approche empirique basée sur l'exploitation des mesures de l'environnement magnétosphérique effectuées par les satellites, les radars et les télescopes ; et une approche plus théorique s'appuyant sur des études physico-numériques des mécanismes déterminant la dynamique des ceintures.

Ainsi la NASA a développé, essentiellement à partir de mesures satellitaires, des modèles qui constituent encore à l'heure actuelle les modèles de référence : les modèles $AE8$ pour les ceintures d'électrons et $AP8$ pour les ceintures de protons.

Parallèlement, la modélisation physique des ceintures s'est accélérée avec l'essor de l'informatique et la forte croissance de la puissance des calculateurs. Ainsi des modèles physiques sont construits et continuent d'évoluer. Par exemple, au sein du projet Crateerre (Ceintures de Radiation de la Terre), l'ONERA a développé le modèle Salammbô, qui calcule la dynamique des ceintures de radiation d'électrons sur des temps longs, de l'ordre de 100 ans.

Mais ces modèles de prévision ne sont pas adaptés à la description des ceintures de radiation sur des échelles de temps courts. L'estimation de l'intensité des flux d'électrons piégés sur des temps courts suite à une injection intense demande des études spécifiques.

V Etudes effectuées au CEA et motivations de la thèse

Des études physico-numériques ont été entreprises au CEA-DAM dans le but de décrire en détail l'injection d'électrons d'énergie comprise entre 0,5 et 10MeV (particules β) libérées par une explosion nucléaire située à haute altitude, ainsi que leur évolution dans l'environnement spatial de la Terre et leur effet au niveau d'un satellite ([80], [102]).

La dynamique des ceintures de radiation se caractérise par des échelles de temps allant de quelques minutes à un cycle solaire (11 ans). Il est donc intéressant d'étudier la dynamique des ceintures aussi bien sur des temps courts que sur des temps longs selon les phénomènes que l'on veut observer.

Dans le cadre des études menées au CEA, ce travail de thèse vise à simuler la dynamique des ceintures de Van Allen sur des temps courts, de l'ordre de la dizaine de minutes suivant l'injection des électrons dans la magnétosphère, c'est à dire avant que les particules injectées ne se répartissent dans une coquille magnétique par l'effet de dérive azimutale (II.1). Sur cette échelle de temps, on peut considérer que les particules se répartissent dans le tube de flux entourant la ligne de champ caractérisant l'injection. On va s'intéresser à la détermination des valeurs limites de densité et de flux d'électrons pouvant exister de manière stable sur une ligne de champ après une injection intense. Cette notion de flux limite, appelé également flux à la saturation, est particulièrement importante, car elle fixe les niveaux ultimes de protection à apporter aux satellites [128]-[104]. Les études antérieures ([77],[80]...) ont montré que la saturation était liée à l'existence d'un processus auto-limitant entre la croissance des ondes whistlers excitées par l'anisotropie de la distribution électronique et la rétroaction de ces ondes sur les électrons qui entraine leur dépiégeage par diffusion dans le cône de perte.

Le plasma magnétosphérique étant un plasma non collisionnel, l'étude auto-cohérente des interactions onde-particules se fait dans le cadre de la résolution du système d'équa-

tions couplées de Vlasov-Maxwell. Dans une étude précédente [80], un code basé sur une méthode particulaire a été utilisé pour la résolution de ce système. Mais il apparaît que dans certains cas, la précision des résultats obtenus est insuffisante à cause des problèmes de bruit numérique intrinsèques à cette méthode. L'objectif de cette thèse est de trouver une méthode numérique adaptée aux calculs de flux saturés d'électrons piégés dans la magnétosphère. Celle-ci devra concilier précision des résultats et compatibilité des temps de calcul avec la puissance des ordinateurs disponibles au CEA, en particulier les calculateurs massivement parallèles comme la machine TERA 10.

Chapitre 2

Modélisation des phénomènes et méthodes de résolution

L'analyse de l'émission d'ondes électromagnétiques, et en particulier d'ondes de mode whistler, et de leur interaction avec des électrons énergétiques relativistes piégés dans les ceintures de Van Allen s'étudie via le modèle de Vlasov-Maxwell.

Nous commencerons ce chapitre par rappeler comment on établit, pour l'étude de ces phénomènes, un modèle hydrodynamique multifluide ainsi que le modèle cinétique des équations de Vlasov-Maxwell. Puis nous présenterons deux approches de résolution analytique de ce dernier modèle : la théorie linéaire et la théorie quasi-linéaire. Nous rappellerons ensuite les propriétés du modèle et nous donnerons un état des lieux des méthodes numériques existant à ce jour pour la résolution d'un tel système d'équations en précisant pour chacune d'elles les avantages et les inconvénients. Ces derniers paragraphes nous permettront de mettre en évidence les critères de choix d'une méthode numérique de résolution du système d'équations de Vlasov-Maxwell adaptée à la simulation des phénomènes du plasma magnétosphérique. Nous conclurons ce chapitre en précisant le choix d'un type de méthode de résolution du modèle pour la réalisation du travail de thèse.

I Le modèle de Vlasov-Maxwell

Dans le but de décrire les interactions onde-particule dans le plasma magnétosphérique, on étudie l'évolution d'un ensemble de particules chargées soumises aux forces coulombiennes collectives, de longue portée, représentées par des champs électromagnétiques auto-consistants et des forces extérieures appliquées. Pour analyser la propagation et l'excitation des ondes générées dans le plasma, il est nécessaire de se donner une description du plasma lui-même. Celle-ci peut être soit hydrodynamique soit cinétique [35].

I.1 Modèle hydrodynamique

En prenant les trois premiers moments de l'équation de Vlasov, que nous verrons au paragraphe suivant, on obtient pour chaque espèce de particules α du plasma

magnétosphérique, le système d'équations fluides suivant :

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} = -\nabla.(n_\alpha \mathbf{v}_\alpha), \tag{2.1}$$

$$n_\alpha \left(\frac{\partial \mathbf{v}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}_\alpha.\nabla \mathbf{v}_\alpha \right) = -\nabla p_\alpha + q_\alpha n_\alpha (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \tag{2.2}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{p_\alpha}{n_\alpha^\gamma} \right) = 0, \tag{2.3}$$

avec $\gamma = (c_p - c)/(c_v - c)$ l'indice polytropique, où c_p et c_v sont les capacités calorifiques à pression et volume constant et c est une constante.

Chaque espèce α de particules est caractérisée par sa densité n_α, une vitesse unique : sa vitesse fluide $\mathbf{v}_\alpha$ et sa pression p_α. Le mouvement des ions et des électrons du plasma s'effectue sous l'action de la force de Lorentz $\mathbf{F}$ et du gradient de pression. L'équation (2.3) tient lieu d'équation d'énergie. Elle suppose un comportement adiabatique du fluide représentant l'espèce α qui correspond aux hypothèses de la magnétohydrodynamique (MHD) idéale. Dans cette approche, le plasma est alors considéré comme un fluide parfait conducteur.

Le modèle "multifluide froid" se déduit du système (2.1)-(2.3) en considérant que la pression de chaque espèce est nulle. Il est alors constitué des équations (2.1) et (2.2).

La force de Lorentz couple les équations fluides aux équations de l'électromagnétisme, les équations de Maxwell :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E} = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2\, \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} = -\dfrac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E} = \dfrac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B} = 0, \end{cases} \tag{2.4}$$

où ϵ_0 est la permitivité du vide, c la vitesse de la lumière et où les densités de charge et de courant ρ et $\mathbf{j}$, ont les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \rho = \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha n_\alpha \\ \mathbf{j} = \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha n_\alpha \mathbf{v}_\alpha \end{cases} \tag{2.5}$$

Le modèle hydrodynamique est généralement résolu dans la cadre de la théorie linéaire qui conduit à la relation de dispersion des modes propres des ondes pouvant se propager spontanément dans le plasma. Cette approche, rappelée au paragraphe II.2 de ce chapitre, donne accès aux caractéristiques de propagation des ondes, déterminées par un nombre d'onde et une pulsation réelle. Elle permet également d'obtenir la polarisation des champs électriques et magnétiques associés.

Pour aborder le problème de la croissance ou de l'amortissement des ondes émises, il est nécessaire de traiter finement les échanges d'énergie entre les particules et les ondes émises, ces échanges étant fortement liés à la satisfaction de certaines relations comme les relations de résonance. Pour ce faire, une description plus fine du plasma, de type cinétique s'avère indispensable.

I.2 Modèle cinétique

Au lieu d'envisager l'évolution du système de manière globale (grandeurs macroscopiques), la théorie cinétique cherche à décrire le plasma de façon microscopique.

La façon la plus simple de décrire la dynamique du système serait d'étudier le mouvement de chaque particule sous l'action d'un champ électromagnétique. Or cette étude semble difficile à mettre en œuvre compte tenu du nombre trop important de particules chargées présentes dans le plasma. On ne peut donc pas donner une description détaillée de la dynamique du système, cependant une description statistique des différentes espèces de particules suffit à bien restituer cette dynamique.

Pour décrire le comportement d'un ensemble de N_α particules de différentes espèces α, on introduit une fonction de distribution pour chaque espèce,

$$f_{N_\alpha}(\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_{N_\alpha}; \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_{N_\alpha}; t), \tag{2.6}$$

qui représente la probabilité pour que, à l'instant t, le point représentatif du système constitué des N_α particules se situe dans le volume infinitésimal

$$d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 ... d\mathbf{x}_{\mathbf{N}_\alpha} d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 ... d\mathbf{p}_{N_\alpha},$$

centré au point $(\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_{N_\alpha}; \mathbf{p}_1, ..., \mathbf{p}_{N_\alpha})$, à condition que l'on ait normalisé les fonctions de distribution tel que :

$$\int f_{N_\alpha}(\mathbf{x_i}, \mathbf{p_i}, t) \prod_{i=1}^{N_\alpha} d\mathbf{x_i} d\mathbf{p_i} = 1. \tag{2.7}$$

L'évaluation de la fonction de distribution des particules chargées α soumises à d'éventuelles forces extérieures $\mathbf{F}$ est donnée de façon générale par l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial f_{N_\alpha}}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \left[\mathbf{v}(\mathbf{p}_i).\nabla_{\mathbf{x}_i} + \mathbf{F}.\nabla_{\mathbf{p}_i} \right] f_{N_\alpha} = 0. \tag{2.8}$$

A partir de cette équation, on construit par intégrations successives une hiérarchie d'équations, la hiérarchie BBGKY [39]. La première équation de cette hiérarchie, obtenue en faisant l'hypothèse que les corrélations entre particules sont négligeables, est appelée équation de Vlasov. Elle donne, à chaque instant, le nombre de particules contenues dans l'élément de volume $d^3\mathbf{x}\, d^3\mathbf{v}$, centré sur le point $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ de l'espace des phases. Les plasmas non collisionnels étant également non corrélés, l'équation de Vlasov est l'équation cinétique de base permettant de les décrire. Pour un plasma, le terme de force est la force de Lorentz,

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \tag{2.9}$$

où les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont calculés via les équations de Maxwell, en tenant compte de toutes les espèces α présentes dans le plasma.

On obtient ainsi le système d'équations couplées de Vlasov-Maxwell :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f_\alpha &=& 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E} &=& 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2\ \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} &=& -\dfrac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E} &=& \dfrac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B} &=& 0, \end{array}\right. \tag{2.10}$$

avec

$$\left\{\begin{array}{rcl} \rho(\mathbf{x},t) &=& \displaystyle\sum_\alpha \int f_\alpha\ d\mathbf{p}, \\ \mathbf{j}(\mathbf{x},t) &=& \displaystyle\sum_\alpha \int \mathbf{v} f_\alpha\ d\mathbf{p}, \end{array}\right. \tag{2.11}$$

et

$$\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{|\mathbf{p}|^2}{m^2c^2}}}. \tag{2.12}$$

A la limite classique, on a $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ et on trouve l'équation :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{v}} f_\alpha = 0. \tag{2.13}$$

Le plasma magnétosphérique est un plasma peu dense et non collisionnel dans lequel on peut émettre l'hypothèse que les effets collectifs dominent les effets individuels ; les effets de corrélation entre particules sont alors négligés. Sous cette hypothèse, la dynamique du système est bien décrite par l'équation de Vlasov relativiste pour chaque espèce, couplée aux équations de Maxwell (2.10) qui décrivent les champs magnétiques $\mathbf{B}$ et électriques $\mathbf{E}$ à partir des densités de charge ρ et de courant $\mathbf{j}$ (2.11).

Dans le cadre de notre étude, le système comprend trois composantes α : deux composantes électroniques, les électrons magnétosphériques et les électrons énergétiques, et une composante ionique, les protons magnétosphériques.

I.3 Domaine de calcul

Afin de calibrer la taille du domaine pour la simulation de la dynamique des ceintures de radiation, on suppose que les interactions sur une ligne de champ sont prépondérantes sur un domaine d'étendue correspondant à 30° d'arc de latitude de part et d'autre du plan équatorial [114]. Pour la ligne de champ L, la longueur de la zone d'interaction et donc du domaine d'étude L_B est donnée par :

$$L_B = LR_E, \tag{2.14}$$

où L est le paramètre de McIlwain permettant de désigner la ligne de champ considérée. Il est défini par : $L = R_E/R_T$ où R_T est le rayon terrestre et R_E la distance entre le centre de la terre et le point d'intersection entre la ligne de champ et le plan équatorial (cf figure 2.1).

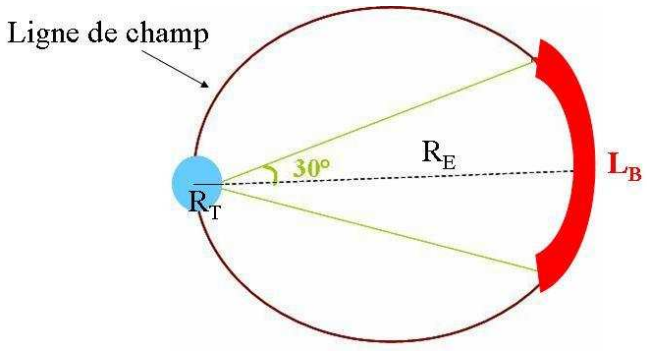


FIG. 2.1 – Définition du domaine de calcul pour l'étude de la dynamique des ceintures de Van Allen.

II Méthodes de résolution du modèle

II.1 Par l'analyse mathématique

L'analyse mathématique des équations de Vlasov-Maxwell a apporté certains résultats théoriques. Un des principaux est un résultat d'existence globale de solutions du problème de Cauchy du système tridimensionnel démontré par DiPerna-Lions [37] et redémontré plus simplement dans le cas relativiste par Rein [100]. Des résultats d'existence et d'unicité locales de solutions classiques ont été obtenus par Wollman [130] dans le cas non relativiste, par Glassey-Schaeffer [57]-[58]-[59] dans les cas relativistes à une dimension d'espace et deux dimensions de vitesse (noté $1D1/2$), à deux dimensions d'espace et de vitesse (2D) et à deux dimensions d'espace et trois dimensions de vitesse (noté $2D1/2$) et par Glassey-Strauss [60] en trois dimensions pour des données initiales régulières et à support compact. Le problème avec conditions aux limites et condition initiale a été étudié (Guo [64]). Des cas particuliers ont également été analysés : le problème stationnaire (Poupaud [98], Bostan [19]) et le problème périodique en temps (Bostan [20]).

Cependant, ces études analytiques ne permettent pas à ce jour de résoudre le système de Vlasov-Maxwell de manière générale et auto-consistante.

II.2 A partir des théories linéaires et quasi-linéaires

Les interactions de gyrorésonance entre les électrons énergétiques injectés et les ondes whistlers excitées sont bien décrites par le système d'équations couplées de Vlasov-Maxwell. Nous présentons ici deux approches analytiques pour la résolution de ce système, à partir des théories linéaire et quasi-linéaire faisant appel à des hypothèses simplificatrices. Nous donnerons les résultats que ces théories apportent à notre étude.

Théorie linéaire

La théorie linéaire est une approche basée sur la linéarisation au premier ordre des équations de Vlasov-Maxwell.

Le plasma est considéré comme homogène et infini, initialement au repos et magnétisé. Il existe donc un champ magnétique statique $\mathbf{B}_0$ (ie indépendant du temps et homogène

en espace) et chaque espèce de particules est caractérisée par sa fonction distribution initiale $f_0(\mathbf{p})$. De plus, à l'équilibre, le plasma est supposé électriquement neutre, le champ électrique y est nul et le courant électrique suffisament faible pour que le champ magnétique qu'il engendre soit négligeable devant $\mathbf{B}_0$. On s'intéresse aux faibles perturbations pouvant se développer spontanément à partir de cet état d'équilibre.

Supposons que le milieu considéré subisse une petite perturbation. Cela revient à écrire la fonction de distribution pour chaque espèce de particules α sous la forme :

$$f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_{0,\alpha}(\mathbf{p}) + f_{1,\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t), \tag{2.15}$$

et les champs électrique et magnétique :

$$\begin{array}{l} \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1(\mathbf{x}, t), \\ \mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(\mathbf{x}, t). \end{array} \tag{2.16}$$

où l'indice 0 correspond aux quantités initiales d'équilibre et l'indice 1, aux perturbations, supposées petites devant les quantités initiales.

Dans le cadre de notre étude, $\mathbf{E}_0$ est nul, $\mathbf{B}_0$ représente le champ magnétique terrestre et $(\mathbf{E}_1, \mathbf{B}_1)$ le champ d'ondes excitées.

Les équations de Vlasov-Maxwell sont ainsi linéarisées en ne prenant en compte que les perturbations au premier ordre des fonctions de distribution et des champs :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\partial f_{1,\alpha}}{\partial t} & + & \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f_{1,\alpha} + q_\alpha \left(\mathbf{E}_1 + \mathbf{v} \times \mathbf{B}_1\right).\nabla_{\mathbf{p}} f_{0,\alpha} + q_\alpha \, \mathbf{v} \times \mathbf{B}_0.\nabla_{\mathbf{p}} f_{1,\alpha} = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}_1}{\partial t} & + & \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E}_1 = 0, \\ \dfrac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial t} & - & c^2 \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}_1 = -\dfrac{\mathbf{j}_1}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}}.\mathbf{B}_1 & = & 0, \\ \nabla_{\mathbf{x}}.\mathbf{E}_1 & = & \dfrac{\rho_1}{\epsilon_0}, \end{array} \right.$$

où l'on a,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mathbf{j}_1(\mathbf{x}, t) & = & \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha \int \mathbf{v} f_{1,\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \, d\mathbf{p}, \\ \rho_1(\mathbf{x}, t) & = & \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha \int f_{1,\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \, d\mathbf{p}. \end{array} \right.$$

Pour résoudre le système linéarisé, on utilise les transformées de Fourier en espace et les transformées de Laplace en temps des perturbations. On recherche les modes propres des ondes pouvant se développer de façon spontanée dans le milieu. Les calculs conduisent à des relations de dispersion liant le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et la pulsation ω de ces modes.

L'étude linéaire du problème, permet ainsi d'obtenir les relations de dispersion relativiste ou classique des ondes whistlers en propagation parallèle au champ magnétique uniforme ou bien en propagation oblique par rapport au champ statique $\mathbf{B}_0$. Leur résolution,

qui s'appuie sur la recherche de solutions ω dans le plan complexe des vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ réels, fournit la pulsation $\mathrm{Re}(\omega)$ et le taux de croissance $\mathrm{Im}(\omega) = \gamma$ des modes excités.

Ainsi, dans [29], sont calculés analytiquement et numériquement les taux de croissance des ondes whistlers, pour deux types de distributions d'électrons énergétiques et pour un angle de propagation quelconque. A partir des calculs de Xiao *et al.* [132], E. Le Bel [80] a ajoué la contribution des ions dans la relation de dispersion.

Cette analyse permet d'apporter des résultats intéressants pour notre étude. A titre d'exemple, nous présentons les résultats de la résolution de la relation de dispersion, en formalisme relativiste, pour trois distributions d'électrons énergétiques.

La distribution globale pour les électrons est écrite sous la forme :

$$f_0(\mathbf{p}) = f_{0,c}(\mathbf{p}) + \nu f_{0,h}(\mathbf{p}), \tag{2.17}$$

où $f_{0,c}$ est la distribution des électrons magnétosphériques ambiants considérés comme froids, de densité n_c, $f_{0,h}$ la distribution des électrons énergétiques injectés, de densité n_h et ν est la rapport des densités n_h/n_c.

Les trois distributions étudiées sont : une anisotropie de température $f_{0,h}^{(1)}$, un faisceau isotrope non centré à l'origine $f_{0,h}^{(2)}$ et un double faisceau $f_{0,h}^{(3)}$,

$$\begin{aligned}
f_{0,h}^{(1)}(p_\parallel, p_\perp) &= \frac{1}{a\pi^{3/2}v_{th}^3}\ \exp\left(-\frac{p_\parallel^2}{v_{th}^2}\right)\ \exp\left(-\frac{p_\perp^2}{av_{th}^2}\right),\\
f_{0,h}^{(2)}(p_\parallel, p_\perp) &= \frac{1}{\pi^{3/2}v_{th}^3}\ \exp\left(-\frac{(p_\parallel - p_d)^2}{v_{th}^2}\right)\ \exp\left(-\frac{p_\perp^2}{v_{th}^2}\right),\\
f_{0,h}^{(3)}(p_\parallel, p_\perp) &= \frac{1}{\pi^{3/2}v_{th}^3}\ \frac{1}{2}\left(\exp\left(-\frac{(p_\parallel - p_d)^2}{v_{th}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(p_\parallel + p_d)^2}{v_{th}^2}\right)\right)\exp\left(-\frac{p_\perp^2}{v_{th}^2}\right),
\end{aligned} \tag{2.18}$$

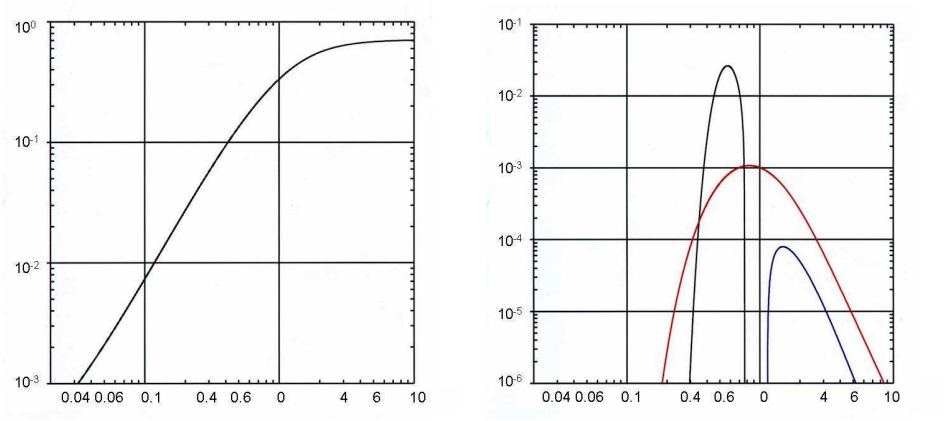
où p_d est une impulsion de dérive, v_{th} une vitesse thermique et a un facteur d'anisotropie.

Ces fonctions de distribution, qui présentent un écart par rapport à la distribution d'équilibre, la distribution de Maxwell-Jüttner en formalisme relativiste, conduisent à l'excitation d'ondes de mode whistler.

Pour les paramètres équatoriaux du plasma ambiant de l'orbite géostationnaire, la relation de dispersion des modes électromagnétiques a été résolue dans la limite des faibles taux de croissance et en supposant $\nu << 1$.

Sous ces hypothèses, la pulsation des ondes dépend uniquement de la distribution des électrons ambiants $f_{0,c}$ et est représentée en fonction du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ sur la figure 2.2-*a*. Inversement, le taux de croissance des ondes électromagnétiques, donné sur la figure 2.2-*b* en fonction de $\mathbf{k}$, dépend fortement de la nature de la distribution des électrons énergétiques $f_{0,h}$. On constate effectivement que les valeurs maximales du taux de croissance ont des ordres de grandeur très différents pour les trois distributions : de l'ordre de 3.10^{-2} pour $f_{0,h}^{(1)}$, 10^{-3} pour $f_{0,h}^{(2)}$ et 8.10^{-5} pour $f_{0,h}^{(3)}$.

L'analyse linéaire permet ainsi de déterminer les caratéristiques des ondes excitées ainsi que leur temps de croissance dans le cas de différents types d'instabilités de plasmas magnétisés. Elle admet cependant un domaine de validité qui limite son champ d'application. En particulier, l'analyse linéaire est valide tant que les quantités perturbées



a *b*

FIG. 2.2 – *Solutions de la relation de dispersion sur l'orbite géostationnaire : pulsation (figure a) et taux de croissance en échelle logarithmique (figure b) des ondes électromagnétiques en fonction du mode k, pour les faisceaux injectés* $f_{0,h}^{(1)}$ *(courbe noire),* $f_{0,h}^{(2)}$ *(courbe rouge) et* $f_{0,h}^{(3)}$ *(courbe bleue), avec* $\nu = 5.10^{-2}$.

restent faibles devant les quantités d'équilibre, ce qui est vérifié en pratique sur des temps inférieurs à quelques fois le temps

$$t = \frac{1}{\gamma}, \tag{2.19}$$

où γ est le taux de croissance des ondes. Au delà, il devient nécessaire de considérer la réaction des ondes sur les distributions de particules, ce qui nous amène à considérer une théorie plus complète : la théorie quasi-linéaire.

Théorie quasi-linéaire

Dans le modèle quasi-linéaire [105], pour un plasma écarté de son état d'équilibre, on écrit les quantités perturbées sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) & = & f_0(\mathbf{p},t) + \sum_{k\neq 0} f_k(\mathbf{p},t) e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}}, \\ \mathbf{E}(\mathbf{x},t) & = & \mathbf{E}_0 + \sum_k \bar{\mathbf{E}}_k(t) e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{x},t) & = & \mathbf{B}_0 + \sum_k \bar{\mathbf{B}}_k(t) e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{x}}, \end{array} \right. \tag{2.20}$$

où $\mathbf{E}_0$ et $\mathbf{B}_0$ sont les champs statiques et $\mathbf{E}_0 = 0$.

En reportant les expressions dans l'équation de Vlasov, on obtient une équation pour chaque composante $f_k(\mathbf{p},t)$ où apparaît un terme de couplage de modes. Dans l'hypothèse d'ondes en propagation parallèle ($\mathbf{k} \parallel \mathbf{B}_0$), ce terme de couplage est nul pour $\mathbf{k} \neq 0$, ce qui permet de calculer les f_k correspondants. Les calculs conduisent alors

à l'équation de diffusion quasi-linéaire,

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{\pi e^2}{4} \sum_k (A_k + C_k)|E_k|^2 \delta \left(k v_\parallel + \frac{\omega_{ce}}{\Gamma} - \omega_k \right) A_k f_0, \tag{2.21}$$

où A_k et C_k sont des opérateurs différentiels en impulsion, ω_k est la pulsation du mode de nombre d'onde k, Γ le facteur de Lorentz, ω_{ce} la pulsation cyclotronique associée à $\mathbf{B}_0$ et $v_\parallel$ la composante de la vitesse parallèle à $\mathbf{B}_0$.

Sous l'hypothèse $\omega_k << \omega_{ce}$, cette équation se réduit à l'équation relativiste en angle d'attaque θ,

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{q^2}{m^2} \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\sin\theta}{|v_r - v_g|} \frac{v_g |B_f|^2}{\Gamma^2} \frac{\partial f_0}{\partial \theta} \right), \tag{2.22}$$

où $|B_f|^2$ est la densité spectrale d'énergie magnétique des ondes, v_g la vitesse de groupe des ondes et v_r la vitesse de résonance.

En considérant la valeur moyenne de la densité spectrale d'énergie des ondes,

$$< {B_f}^2 > = \frac{1}{L_B} \int_0^{L_B} |B_f|^2 dx, \tag{2.23}$$

et sous l'hypothèse d'un état stationnaire, la dynamique des électrons en interaction avec un spectre d'ondes whistlers sur une ligne de champ L peut être décrite par l'équation de diffusion en angle d'attaque relativiste moyennée sur une longueur d'interaction L_B couplée à l'équation d'évolution de la densité spectrale d'énergie magnétique :

$$\begin{cases} \dfrac{q}{2m^2} \dfrac{1}{\sin\theta} \dfrac{\partial}{\partial \theta} \left(\dfrac{\sin\theta}{|v_r - v_g|} \dfrac{v_g < {B_f}^2 >}{\Gamma^2} \dfrac{\partial f_0}{\partial \theta} \right) + S(\theta, \mathbf{p}) - P(\theta, \mathbf{p}) = 0, \\ \dfrac{1}{L_B} \displaystyle\int_0^{L_B} v_g \frac{\partial |B_f|^2}{\partial x} dx \; = \; 2\gamma_k < {B_f}^2 >, \end{cases} \tag{2.24}$$

où $S(\theta, \mathbf{p})$ est une source de particules qui compense continuement les pertes de particules $P(\theta, \mathbf{p})$ par diffusion dans le cône de perte et où γ_k est le taux de croissance linéaire des ondes. Ce système traduit ainsi l'équilibre entre le terme source et le terme de perte qui s'effectue par interaction résonante.

La résolution du système (2.24) permet d'obtenir des expressions de la densité spectrale d'énergie des ondes $< {B_f}^2 >$, de la distribution des électrons énergétiques piégés dans l'état stationnaire et le temps de vie des électrons sur la ligne de champ L, et de déterminer ainsi le flux d'électrons piégés de manière stable.

L'étude de ce modèle a permis l'interprétation de phénomènes physiques. C'est avec une version simplifiée, non relativiste que Kennel et Petschek ont mis en évidence l'existence d'un flux limite d'électrons piégés, ce flux étant indépendant de la source d'électrons injectés [77]. La résolution du problème complet dans le cas d'injections d'électrons relativistes a montré la dépendance entre le flux limite et l'intensité de source, les valeurs de flux obtenues pouvant dépasser la limite de Kennel et Petschek dans le cas de fortes injections (cf [28] et [80]).

Cette théorie n'est cependant valide que sous certaines hypothèses et les résultats ne sont donc utilisables que si les deux hypothèses suivantes sont vérifiées :

– Le temps caractéristique d'évolution de la fonction de distribution τ_f est grand devant le temps de cohérence entre les ondes whistlers et les électrons énergétiques $\Delta\tau$,

$$\tau_f >> \Delta\tau. \tag{2.25}$$

– Le temps caractéristique de piégeage des électrons résonants τ_T est grand devant le temps de cohérence $\Delta\tau$,

$$\tau_T >> \Delta\tau. \tag{2.26}$$

Pour être vérifiées, ces deux conditions exigent que le spectre des ondes excitées soit suffisament large et que leurs amplitudes restent modérées. Pour de très fortes injections d'électrons énergétiques, il se peut que les deux conditions ne soient pas vérifiées, il est alors nécessaire de faire appel à une approche totalement non-linéaire.

II.3 Par une méthode de résolution numérique

Pour décrire de façon totalement autoconsistante les interactions de gyrorésonance entre les électrons énergétiques et les ondes whistlers dans le milieu magnétosphérique, il est nécessaire de résoudre le système complet de Vlasov-Maxwell. Seul l'outil numérique permet à ce jour une telle résolution.

La partie suivante est consacrée au choix d'une méthode de résolution numérique adaptée à l'étude.

III Choix d'une méthode numérique

Le modèle à résoudre numériquement pour l'étude de la simulation de la dynamique des ceintures de Van Allen, le système de Vlasov-Maxwell, possède un grand nombre de propriétés et de caractéristiques. Ces propriétés et leurs équivalents discrets conditionnent le choix d'une méthode de résolution numérique fiable. Après les avoir énoncé, nous verrons quelles sont les différentes méthodes, existant à ce jour pour la résolution de l'équation de Vlasov couplée aux équations de Maxwell ou à l'équation de Poisson dans le cas d'un plasma sans champ magnétique.

III.1 Propriétés du modèle

Couplage non linéaire

L'équation de Vlasov est couplée aux équations de Maxwell par la force de Lorentz,

$$\mathbf{F} = q\,(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

et les équations de Maxwell sont couplées aux distributions de particules chargées, solutions de l'équation de Vlasov, par les termes sources, qui sont la densité de charge et la densité de courant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \rho(x) & = & \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} f_\alpha d\mathbf{p}, \\ \mathbf{j}(x) & = & \displaystyle\sum_\alpha q_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{v} f_\alpha d\mathbf{p}. \end{array} \right. \tag{2.27}$$

Le couplage des équations de Vlasov-Maxwell est donc très fortement non linéaire.

Conservation de la charge

Une condition de compatibilité est nécessaire pour résoudre les équations de Maxwell, c'est la conservation de la charge, dont l'équation est la suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0. \tag{2.28}$$

Cette équation est une conséquence directe de l'équation de Vlasov. En effet, en remarquant que l'on a $\nabla_{\mathbf{x}}.\mathbf{v} = 0$ et $\nabla_{\mathbf{p}}.(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = 0$, on peut réécrire l'équation de Vlasov sous forme conservative :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}.(\mathbf{v}f) + q\nabla_{\mathbf{p}}.((\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})f) = 0. \tag{2.29}$$

En intégrant (2.29) par rapport à $\mathbf{p}$ puis en multipliant par la charge q, on obtient l'équation (2.28).

Si l'équation de conservation de la charge n'est pas vérifiée au niveau discret, la résolution numérique des équations de Maxwell peut mener à des solutions non physiques [8].

Conservation de quantités physiques et mathématiques

L'équation de Vlasov conserve les quantités physiques suivantes : la densité totale n, le moment total P et l'énergie totale $\mathcal{E}$ exprimés par les premiers moments de la fonction de distribution f,

$$\begin{aligned} n(t) &= \sum_{\alpha} \int_{\Omega \times \mathbb{R}^3} f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)\ d\mathbf{x}\, d\mathbf{p}, \quad t > 0, \\ \mathbf{P}(t) &= \sum_{\alpha} \int_{\Omega \times \mathbb{R}^3} \mathbf{v}\, f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)\ d\mathbf{x}\, d\mathbf{p}, \quad t > 0, \\ \mathcal{E}(t) &= \sum_{\alpha} m_\alpha c^2 \int_{\Omega \times \mathbb{R}^3} (\gamma - 1)\ f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)|\mathbf{v}|^2\ d\mathbf{x}d\mathbf{p} \\ &\quad + \epsilon_0 \int_{\Omega} \frac{|\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)|^2 + c^2|\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)|^2}{2} d\mathbf{x}, \qquad t > 0, \end{aligned} \tag{2.30}$$

ainsi que l'entropie cinétique

$$\mathcal{H}(t) = \sum_{\alpha} \int_{\Omega \times \mathbb{R}^3} f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \ln(f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t))\ d\mathbf{x}d\mathbf{p}, \qquad t > 0, \tag{2.31}$$

Elle conserve aussi des quantités mathématiques telles que les normes L^p, pour $1 \leq p \leq \infty$,

$$||f_\alpha||_{p,\Omega \times \mathbb{R}^3}(t) = \left(\int_{\Omega \times \mathbb{R}^3} |f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)|^p d\mathbf{x}\ d\mathbf{p} \right)^{1/p}, \quad t > 0. \tag{2.32}$$

Il est très important que les schémas numériques mis en œuvre conservent ces mêmes quantités au niveau discret pour obtenir des solutions à la fois stables et précises.

Positivité

Si la condition initiale $f_0(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ est positive, les solutions de l'équation de Vlasov $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ sont positives pour tout temps $t > 0$. La méthode de discrétisation de Vlasov doit donc respecter la positivité des solutions, d'autant plus que des distributions de particules non positives sont nécessairement des solutions non physiques.

Filamentation

Les solutions de l'équation de Vlasov ont pour caractéristique de développer au cours du temps de très fines structures dans l'espace des phases. Cette propriété de non dissipation de la solution est bien connue sous le nom de *filamentation* (cf Grant-Feix [62], Cheng-Knorr [27], Figura *et al.* [48]).

D'après Manfredi [84], ces structures à petites échelles sont créées par la nature de la dynamique des électrons dans l'espace des phases, qui est essentiellement dominée par la partie balistique de l'équation.

En effet, considérons en dimension un l'équation qui correspond à la partie balistique de l'équation de Vlasov :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha = 0, \tag{2.33}$$

avec la condition initiale,

$$f(x, v, t = 0) \equiv f_0(x, v) = (1 + a\cos(kx))e^{-\frac{v^2}{2}}, \tag{2.34}$$

avec a et k deux réels donnés.

La solution du problème (2.33)-(2.34), donnée par :

$$f(x, v, t) = f_0(x - vt, v) = (1 + a\cos(kx - kvt))e^{-\frac{v^2}{2}}, \tag{2.35}$$

a pour caractéristique de devenir au cours du temps de plus en plus structurée dans l'espace des vitesses.

Le choix d'une discrétisation en vitesse adaptée est alors indispensable. Capturer ces fines structures représente un véritable challenge pour la méthode numérique et tout particulièrement sur des temps longs. Cette propriété des solutions de l'équation de Vlasov conduit donc nécessairement à choisir des méthodes de résolution en vitesse très précise.

Complexité algorithmique d'une méthode numérique

La résolution numérique de l'équation de Vlasov est un problème de grande taille. En effet on peut être amené à considérer six dimensions de l'espace des phases : trois dimensions de l'espace réel et trois dimensions de l'espace des vitesses. Ainsi, un schéma eulérien de différences finies usuel conduit à un problème à $(100)^3.(100)^3 = 10^{12}$ degrés de liberté par pas de temps si on prend une estimation raisonnable de cent mailles par direction. Le calcul ainsi que le stockage en mémoire, à chaque pas de temps, d'un tel nombre d'inconnues n'est pas réalisable à l'heure actuelle.

La grande complexité algorithmique du problème nécessite aussi bien de larges ressources informatiques qu'un choix optimal d'algorithmes de résolution, à la fois peu couteux, précis et parallélisables.

Au cours des trente dernières années, différentes méthodes numériques ont été développées pour résoudre l'équation de Vlasov. Ces méthodes se divisent en deux principales branches. La première est composée de méthodes particulaires bien connues : les méthodes PIC (*Particle In Cell*). Ces méthodes résolvent l'équation de Vlasov en considérant des macro-particules et en calculant leurs trajectoires dans l'espace des phases. Les méthodes dites "Vlasov", qui intègrent directement l'équation de Vlasov, constituent la deuxième branche.

III.2 Les méthodes PIC

L'approche PIC est aujourd'hui un outil très employé pour simuler le comportement des particules constituant des plasmas de laboratoire ou plasmas spatiaux, peu collisionnels.

Le principe de ces méthodes est d'approcher les distributions f_α de chaque population du plasma par un ensemble fini de macro-particules numériques,

$$f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t) \approx f_{\alpha,N}(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = \sum_{k=1}^{N} \omega_k \ \delta(\mathbf{x}-\mathbf{X}_k(t)) \ \delta(\mathbf{p}-\mathbf{P}_k(t)), \tag{2.36}$$

où N est le nombre de macro-particules, ω_k des poids qu'il faut définir à l'initialisation et $(\mathbf{X}_k, \mathbf{P}_k)$ la position de la k$^{\text{ième}}$ macro-particule dans l'espace des phases(cf Birdsall-Langdon [16], et Hockney-Eastwood [69]).

La notion de fonction de distribution est remplacée par une notion de volume de plasma limité à une sphère de rayon égal à la longueur de Debye,

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 K_B T_e}{q_e^2 n_e}}, \tag{2.37}$$

où K_B est la constante de Bolzmann, T_e la température des électrons du plasma, q_e leur charge et n_e leur densité.

Le modèle se réécrit en remplaçant une équation aux dérivées partielles, l'équation de Vlasov, par un système d'équations aux dérivées ordinaires : les équations du mouvement des macro-particules,

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{X}_k}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{P}_k), & \mathbf{X}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p}) = \mathbf{x}, \\ \dfrac{d\mathbf{P}_k}{dt} = q\left(\mathbf{E} + \dfrac{\mathbf{P}_k}{m\gamma(\mathbf{P}_k)} \times \mathbf{B}\right), & \mathbf{P}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p}) = \mathbf{p}, \end{cases} \tag{2.38}$$

où les fonctions $\mathbf{X}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p})$ et $\mathbf{P}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p})$, solutions du système, sont appelées *caractéristiques* de l'équation de Vlasov. Elles sont interprétées comme étant les trajectoires dans l'espace des phases de macro-particules de masse m et de charge q en mouvement dans le champ $(\mathbf{E},\mathbf{B})$.

La fonction de distribution f est conservée le long des caractéristiques $(\mathbf{X}_k(t), \mathbf{P}_k(t))$:

$$\frac{d}{dt} f\left(\mathbf{X}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p}), \mathbf{P}_k(t;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p}), t\right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{X}_k}{dt}.\nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{d\mathbf{P}_k}{dt}.\nabla_{\mathbf{p}} f = 0.$$

Les solutions de l'équation de Vlasov sont obtenues en poussant les macro-particules de l'espace des phases le long des caractéristiques. La macro-particule k se trouvant à l'instant τ au point $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ de l'espace des phases se retrouve ainsi au point $(\mathbf{X}_k, \mathbf{P}_k)$ à l'instant t,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{X}(0;\tau,\mathbf{x},\mathbf{p}), \mathbf{P}(0;t,\mathbf{x},\mathbf{p})), \tag{2.39}$$

où f_0 est la fonction de distribution à l'instant initial.

Cette approche a de nombreux avantages : elle permet de réaliser des études à une, deux voire trois dimensions de l'espace physique sans demande importante de capacité mémoire des machines et apporte des résultats satisfaisants (Birdsall-Langdon [16]). De plus, l'application de cette approche au problème relativiste, ne pose pas de difficultés supplémentaires (Omura-Summers [91]).

Cependant l'inconvénient de ces méthodes particulaires est leur faible précision car elles sont intrinsèquement bruitées. Pour certaines simulations, en particulier dans le cas d'instabilités à faibles taux de croissance, le bruit numérique peut rendre complètement inexploitables les résultats (Sydora [119]). Il est alors nécessaire d'augmenter très fortement le nombre de macro-particules, le bruit ayant une décroissance seulement en $1/\sqrt{N}$ quand le nombre de particules numériques N augmente [16]. De tels calculs ne sont pas toujours réalisables compte tenu de la puissance des calculateurs actuels.

Des recherches sont aujourd'hui menées pour réduire le bruit. Une méthode, appelée $\delta f - PIC$, consiste par exemple à décomposer la fonction de distribution telle que :

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = f^0(\mathbf{x}, \mathbf{p}) + \delta f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t),$$

où f^0 est une partie fixe représentant l'état d'équilibre du système et δf correspond aux fluctuations physiques de la fonction de distribution par rapport à cet équilibre ([36],[38]...). Cette perturbation δf est approchée par des macro-particules. Cette méthode est très efficace si la distribution reste proche de son état d'équilibre ($\delta f << f^0$).

III.3 Les méthodes "Vlasov"

La résolution directe de l'équation de Vlasov par les méthodes appelées *méthodes Vlasov*, permet d'éviter le bruit stochastique intrinsèque généré par les codes PIC.

La résolution numérique complexe et l'apparition de structures fines dans les solutions telles que la filamentation dans l'espace des phases, difficile à capturer, a fortement restreint l'usage des méthodes directes à des études essentiellement monodimensionnelles réduites au cas électrostatique. Cependant la puissance des calculateurs actuels, la parallélisation des codes et la mise en œuvre de méthodes d'intégration précises et peu coûteuses permettent aujourd'hui d'envisager l'utilisation de méthodes déterministes dans un espace des phases de dimension quatre et cinq, voire prochainement six (cf par exemple [43]-[15]-[86]-[112]).

Les méthodes Vlasov utilisent très souvent une méthode à pas fractionnaire en temps pour découper l'équation de Vlasov en deux équations d'advection. Cette méthode, appelée *time-splitting*, a été introduite par Cheng et Knorr [27].

Méthode de splitting en temps

Le principe de cette méthode repose sur le fait que l'on peut séparer un champ d'advection en deux si celui-ci est à divergence nulle. En notant

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mathbf{U} & = & (v, E(x,t)), \\ \mathbf{X} & = & (x, v), \end{array} \right.$$

l'équation de Vlasov 1Dx-1Dv sans champ magnétique,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{U}(\mathbf{X}, t).\nabla_{\mathbf{X}} f = 0, \tag{2.40}$$

peut s'écrire sous la forme conservative,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{X}}.(\mathbf{U}f) = 0, \tag{2.41}$$

car le champ d'advection $\mathbf{U}$ est à divergence nulle. En écrivant le champ d'advection sous la forme,

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}, t) = \left(\begin{array}{c} u_1(x_1, x_2, t) \\ u_2(x_1, x_2, t) \end{array} \right),$$

l'équation (2.41) se réécrit

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \partial_{x_1}(u_1 f) + \partial_{x_2}(u_2 f) = 0. \tag{2.42}$$

La semi-discrétisation en temps du problème (2.42), par une méthode à pas fractionnaires à l'ordre un, consiste à intégrer successivement les équations d'advection suivantes sur un pas de temps Δt,

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f + \partial_{x_1}(u_1 f) = 0, \\ \partial_t f + \partial_{x_2}(u_2 f) = 0. \end{array} \right. \tag{2.43}$$

Huot *et al.* [73] montrent que les conditions suivantes,

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{x_1} u_1(x_1, x_2, t) = 0, \\ \partial_{x_2} u_2(x_1, x_2, t) = 0, \end{array} \right. \tag{2.44}$$

sont nécessaires pour réécrire le système (2.43) tel que,

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t f + u_1 \partial_{x_1} f = 0, \\ \partial_t f + u_2 \partial_{x_2} f = 0. \end{array} \right. \tag{2.45}$$

Les conditions (2.44) sont vérifiées pour l'équation de Vlasov non relativiste qu'elle soit couplée aux équations de Poisson ou à celles de Maxwell [73].

En symétrisant les étapes d'une méthode à pas fractionnaire, on peut obtenir une précision d'ordre deux pour des solutions régulières. Le splitting d'ordre deux en temps (Strang [118]), permet de préserver les propriétés conservatives de l'équation de Vlasov si les champs d'advection sont à divergence nulle [73].

S'appuyant sur les idées de Strang, l'algorithme de *time-splitting* d'ordre deux proposé par Cheng et Knorr [27] s'écrit alors, à partir de la distribution initiale f^0,

$$f(\Delta t) \approx T_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right) T_v(\Delta t)\, T_x\left(\frac{\Delta t}{2}\right) f^0, \tag{2.46}$$

où l'on a noté T_x et T_v les opérateurs d'advection dans les directions x et v. Cela revient ainsi, entre les instants t^n et t^{n+1}, à avancer la solution dans la direction x sur un demi pas de temps, puis dans la direction v sur un pas de temps entier et à nouveau dans la direction x sur un demi pas de temps :

$$\begin{aligned} f^*(x,v) &= f^n(x - v\,\Delta t/2, v), \\ f^{**}(x,v) &= f^*(x, v + E(x)\Delta t), \\ f^{n+1}(x,v) &= f^{**}(x - v\,\Delta t/2, v), \end{aligned} \tag{2.47}$$

où l'on a noté f^n la solution à l'instant t^n. Il est important de remarquer ici que les instants t^* et t^{**} ne sont pas des instants réels.

Codes Vlasov sur une grille eulérienne de l'espace des phases

On peut classer les méthodes de résolution eulérienne de l'équation de Vlasov en différentes catégories : les méthodes qui calculent la fonction de distribution directement aux points de la grille eulérienne, les méthodes semi-lagrangiennes et les méthodes de résolution sur des grilles adaptatives ou mobiles.
La méthode à pas fractionnaires de Cheng et Knorr s'étant révélée très efficace, beaucoup de méthodes ont été choisies pour discrétiser les équations d'advection obtenues après splitting. On peut trouver des comparaisons de ces méthodes dans [2], [52] et [99].

Méthodes de résolution aux points de la grille. La méthode des éléments finis, a été employée par Ezzuddin [46] et Zaki *et al.* [137]. Elle nécessite la résolution d'un système linéaire global à chaque pas de temps. Elle semble donc inutilisable dès que l'on considère des dimensions de l'espace des phases plus grandes que trois.

Des méthodes à flux conservatifs explicites de type volumes finis ont aussi été proposées. Reprenant les idées des résolutions numériques des problèmes de dynamique des fluides, deux types de schémas conservatifs de type volumes finis ont été conçus : la méthode FCT (Flux Corrected Transport) de Boris et Book [17] et la méthode récemment proposée par Elkina et Büchner [45]. Ces méthodes sont de haute résolution et permettent d'éviter la génération d'oscillations créées par les forts gradients. La méthode Elkina et Büchner [45] s'appuie sur un schéma "upwind" d'ordre deux, auquel sont appliqués des limiteurs de flux d'ordre deux, afin de réduire les oscillations parasites sources d'instabilités numériques. Cette méthode doit pouvoir se généraliser en dimensions supérieures, ce qui n'est pas le cas de la méthode FCT. La méthode des volumes

finis est robuste mais elle est dissipative et conditionnellement stable. Le pas de temps est limité par la condition CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). Une manière de s'affranchir de cette condition est d'utiliser la méthode à pas fractionnaires en temps de Cheng et Knorr [27]. Ainsi, la méthode FBM (Flux Balance Method) de Fijalkow [49]-[50] résout les équations d'advection résultant du splitting d'opérateur. Cette méthode calcule la moyenne de la solution par un schéma conservatif de type volumes finis sur chaque cellule de la grille discrétisant l'espace des phases. Mais elle a pour inconvénient de ne pas préserver la positivité de la fonction de distribution. Une approche similaire, introduite par Valentini *et al.* [124], couple le schéma de splitting avec un schéma de différence finies "upwind". Ce schéma a la particularité d'utiliser une géométrie cylindrique de l'espace des phases qui simplifie beaucoup les calculs pour des simulations de la dynamique de particules en mouvement dans un plan perpendiculaire à un champ magnétique uniforme. De plus le schéma est précis à l'ordre deux en espace et en temps. Filbet *et al.* [51] proposent la méthode PFC (Positive and Flux Conservative method). Dans cette méthode, une reconstruction géométrique d'ordre trois est utilisée et la positivité est préservée. Cette méthode a été généralisée en dimensions supérieures par Schmitz et Grauer [106]. Shoucri *et al.* [111] montrent que dans les cas où l'on sait intégrer analytiquement les équations le long des caractéristiques, on peut intégrer précisément l'équation de Vlasov en utilisant un produit tensoriel bi-dimensionnel de B-splines. Dans ce cas, le procédé itératif de la méthode semi-lagrangienne, de déplacement le long des caractéristiques, est inutile ; les calculs sont alors beaucoup plus rapides.

Les méthodes eulériennes, calculant les valeurs de la fonction de distribution directement aux points de la grille de l'espace des phases, ont l'avantage d'être non bruitées et peuvent être construites de manière à préserver la positivité et respecter le principe du maximum. Cependant elles possèdent d'autres artéfacts numériques qui affectent leur fiabilité : la dissipation ou la diffusion numérique. Elles donnent malgré cela des représentations précises de l'espace des phases, mais les besoins en capacité mémoire sont trop contraignants en dimensions trois, compte tenu de la capacité des ordinateurs actuels.

Méthodes semi-lagrangiennes. Les méthodes semi-lagrangiennes réunissent à la fois les avantages des schémas d'advection eulériens et lagrangiens. Elles utilisent un maillage cartésien régulier et des advections lagrangiennes. A chaque pas de temps, les équations des caractéristiques sont intégrées dans le passé et l'origine des caractéristiques est approchée par une méthode d'interpolation d'ordre élevé. Couplée à la méthode à pas fractionnaire en temps présentée plus haut, la méthode semi-lagrangienne permet un calcul exact des caractéristiques. Cheng et Knorr [27] sont les premiers à utiliser ces schémas semi-lagrangiens particuliers pour résoudre l'équation de Vlasov. L'interpolation linéaire étant trop diffusive [110], une méthode d'interpolation par splines cubiques est utilisée. Sonnendrücker *et al.* [115] généralisent la méthode semi-lagrangienne. Elle a été étendue à des maillages non structurés par Besse et Sonnendrücker [11]-[13]. Les résultats obtenus sont satisfaisants, mais la reconstruction a l'inconvénient de ne pas être locale. Cette méthode ne semble donc pas pouvoir être parallélisée de manière efficace. Nakamura et Yabe [89] utilisent une interpolation de type Hermite. Dans cette méthode, les gradients de la fonction de distribution $\nabla_x f$ et $\nabla_v f$ sont également transportés le

long des caractéristiques, ce qui nécessite un stockage important en mémoire. Besse [14] a montré qu'avec une interpolation de Lagrange d'ordre élevé, la méthode est instable. Mangeney *et al.* [84] proposent et comparent différents schémas de reconstruction des solutions advectées le long des caractéristiques : des schémas de Van Leer d'ordre deux et trois, et un schéma d'interpolation par splines d'ordre trois. Ce dernier schéma s'avère le plus performant.

Utilisant une forme analytique de la solution, les méthodes semi-lagrangiennes ont l'avantage d'être à la fois précises et robustes. Cependant, elles nécessitent la mise en œuvre d'interpolations d'ordre élevé qui sont coûteuses, en particulier pour des problèmes de dimensions supérieures à un. De plus, les méthodes semi-lagrangiennes ne conservent pas naturellement le nombre de particules, mais elles peuvent être mise en œuvre de manière à préserver la positivité.

D'autres méthodes ont été proposées dans le but d'améliorer l'efficacité des codes Vlasov pour la simulation de faisceaux de particules évoluant très vite dans l'espace des phases. L'idée est d'éviter les calculs inutiles dans les régions de l'espace des phases où les phénomènes n'ont pas lieu. Pour ce faire, les grilles de résolution de l'espace des phases sont particulières : elles peuvent être adaptatives ou bien mobiles .

Méthodes sur des grilles adaptatives ou mobiles. Gutnic *et al.* [66] proposent une méthode de résolution semi-lagrangienne sur une grille adaptative de l'espace des phases. L'espace des phases est raffiné ou bien déraffiné au cours du temps. La fonction de distribution est développée sur une base d'ondelettes : à la fonction approchant la fonction de distribution à une échelle grossière, est ajoutée une somme de détails correspondant à chaque échelle intermédiaire. Les petits cœfficients de ce développement sont supprimés. Cela permet d'éliminer les points de la grille associés à ces cœfficients. La méthode permet d'éviter de calculer la fonction de distribution dans les régions où il n'y a pas de particules et de réduire ainsi la complexité algorithmique des codes de calcul. De plus la méthode peut être parallélisée de manière très efficace (cf Mehrenberger *et al.* [88]). Une variante de cette méthode, permettant la conservation des moments, a été mise en œuvre [67].

Sonnendrücker *et al.* [116] proposent une méthode de résolution sur des grilles de l'espace des phases qui bougent au cours du temps de façon à suivre l'évolution de l'enveloppe d'un faisceau. Le maillage évolue de telle manière qu'il contient toujours le faisceau entier de particules, mais aussi tel que le nombre de points de la grille, où la fonction de distribution est très petite, reste petit. La transformation de la grille couple les composantes en espace et en vitesse et la méthode à pas fractionnaires habituellement utilisée [27] ne peut plus être appliquée. Un schéma prédicteur-correcteur d'ordre deux est alors utilisé pour calculer l'origine des caractéristiques.

Toutes ces méthodes eulériennes produisent des lissages numériques, ce qui permet de diminuer les effets singuliers de l'augmentation de la dérivée de la vitesse avec le temps, qui constitue le problème fondamental de la simulation des plasmas peu collisionnels. Cependant, elles introduisent une dissipation artificielle qui n'est plus fidèle à la physique. En général, la conservation des particules, du moment et de l'énergie est seulement approximative. Il vient alors un autre type de méthodes, les méthodes

spectrales, qui tendent à générer des schémas conservatifs et non dispersifs.

Méthodes spectrales.

Le principe des méthodes spectrales est de discrétiser l'espace des vitesses en développant la fonction de distribution sur une base de polynômes multipliés par une gaussienne (méthode de Galerkin) ou bien d'approcher la fonction de distribution par une fonction d'interpolation (méthode de collocation). L'espace physique est généralement discrétisé par une transformation de Fourier, ou par une méthode eulérienne d'éléments finis ou de volumes finis.

Les méthodes spectrales sont connues pour assurer un ordre élevé de précision avec seulement un petit nombre de degrés de liberté. De plus elles permettent la résolution de problèmes sur des domaines non bornés de façon naturelle ; les autres méthodes nécessitant la restriction à des domaines finis avec des frontières artificielles.

Ces méthodes ont été appliquées à l'équation de Vlasov à partir des années 70, et elles se sont avérées instables [4]-[5]. Cependant les récents travaux de Schumer et Holloway [70]-[107] ont apporté des résultats très prometteurs, en particulier lorsque la fonction de distribution a un profil Maxwellien en vitesse. L'idée est d'introduire un facteur d'échelle en vitesse, ce qui permet aux fonctions de base de s'adapter aux échelles intéressantes des fonctions de distribution. Ces méthodes seront présentées plus en détail au chapitre 3.

III.4 Choix d'une méthode de résolution des équations de Vlasov-Maxwell dans le cadre de la simulation des ceintures de Van Allen

L'équation de Vlasov est difficile à simuler numériquement et en particulier si l'on exige des schémas numériques qu'ils possèdent toutes les caractéristiques énoncées au paragraphe III.1. Un schéma numérique ne peut vérifier tous ces critères de façon exacte.

Afin de déterminer une méthode numérique adaptée à l'étude, nous donnons à partir des propriétés énoncées, les critères essentiels que doivent vérifier la méthode :

-*Réduction de la taille du système.* Il est indispensable que la méthode choisie permette de réduire le nombre de degrés de liberté du système.

-*Précision de la discrétisation en vitesse.* Le phénomène de filamentation nécessite une méthode de discrétisation en vitesse très précise. De plus, la discrétisation en vitesse conditionne la précision de la description du mouvement de Larmor des particules (cf la remarque III.1).

-*Conservation des quantités physiques.*

A cela, on ajoute que la méthode numérique doit particulièrement bien approcher les maxwelliennes, les distributions initiales étant généralement des faisceaux maxwelliens de particules.

Remarque III.1 *Si l'on compare les temps caractéristiques de giration et de rebond d'un électron énergétique de l'ordre d'un MeV, on observe qu'un rebond correspond à peu près à 10 milles périodes cyclotroniques. Il apparaît donc nécessaire d'intégrer l'opérateur* $q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}}$ *de façon très précise. De plus, l'angle de cône de perte*

dépend du rapport des vitesses orthogonales et parallèles. Une mauvaise description du mouvement de Larmor conduirait donc à des erreurs dans la dépopulation des ceintures en électrons énergétiques.

Afin de résoudre numériquement le système couplé des équations de Vlasov-Maxwell, dans le cadre de la simulation de la dynamique des ceintures radiatives, nous nous sommes orientés vers des méthodes d'intégration directes, intrinsèquement non bruitées, et tout particulièrement vers des méthodes spectrales pour la discrétisation en impulsion. Ces méthodes d'ordre élevé, peu coûteuses et conservatives, peuvent être très précises si l'on considère des fonctions de base dépendant d'un facteur d'échelle [70].

Deuxième partie

Méthodes spectrale et pseudo-spectrales pour la résolution numérique du système de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv

Chapitre 3

Présentation des méthodes

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la résolution des équations monodimensionnelles, en espace et en vitesse, de Vlasov-Poisson

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} f(x,v,t) + v \dfrac{\partial}{\partial x} f(x,v,t) + E(x,t) \dfrac{\partial}{\partial v} f(x,v,t) = 0, \\ E(x,t) = -\dfrac{\partial}{\partial x} \phi(x,t), \\ -\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x,v,t)\, dv - 1, \end{cases} \tag{3.1}$$

par des méthodes spectrales. Ces méthodes furent les premières méthodes numériques introduites pour la résolution des équations (3.1), dans les années 1960. Armstrong [4]-[5] ou encore Joyce *et al* [76] proposent de développer les fonctions de distribution sur un ensemble fini de polynômes orthogonaux.

Cependant, les méthodes s'avèrent instables et en particulier, la norme L^2 de la fonction de distribution n'est pas conservée. La popularité des méthodes spectrales a alors décliné au profit de méthodes particulaires stochastiques, les méthodes PIC et de méthodes eulériennes.

Mais de récents travaux de Schumer et Holloway [70]-[107] ont apporté de nouveaux résultats de méthodes spectrales, très compétitifs par rapport aux méthodes standards, en particulier lorsque la fonction de distribution a un profil maxwellien en vitesse. La nouveauté réside dans l'ajout d'un facteur d'échelle en vitesse dans la base de Hermite qui permet de s'adapter aux échelles d'intérêt en vitesse.

Après une introduction sur les méthodes spectrales et leur application à l'équation de Vlasov, nous présentons trois méthodes pour la discrétisation en vitesse de cette équation : une méthode de Galerkin SGM (Spectral Galerkin Method) et deux méthodes de collocation LSCM (Lagrange Spectral Collocation Method) et HSCM (Hermite Spectral Collocation Method). Reprenant les idées d'Holloway [70], nous avons choisi d'utiliser dans les trois méthodes des fonctions de Hermite dépendant d'un facteur d'échelle, noté plus loin α. Nous étudions, à la fin de ce chapitre, l'influence du facteur d'échelle sur les approximations spectrale et pseudo-spectrale d'une fonction régulière, afin de déterminer un critère de choix pour ce facteur d'échelle.

I Introduction

I.1 Rappels sur les méthodes spectrales

Le développement sur une base de fonctions orthogonales est le principe de base de nombreuses méthodes d'approximation numériques appelées *méthodes spectrales*. En calcul scientifique, leur précision et leur efficacité dépend très fortement du problème étudié et en particulier de la régularité des solutions et des conditions aux bords du domaine. La méthode spectrale la plus courante est le développement en séries de Fourier pour des fonctions périodiques. Pour des fonctions régulières, la "précision spectrale" est obtenue si l'on considère les fonctions propres d'opérateurs de Sturm-Liouville comme fonctions de base.

La précision que l'on obtient avec les méthodes spectrales est due au fait que, en Fourier par exemple, le k^{ieme} cœfficient du développement décroît plus vite que $1/x^k$ pour une fonction suffisamment régulière. Par conséquent, on peut obtenir une bonne approximation d'une fonction avec seulement un petit nombre de termes dans le développement de la série. En particulier, dans un espace à plusieurs dimensions, des grilles relativement creuses suffisent à obtenir des résultats précis. Cela permet ainsi des calculs efficaces : à la fois rapides en temps et peu coûteux en taille mémoire nécessaire.

Les méthodes spectrales présentent cependant des difficultés dans certains cas ; par exemple dans le cas de conditions aux bords particulières ou sur des domaines irréguliers ou encore si le problème nécessite différentes échelles de résolution sur des parties d'un large domaine.

Aujourd'hui, les méthodes spectrales sont utilisées dans un grand nombre d'études scientifiques, comme dans les études de turbulence, pour les prédictions météorologiques, ou encore en sismologie...

Méthodes de Galerkin

La méthode spectrale de type Galerkin consiste à projeter la fonction $f(x)$, solution d'une équation aux dérivées partielles sur un espace de dimension finie V_h. Si l'espace V_h est engendré par les fonctions orthogonales ϕ_0,...,ϕ_N, la solution approchée s'écrit sous la forme :

$$f^N(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n \phi_n(x). \tag{3.2}$$

Les méthodes de Galerkin les plus populaires sont les développements en série de Fourier ou sur des bases de polynômes orthogonaux. Le choix des fonctions de base dépend des données du problème, des propriétés qualitatives de la solution, des conditions aux bords et du domaine de calcul.

Méthodes pseudo-spectrales

Les méthodes pseudo-spectrales, appelées aussi *méthodes de collocation*, sont une alternative aux méthodes de Galerkin. Dans cette approche, la fonction d'approximation de $f(x)$, appelée interpolée de f, a la particularité de satisfaire l'équation de façon exacte sur un ensemble de points : les *points de collocation*. Les méthodes pseudo-spectrales

présentent l'avantage majeur d'être associées à des méthodes d'intégration numérique d'ordre élevé : la quadrature de Gauss qui est très efficace pour des fonctions régulières. De plus ces méthodes tendent à générer des schémas conservatifs et non dispersifs [26].

La précision obtenue avec les méthodes de Galerkin et pseudo-spectrales est comparable à condition que les points de collocation choisis soient les points de la quadrature de Gauss associée. On rappelle que, pour une méthode d'intégration numérique d'ordre N, les points de quadrature sont les racines du polynôme de degré $N+1$ de la base associée [61]-[9]-[26].

I.2 Choix des fonctions de base

Les méthodes spectrales choisies pour discrétiser l'équation de Vlasov en vitesse sont essentiellement des méthodes de Galerkin sur des bases de Fourier [78]-[79]-[48]-[40]-[41]-[42]-[43] ou sur des bases de fonctions de Hermite [4]-[5]-[62]-[70]-[107]-[81]. Elles sont généralement couplées à une transformation de Fourier en espace.

Il existe peu de travaux sur la discrétisation de l'équation de Vlasov avec des méthodes spectrales sur des bases de Chebyshev, ces méthodes ne permettant ni la conservation du moment, ni celle de l'énergie totale [109].

Base de Fourier

En dimension un, la transformation de Fourier en vitesse de la fonction de distribution,

$$\hat{f}(x,\nu,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,v,t)e^{i\nu v}dv, \tag{3.3}$$

est solution de l'équation

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} - i\frac{\partial^2 \hat{f}}{\partial x \partial \nu} + i\nu E\hat{f} = 0, \tag{3.4}$$

obtenue à partir de l'équation de Vlasov (3.1).

Eliasson, dans [40], met en avant les bonnes propriétés de l'équation (3.4). La fonction de distribution $f(x,v,t)$ étant généralement exponentiellement décroissante à l'infini, sa transformée de Fourier $\hat{f}(x,\nu,t)$ est une fonction régulière en ν.

De plus, la méthode de Fourier présente des avantages concernant la capture de phénomènes physiques tels que la filamentation. En effet, si on reprend l'exemple présenté au chapitre 2-paragraphe III.1 considérant la partie balistique de l'équation de Vlasov avec la condition initiale

$$f_0(x,v) = (1 + a\cos(kx))\exp(-v^2/2),$$

on peut voir que, contrairement à la solution dans l'espace réel, la fonction $\hat{f}$ a l'avantage de ne pas former de petites structures au cours du temps. En effet, la transformée de Fourier de la solution du problème de Cauchy,

$$f(x,v,t) = (1 + a\cos(kx - kvt))\exp(-v^2/2),$$

est donnée par :

$$\hat{f}(x,\nu,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{\nu^2}{2}} + \frac{a}{2}\quad\left(\cos(kx)\,(e^{-\frac{(\nu-kt)^2}{2}} + e^{-\frac{(\nu+kt)^2}{2}})\right.\right.$$
$$\left.\left. + i\,\sin(kx)\;(e^{-\frac{(\nu-kt)^2}{2}} - e^{-\frac{(\nu+kt)^2}{2}})\right)\right].$$

Izrar *et al.* [74] utilisent une tranformée de Fourier rapide (FFT) de la fonction de distribution, mais cela nécessite des conditions aux limites périodiques.

Le choix d'une base de Fourier est justifié quand on travaille sur un domaine borné avec des conditions périodiques aux bords du domaine. Ainsi, pour résoudre l'équation de Vlasov par une méthode de Fourier en vitesse, on doit se ramener à un domaine borné et pour cela on limite le domaine de Fourier en ajoutant des frontières artificielles aux bords,

$$-\nu_{max} \leq \nu \leq \nu_{max}. \tag{3.5}$$

Les bords du domaine spectral $-\nu_{max}$ et ν_{max} doivent alors être traités avec beaucoup d'attention afin de minimiser l'erreur de troncature. Si la fonction de distribution décroît rapidement dans l'espace des phases, on suppose que la fonction f est approximativement nulle aux bords ce qui permet de la périodiser et donc de limiter l'apparition d'oscillations parasites, appellées "phénomènes de Gibbs", dues à la non périodicité de la base.
Cependant, la périodicité de la base ne permet pas la conservation du moment, les particules à grandes vitesses passant soudainement à des grandes vitesses négatives [78].

Base de Hermite

On introduit les espaces de Sobolev pondérés $L^2_\omega(\mathbb{R})$ et $H^r_\omega(\mathbb{R})$, $r \in \mathbb{N}$, définis par :

$$L^2_\omega(\mathbb{R}) = \left\{u \text{ tel que } \int_{\mathbb{R}} |u(v)|^2\,\omega(v)dv < \infty\right\}, \tag{3.6}$$

$$H^r_\omega(\mathbb{R}) = \left\{u \text{ tel que } \frac{d^k u}{dv^k} \in L^2_\omega(\mathbb{R}),\, 0 \leq k \leq r\right\}. \tag{3.7}$$

Leurs normes respectives $\|u\|_\omega$ et $\|u\|_{r,\omega}$ sont définies par :

$$\|u\|_\omega = \left(\int_{\mathbb{R}} |u(v)|^2\,\omega(v)dv\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{3.8}$$

$$\|u\|_{r,\omega} = \left(\sum_{k=0}^{r} \left\|\frac{\partial^r u}{\partial v^k}\right\|_\omega\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{3.9}$$

On appelle *bases de Hermite*, les bases constituées de polynômes de Hermite $H_n(v)$ définis par,

$$H_n(v) = (-1)^n e^{v^2}\frac{\partial^n}{\partial v^n}e^{-v^2}, \tag{3.10}$$

ou de *fonctions de Hermite*, qui sont des fonctions qui s'écrivent comme le produit d'un polynôme de Hermite par une maxwellienne, par exemple :

$$\tilde{H}_n(v) = C_n H_n(v) e^{-v^2}, \tag{3.11}$$

où $C_n = 1/\sqrt{2^n n!\,\pi}$ est la constante de normalisation qui garantit l'égalité,

$$\|\tilde{H}_n\|_\omega = 1,$$

où $\omega(v) = e^{v^2}$.

Les fonctions de Hermite sont naturellement employées dans de nombreux domaines des sciences car leur formulation peut être rapidement connectée à la physique. On trouve des applications numériques dans les problèmes de mécanique continue, de physique particulaire, de météorologie ou encore d'océanographie.

La projection sur des bases de Hermite permet de discrétiser des problèmes non bornés et de reproduire le comportement asymptotique de la solution (par exemple, un certain taux de décroissance à l'infini).

Pour la résolution des équations de Vlasov-Maxwell, les bases de fonctions de Hermite de type (3.11) apparaissent bien adaptées quand la solution a un profil de vitesse maxwellien (cf Funaro-Kavian [55]).

I.3 Propriétés mathématiques et numériques des méthodes spectrales de Hermite

Rappels sur les polynômes de Hermite

Un polynôme de Hermite de degré N, défini par (3.10), est la n$^{\text{ième}}$ fonction propre du problème singulier de Sturm-Liouville,

$$\frac{\partial}{\partial v}\left(e^{-v^2}\frac{\partial}{\partial v}f(v)\right) + \lambda e^{-v^2} f(v) = 0, \tag{3.12}$$

les valeurs propres correspondantes étant $\lambda_n = 2n$. Les premiers polynômes de Hermite s'écrivent :

$$\begin{array}{rcl} H_0(v) &=& 1, \\ H_1(v) &=& 2v, \\ H_2(v) &=& 4v^2 - 2, \\ H_3(v) &=& 8v^3 - 12v, \\ H_4(v) &=& 16v^4 - 48v^2 + 12, \\ H_5(v) &=& 32v^5 - 160v^3 + 120v, \\ H_6(v) &=& 64v^6 - 480v^4 + 720v^2 - 120. \end{array} \tag{3.13}$$

Les polynômes de Hermite ici sont normalisés de sorte que

$$H_n(v) \sim 2^n v^n, \tag{3.14}$$

pour v grand.

Les zéros des polynômes de Hermite constituent une grille non uniforme proche de celle des zéros du sinus-cardinal. La figure 3.1 donne par exemple la localisation des zéros des polynômes de Hermite de degré $n = 11$, $n = 21$ et $n = 41$: $H_{11}(v)$, $H_{21}(v)$ et $H_{41}(v)$.

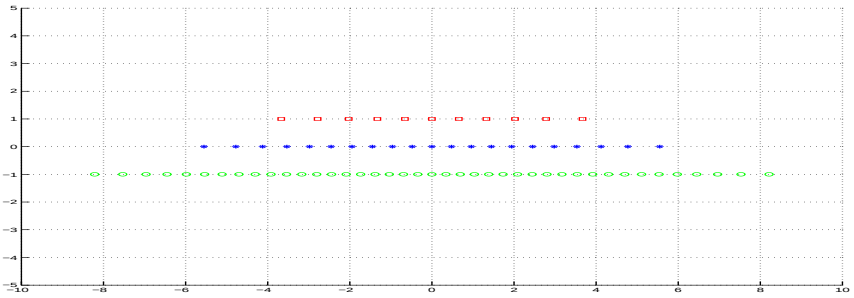


FIG. 3.1 – *Zéros des polynômes de Hermite* $H_{11}(v)$,$H_{21}(v)$ *et* $H_{41}(v)$.

Fonctions de Hermite symétriquement et asymétriquement pondérées

Les fonctions de Hermite sont dites *symétriquement pondérées* si le poid $\omega(v)$ associé vaut 1 [70]. Ainsi les fonctions $(\bar{H}_n(v))_n$, définies par,

$$\bar{H}_n(v) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(v)\, e^{-v^2/2}, \tag{3.15}$$

sont symétriquement pondérées.

Si $\omega(v) \neq 1$, les fonctions de Hermite sont dites *asymétriquement pondérées*. La base $(\tilde{H}_n(v))_n$,

$$\tilde{H}_n(v) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\ \pi}} H_n(v)\, e^{-v^2}, \tag{3.16}$$

de poids associé,

$$\omega(v) = e^{v^2}, \tag{3.17}$$

est une base de fonctions asymétriquement pondérées.

Développement en série de Hermite d'une fonction de $L^2_\omega(\mathbb{R})$

Les fonctions de $L^2_\omega(\mathbb{R})$ vérifient la propriété suivante.

Propriété I.1 *Quelle que soit la fonction* $u \in L^2_\omega(\mathbb{R})$*, on a le développement en série*

$$u(v) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n \tilde{H}_n(v),$$

avec les cœfficients de Hermite

$$u_n = \int_{\mathbb{R}} u(v) \tilde{H}_n(v)\, \omega(v) dv, \qquad n > 0.$$

Les fonctions de Hermite possèdent un grand nombre de propriétés obtenues à partir de celles des polynômes de Hermite, en particulier des relations d'orthogonalité (propriété I.2) et des relations de récurrence (propriété I.3).

Propriétés d'orthogonalité des fonctions de Hermite

Quels que soient les entiers n et m, les fonctions de Hermite $\tilde{H}_n(v)$ et $\tilde{H}_m(v)$ vérifient les relations d'orthogonalités suivantes.

Propriété I.2

i. L'ensemble des fonctions $\tilde{H}_n(v)$ forme une famille $L^2_\omega(\mathbb{R})$-orthogonale.

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{H}_m(v)\tilde{H}_n(v)\,\omega(v)\,dv = \delta_{m,n}.$$

ii. L'ensemble des dérivées de $\tilde{H}_n(v)$ forme une famille $L^2_\omega(\mathbb{R})$-orthogonale

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{d}{dv}\tilde{H}_n(v)\frac{d}{dv}\tilde{H}_m(v)\,\omega(v)\,dv = 2\alpha(n+1)\,\delta_{m,n}.$$

Propriétés de récurrence des fonctions de Hermite

Propriété I.3 *Les fonctions de base de Hermite $\tilde{H}_n(v)$ et $\bar{H}_n(v)$ définies respectivement en (3.16) et (3.15) satisfont les relations de récurrence suivantes (avec $\tilde{H}_j = 0$ et $\bar{H}_j = 0$ pour $j < 0$) :*

i.

$$\begin{cases} v\tilde{H}_n(v) &= \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\tilde{H}_{n+1}(v) + \sqrt{\dfrac{n}{2}}\tilde{H}_{n-1}(v), \\ v\bar{H}_n(v) &= \sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\bar{H}_{n+1}(v) + \sqrt{\dfrac{n}{2}}\bar{H}_{n-1}(v)\ ; \end{cases}$$

ii.

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dv}\tilde{H}_n(v) &= -\sqrt{2(n+1)}\tilde{H}_{n+1}(v), \\ \dfrac{d}{dv}\bar{H}_n(v) &= -\sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\bar{H}_{n+1}(v) + \sqrt{\dfrac{n}{2}}\bar{H}_{n-1}(v). \end{cases} \tag{3.18}$$

On en déduit en particulier :

$$\begin{cases} \dfrac{d^2}{dv^2}\tilde{H}_n(v) &= 2\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\tilde{H}_{n+2}(v), \\ \dfrac{d^2}{dv^2}\bar{H}_n(v) &= \dfrac{\sqrt{(n-1)n}}{2}\bar{H}_{n-2}(v) - \dfrac{2n-1}{2}\bar{H}_n(v) \\ & \qquad + \dfrac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}\bar{H}_{n+2}(v). \end{cases}$$

Autres propriétés des fonctions de Hermite

Les fonctions de Hermite normalisées sont bornées :

$$|\tilde{H}_n(v)| \leq 0.816, \qquad \forall n \in \mathbb{N}, \forall v \in \mathbb{R}. \tag{3.19}$$

Propriétés des matrices de dérivation spectrale de Hermite

On appelle *matrice de dérivation spectrale*, la matrice $D^{(k)}$ définie,
- pour une méthode de Galerkin, par :

$$\mathbf{a^{(k)}} = D^{(k)}\mathbf{a}, \tag{3.20}$$

où $\mathbf{a}$ est le vecteur contenant les cœfficients spectraux de f et $\mathbf{a^{(k)}}$ celui contenant les cœfficients spectraux de la k$^{\text{ième}}$ dérivée de f ;
- pour une méthode de collocation, par :

$$\mathbf{f^{(k)}} = D^{(k)}\mathbf{f}, \tag{3.21}$$

où $\mathbf{f}$ est le vecteur contenant les valeurs de la fonction f aux points de collocation et $\mathbf{f^{(k)}}$ celui contenant l'approximation de la k$^{\text{ième}}$ dérivée de f aux mêmes points.

Dans le cas d'une méthode de Galerkin, ces matrices $D^{(k)}$ ont la particularité d'être creuses, ce sont des matrices bandes. Inversement dans le cas des méthodes de collocation, ces matrices sont pleines.

D'après Weideman [129], on déduit de la formule de récurrence (3.18) que la première matrice de dérivation de Galerkin s'écrit, dans le cas d'une base de fonctions de Hermite symétriquement pondérées, comme suit :

$$D^{(1)} = iJRJ^{-1}, \tag{3.22}$$

où,

$$R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & & (0) \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & & \\ & \sqrt{2} & 0 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \sqrt{(N+1)} & \\ (0) & & & \sqrt{(N+1)} & 0 & \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

et $J = \mathrm{diag}(i^0 ... i^N)$.

On note $(\xi_k)_{k=0...N}$ les zéros du polynôme de Hermite $H_{N+1}(v)$ et on pose,

$$C_k = \frac{1}{\sum_{n=0}^{N} \frac{1}{2^n n!}[H_n(\xi_k)]^2}. \tag{3.24}$$

La matrice R est symétrique et donc $\mathbb{R}$-diagonalisable. Tang *et al.* [123] ont calculé les valeurs propres ainsi que les matrices de passage de la diagonalisation de R.

Théorème I.1

i. Les valeurs propres de R sont les $(\xi_k)_{k=0...N}$.

ii. Les vecteurs propres de R sont les

$$P_k = (P_{0k}, \ldots, P_{Nk})^t,$$

avec

$$P_{nk} = \frac{C_k}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi_k).$$

iii. Les élements de la matrice inverse de $P \equiv (P_0, \ldots, P_N)$ *sont de la forme :*

$$(P^{-1})_{nk} = \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(\xi_n).$$

On en déduit en particulier le théorème suivant,

Théorème I.2 *(Weideman [129]) Les valeurs propres de la première matrice de dérivation de Hermite* $D^{(1)}$ *définie par* (3.22) *sont distinctes, purement imaginaires et sont données par* $\lambda_j = i\xi_j$*, où les* ξ_j *sont les racines du polynôme de Hermite* $H_{N+1}(v)$*.*

Remarque I.1 *On retrouve également la matrice* R *en combinant les propriétés* (I.1) *et* (I.3)*i. En effet, par cette combinaison, on obtient que les cœfficients spectraux* g_n *du produit* $g(v) = v\,u(v)$ *sont donnés matriciellement par le produit de la matrice* R *par le vecteur des cœfficients spectraux de la fonction* $u(v)$ *:*

$$(g_0, \ldots, g_N)^t = R\,(u_0, \ldots, u_N)^t.$$

Propriétés de stabilité numérique

Weideman [129] étudie les propriétés de stabilité numérique des méthodes spectrales de Hermite en regardant les valeurs propres de la matrice de dérivation associée. Il montre que la méthode de Hermite est stable sous de faibles hypothèses.

On cherche une condition de stabilité numérique pour l'approximation spectrale en espace du problème d'évolution suivant,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^k u}{\partial x^k}. \tag{3.25}$$

Les approximations spectrales de l'équation, par la méthode de Galerkin et par la collocation, sont respectivement données par :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{a} &= D^{(k)}\mathbf{a}, \\ \partial_t \mathbf{u} &= D^{(k)}\mathbf{u}, \end{aligned} \tag{3.26}$$

où $\mathbf{a}$ contient les cœfficients spectraux de $u(v)$ et $\mathbf{u}$ contient les valeurs de la fonctions $u(v)$ aux points de collocation.

On note $\rho(D^{(k)})$ le rayon spectral de la matrice $D^{(k)}$,

$$\rho(D^{(k)}) = \max_j |\lambda_j|, \tag{3.27}$$

où les $(\lambda_j)_j$ sont les valeurs propres de $D^{(k)}$. Si la méthode de discrétisation en temps est explicite et si le pas de temps vérifie la condition,

$$\Delta t < \frac{C}{\rho(D^{(k)})}, \tag{3.28}$$

où la constante C dépend de la méthode d'intégration en temps, la solution de l'équation (3.25) reste bornée quand $t \to \infty$.

Weideman [129] montre que pour une base de fonctions de Hermite symétriquement pondérées, les rayons spectraux de la première et de la deuxième matrice de différentiation de Galerkin sont respectivement de l'ordre de $O(\sqrt{N})$ et de $O(N)$. En effet, les valeurs propres de $D^{(1)}$ sont les racines $(\xi_j)_{j=0...N}$ du polynôme de Hermite de degré $N+1$ qui ont la propriété connue :

$$\max_{j=0...N} \xi_j \sim \sqrt{N}. \tag{3.29}$$

Ainsi, si on considère par exemple l'équation de la chaleur, la méthode est stable si les pas de temps choisis sont inférieurs ou égaux à Δt_{max} qui vérifie,

$$\Delta t_{max} \sim O(N^{-1}). \tag{3.30}$$

Cette condition de stabilité est plus faible que celle des méthodes de Fourier et de Chebyshev, pour lesquelles les pas de temps maximums doivent être respectivement de l'ordre de $O(N^{-2})$ et $O(N^{-4})$.

I.4 Méthodes spectrales pour la résolution de l'équation de Vlasov et filamentation

Instabilité des méthodes spectrales appliquées à Vlasov

Les forts gradients développés dans les solutions de l'équation de Vlasov tels que ceux observés dans le phénomène de la filamentation (cf chapitre 2-paragraphe III.1), sont très difficiles à reproduire numériquement. Nous rappelons ici que la filamentation est un comportement physique qu'il est nécessaire de pouvoir simuler.

Les premiers essais de résolution des équations de Vlasov-Poisson à l'aide de méthodes spectrales n'a pas produit de résultats très satisfaisants ; ces méthodes ne permettent pas de bien capturer la filamentation et sont alors instables [4].

Terme producteur d'entropie

Afin de stabiliser la méthode spectrale de Hermite-Fourier de résolution de l'équation de Vlasov, Grant et Feix [62] proposent d'introduire un terme producteur d'entropie au second membre de l'équation :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = B\left(\frac{\partial}{\partial v}(vf) + \frac{\partial^2 f}{\partial v^2}\right), \tag{3.31}$$

où B est un paramètre caractérisant le plasma qui est égal au rapport entre la fréquence de collision et la fréquence plasma. Dans le cas d'un plasma peu collisionnel, on prend

$$B = 0.0125.$$

Le terme (3.31), appelé terme de Fokker-Planck, permet la diminution des cœfficients de Hermite d'ordre élevé, ce qui stabilise la méthode. Cependant, elle a l'inconvénient de modifier la physique du problème en introduisant des collisions artificielles. De plus, elle est très coûteuse en raison de la présence d'un terme de diffusion qui doit être traité par implicitation temporelle avec inversion d'un système linéaire à chaque pas de temps.

Filtrage

Klimas [78] a introduit une méthode spectrale de filtrage de type Fourier-Fourier dans le but de distinguer le bruit numérique de la filamentation. Sa méthode part d'une idée de Cheng et Knorr [27] : le filtrage se fait à travers la convolution de la fonction de distribution par une fonction filtre $\mathcal{F}(v)$. On définit donc

$$\bar{f}(x,v,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(v-u) f(x,v,t) du. \tag{3.32}$$

Le filtre, choisi afin que le système filtré d'équations à résoudre conserve les premiers modes de Fourier de la distribution, est une gaussienne,

$$\mathcal{F}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_0} e^{-(v/v_0)^2/2}, \tag{3.33}$$

où v_0 est la largeur du filtre. La méthode de filtrage appliquée au système de Vlasov-Poisson monodimensionnel conduit à un système d'équations faisant intervenir un nouveau terme d'ordre deux :

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} + v\frac{\partial \bar{f}}{\partial x} + \bar{E}(x,t)\frac{\partial \bar{f}}{\partial v} = -v_0^2 \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial v}. \tag{3.34}$$

Contrairement au terme de Fokker-Planck de Grant et Feix, ce terme n'introduit pas d'erreur dans l'évolution de la solution. En effet, le champ électrique calculé avec la solution filtrée reste identique à celui calculé à partir de la solution structurée.

Klimas et Farrell [79] ont par la suite amélioré la méthode en utilisant un nouvel algorithme de splitting, rendant la méthode plus stable et plus efficace en termes de temps de calcul.

La filamentation étant associée au problème de free-streaming, Figua *et al.* [48] ont récemment regardé l'application de cette méthode de filtrage sur ce problème, retirant le terme $\bar{E}(x,t)\partial\bar{f}/\partial v$ de l'équation (3.34). Afin de mettre en évidence l'intérêt du filtrage, ils ont alors considéré le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\partial g}{\partial t} + v\dfrac{\partial g}{\partial x} & = & -v_0^2 \dfrac{\partial^2 g}{\partial x \partial v}, \\ g(x,v,t=0) & = & g_0(x,v). \end{array} \right. \tag{3.35}$$

Si on réalise une transformation de Fourier de la solution en espace et en vitesse,

$$\tilde{g}(m,\nu,t) = \frac{1}{L}\int_{x=0}^{L}\int_{v\in\mathbb{R}} e^{-i(m\frac{2\pi}{L}x+\nu v)} g(x,v,t) dx dv, \tag{3.36}$$

on obtient l'équation,

$$\frac{\partial \tilde{g}}{\partial t} - \frac{2\pi}{L} m \frac{\partial \tilde{g}}{\partial \nu} = v_0^2 \frac{2\pi}{L} m\nu \tilde{g}. \tag{3.37}$$

Ainsi, trouver une solution du problème (3.35) revient à trouver la fonction g telle que sa double transformée de Fourier $\tilde{g}$ soit donnée par :

$$\tilde{g}(m,\nu,t) = \tilde{g}_0\left(m, \nu + \frac{2\pi}{L}mt\right) e^{v_0^2 m \frac{2\pi}{L}\nu t} e^{\frac{1}{2}v_0^2 m^2 \frac{4\pi^2}{L^2}t^2}, \tag{3.38}$$

la solution du problème de Cauchy défini par l'équation (3.37) associée à la condition initiale $\tilde{g}(m,\nu,t=0)=\tilde{g}_0(m,\nu)$.

Si $\tilde{g}_0$ est une fonction quelconque, on ne peut pas trouver de solution de (3.35) qui ait un bon comportement asymptotique à l'infini. En effet si $m\nu>0$, le terme

$$e^{v_0^2 m\frac{2\pi}{L}\nu t}\, e^{\frac{1}{2}v_0^2 m^2\frac{4\pi^2}{L^2}t^2},$$

croît exponentiellement à l'infini.

Par contre, si la condition initiale est de la forme :

$$g_0(x,v)=f_0(x,v)\times\mathcal{F}(v), \tag{3.39}$$

alors,

$$\tilde{g}(m,\nu,t)=\tilde{f}_0\left(m,\nu+\frac{2\pi}{L}mt\right)\, e^{-v_0^2\nu^2/2}, \tag{3.40}$$

et g, la solution de (3.35), a un bon comportement asymptotique à l'infini.

La largeur ν_0 du filtre doit être choisie avec attention car un filtre trop large conduit à des valeurs de $\tilde{g}(m,\nu,t)$ tellement petites qu'elles peuvent être perdues par les erreurs d'arrondi.

Figua *et al.* [48] ont également mis en évidence une condition nécessaire de stabilité pour la méthode : $A(\Delta t)$, l'opérateur d'approximation de la solution de (3.35), doit préserver la décroissance exponentielle à l'infini de la transformée de Fourier. Le schéma de filtrage se révèle alors instable, cette condition n'étant généralement pas vérifiée.

Conditions aux bords sortantes

Eliasson [40], dans sa méthode spectrale de type Fourier-Fourier, propose de supprimer les informations à petites échelles de l'espace des vitesses en utilisant des conditions aux bords de type sortantes de son espace de Fourier. L'idée consiste à laisser sortir du domaine les ondes sortantes et à empêcher les ondes entrantes de revenir. Cela revient à coupler l'équation de Vlasov écrite dans l'espace de Fourier (3.4) à l'équation suivante :

$$\frac{\partial\hat{f}}{\partial t}=\mathrm{F}^{-1}H(k)\mathrm{F}\left(i\frac{\partial^2\hat{f}}{\partial x\partial\nu}-i\nu E\hat{f}\right),\ \text{en } \nu=\nu_{max},\quad 0\le x\le L, \tag{3.41}$$

où F et F $^{-1}$ sont respectivement les opérateurs de transformation de Fourier et de transformation de Fourier inverse en espace et $H(k)$, $k\in\mathbb{R}$, est la fonction de Heaviside définie par :

$$H(k)=\begin{cases}1, & k>0,\\ 0, & k\le 0.\end{cases} \tag{3.42}$$

L'opérateur $\mathrm{F}H(k)\mathrm{F}^{-1}$ projette les fonctions dans un espace de fonctions dont les composantes de Fourier dans la direction x sont positives.

Les différentes méthodes proposées jusqu'ici pour stabiliser les méthodes spectrales en levant la difficulté de la filamentation, ne permettent pas d'obtenir de solutions précises des équations. En effet, les solutions obtenues ne rendent que partiellement compte du phénomène de la filamentation. Pour pallier cette difficulté, Holloway introduit un facteur d'échelle en vitesse.

I.5 Facteur d'échelle

L'idée d'introduire un paramètre α dans la formulation des fonctions de Hermite,

$$\tilde{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!\ \pi}} H_n(\alpha v) e^{-\alpha^2 v^2}, \tag{3.43}$$

vient de Boyd [21]. Ce paramètre permet de minimiser les oscillations naturellement développées par la troncature de la série, en redimensionnant la largeur des fonctions de Hermite. Boyd [21] fait l'analyse numérique des cœfficients des séries de fonctions de Hermite et cherche en particulier des estimations du dernier cœfficient spectral a_N de la série tronquée quand N est grand. En effet ce cœfficient détermine l'erreur de troncature, qui s'écrit pour des fonctions régulières :

$$\left| f(v) - \sum_{n=0}^{N} a_n \tilde{H}_n(v) \right| \sim \mathcal{O}(a_N). \tag{3.44}$$

Tang [122] montre comment choisir le bon facteur d'échelle α pour des fonctions à supports compacts et compare les comportements asymptotiques, obtenus avec et sans facteur d'échelle, des derniers cœfficients spectraux de la fonction exponentielle,

$$f(v) = \exp(-pv^2),$$

définie sur $[-M, M]$ avec $M, p \in \mathbb{R}$. Dans la méthode de Hermite classique, on a l'estimation suivante :

$$a_N \sim \frac{1}{\sqrt{N\pi p}} e^{-C}, \quad \text{si } N = \mathcal{O}(p), \tag{3.45}$$

où C est une constante positive. Par contre, si les fonctions de Hermite dépendent d'un facteur d'échelle α défini par,

$$\alpha = \max_{j=0\ldots N} \frac{\xi_j}{M}, \tag{3.46}$$

où les ξ_j sont les racines de $H_{N+1}(v)$, le dernier cœfficient spectral est de l'ordre de :

$$a_N \sim \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-C}, \quad \text{si } N = \mathcal{O}(\sqrt{p}). \tag{3.47}$$

Les résultats numériques montrent qu'en utilisant le facteur d'échelle α, le nombre de points nécessaires pour obtenir une solution numérique précise, devient très raisonnable. Le choix de fonctions de Hermite dépendant d'un facteur d'échelle permet donc de réduire de manière importante le nombre de degrés de liberté du système.

Les travaux de Schumer et Holloway [70]-[107] sur la discrétisation du problème monodimensionnel de Vlasov-Poisson, reprennent l'idée des fonctions de base de Hermite dépendant d'un facteur d'échelle, cette méthode étant particulièrement bien adaptée à des profils maxwelliens de vitesse. Ils l'appliquent à deux méthodes : une méthode utilisant des fonctions de base symétriquement pondérées et la deuxième, des fonctions de base asymétriquement pondérées, et comparent les résultats obtenus. Les méthodes se révèlent à la fois précises et efficaces : un petit nombre de fonctions de base permet

d'obtenir des solutions structurées de l'équation de Vlasov. En effet, la grille de résolution en vitesse,

$$\left[\frac{-\xi_N}{\alpha}, \frac{\xi_N}{\alpha}\right], \tag{3.48}$$

où ξ_N est le plus grand zéros de Hermite, est bien adaptée à la forme des solutions si le facteur d'échelle α est bien choisi (cf choix du facteur d'échelle au paragraphe IV). De plus, la grille des zéros de Hermite étant plus dense au centre de la grille (cf figure 3.1), les fines structures de la solution, généralement localisées dans une région autour de $v = 0$, sont bien résolues.

I.6 Propriétés de conservation des méthodes spectrales de Hermite symétriquement pondérées et asymétriquement pondérées appliquées à l'équation de Vlasov

D'après Holloway [70], la méthode spectrale de Hermite, utilisant des fonctions de base symétriquement pondérées, ne peut conserver de manière simultanée la densité de particules et le moment total. La conservation de ces quantités sont fonctions de la parité du nombre de fonctions de base. En effet, la variation en temps de la densité de particules,

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\int\int f(x,v,t)dxdv \\ &\quad -\sum_{n=0}^{N}\int \bar{H}_n(v)dv \int E(x,t)\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}f_{n+1} - \sqrt{\frac{n}{2}}f_{n-1}\right]dx,\end{aligned} \tag{3.49}$$

s'annule, en utilisant les relations de récurrence de la propriété I.3, si et seulement si N est pair. Dans le cas d'un nombre impair de fonctions de base, il reste un terme dans l'égalité (3.49). De la même manière, la conservation du moment et de l'énergie totale dépend de la parité du nombre N ; la méthode discrète conserve le moment si N est impair, et l'énergie totale si N est pair.

Holloway [70] montre que la méthode spectrale de Hermite, utilisant des fonctions de base asymétriquement pondérées, conserve la densité, l'énergie et le moment total sans critère sur le nombre de fonctions de Hermite. Cependant cette méthode ne permet pas la conservation du carré de la fonction de distribution [107],

$$\int\int f^2(x,v,t)\ dxdv, \tag{3.50}$$

ce qui rend la méthode instable. La méthode de Hermite symétriquement pondérée a l'avantage de conserver la quantité (3.50) [71].

Holloway [70] montre qu'un facteur d'échelle adapté à la simulation, contribue à améliorer les propriétés de conservation des méthodes de Hermite et en particulier dans le cas de fonctions de base symétriquement pondérées.

II Méthode de Galerkin basée sur des fonctions de Hermite : SGM

II.1 Principe de la méthode SGM

La méthode de Galerkin SGM utilise une base de fonctions asymétriquement pondérées $\tilde{H}_n(v)$, définies par :

$$\tilde{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!\ \pi}} H_n(\alpha v) e^{-\alpha^2 v^2}. \tag{3.51}$$

D'après la propriété (I.1), pour tout $u \in L^2_\omega(\mathbb{R})$, on peut écrire

$$u(v) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n \tilde{H}_n(v), \tag{3.52}$$

où les cœfficients u_n sont définis par

$$u_n = \int_{\mathbb{R}} u(v)\tilde{H}_n(v)\omega(v)dv, \quad n > 0. \tag{3.53}$$

De récents résultats de l'estimation de l'erreur d'approximation d'une méthode de Galerkin avec des polynômes de Hermite ont été obtenus par Guo [64]-[63].

Soit $\mathbb{P}_N$ l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à N, où N est un entier positif. L'opérateur de projection orthogonale sur $L^2_\omega(\mathbb{R})$,

$$P_N : L^2_\omega(\mathbb{R}) \to \mathbb{P}_N,$$

vérifie la propriété suivante :

$$(u - P_N u, \phi)_\omega = 0, \quad \phi \in \mathbb{P}_N. \tag{3.54}$$

L'opérateur P_N est la meilleure approximation associée au produit scalaire sur l'espace $H^m_\omega(\mathbb{R})$ (Guo [63]).

II.2 Estimations d'erreur

Dans [64] et [63], Guo fournit des estimations d'erreur en normes usuelles des espaces de Sobolev à poids :

Théorème II.1 *Quel que soit $u \in H^r_\omega(\mathbb{R})$ et $0 \le \mu \le r$,*

$$||u - P_N u||_{\mu,\omega} \le C_1 N^{\frac{\mu-r}{2}} ||u||_{r,\omega}, \tag{3.55}$$

et quel que soit $u \in H^1_\omega(\mathbb{R})$ et $r \ge 1$,

$$||(u - P_N u)e^{-v^2/2}||_{L^\infty} \le C_2 N^{\frac{1}{4}-\frac{r}{2}} ||u||_{1,\omega}, \tag{3.56}$$

où C_1 et C_2 sont des constantes positives.

III Méthodes pseudo spectrales LSCM et HSCM : deux procédés d'interpolation

Les méthodes pseudo-spectrales LSCM et HSCM sont basées sur les fonctions symétriquement pondérées $\bar{H}_n(v)$ dépendant d'un facteur d'échelle α,

$$\bar{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(\alpha v) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}. \tag{3.57}$$

On introduit les polynômes $\mathcal{H}_n(v)$ définis par :

$$\mathcal{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}\, H_n(\alpha v). \tag{3.58}$$

III.1 Quadrature de Gauss-Hermite avec facteur d'échelle

On définit la quadrature suivante,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v) e^{-\alpha^2 v^2}\, dv \approx \sum_{l=0}^{N} \omega_l\ f\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right). \tag{3.59}$$

Si on choisit comme points d'intégration les zéros ξ_k, $k = 0, ..., N$, du $(N+1)^{\text{ième}}$ polynôme de Hermite, il existe un unique ensemble de fonctions poids ω_k pour lesquels la quadrature (3.59) est exacte pour des polynômes de degré inférieur ou égal à $2N+1$ (voir par exemple Canuto *et al.* [26]).

Du point de vue théorique, on introduit les polynômes de Lagrange L_j de degré $N+1$, pour $j = 0, ..., N$, définis par

$$L_j(v) = \prod_{k=0, k\neq j}^{k=N} \frac{(v - \xi_k)}{(\xi_j - \xi_k)}, \tag{3.60}$$

vérifiant l'égalité

$$L_j(\xi_k) = \delta_{jk}, \text{ pour } k = 0, ..., N. \tag{3.61}$$

Dans (3.59), si on considère la fonction $f(v) = L_j(\alpha v)$, on obtient directement l'expression unique pour les poids ω_j :

$$\omega_j = \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} L_j(v)\, e^{-v^2}\, dv. \tag{3.62}$$

Le calcul des poids par cette égalité n'étant pas immédiat, on propose l'expression suivante.

Lemme III.1 *Les poids d'intégration ω_j sont égaux à*

$$\omega_j = \frac{1}{\sum_{k=0}^{N} \left[\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\right]^2}. \tag{3.63}$$

Preuve. La décomposition des polynômes $L_j(\alpha v)$ sur la base orthonormale des $\mathcal{H}_k(v)$ donne,

$$L_j(\alpha v) = \sum_{k=0}^{N} \left(L_j(\alpha\,\cdot), \mathcal{H}_k\right)_{e^{-\alpha^2 v^2}}\ \mathcal{H}_k(v). \tag{3.64}$$

Le produit $L_j(\alpha v)\mathcal{H}_k(v)$ étant un polynôme de dégré inférieur ou égal $2N+1$, la formule de quadrature (3.59) appliquée à cette fonction est exacte :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} L_j(\alpha v)\mathcal{H}_k(v)e^{-\alpha^2 v^2}\,dv = \sum_{l=0}^{N} \omega_l\ L_j(\xi_l)\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right). \tag{3.65}$$

Si on multiplie (3.60) par $\mathcal{H}_k(v)$ et que l'on somme sur k, on a :

$$\sum_{k=0}^{N} \left(L_j(\alpha\,\cdot)\,, \mathcal{H}_k\right)_{e^{-\alpha^2 v^2}} \mathcal{H}_k(v) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N} \omega_l L_j(\xi_l)\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right)\mathcal{H}_k(v), \tag{3.66}$$

et (3.64) conduit à l'égalité :

$$L_j(\alpha v) \;=\; \sum_{k=0}^{N} \omega_j\, \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\mathcal{H}_k(v). \tag{3.67}$$

En prenant $v = \xi_l/\alpha$, $l = 0, ..., N$, on voit que

$$\sum_{k=0}^{N} \omega_j\, \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\ \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) = \delta_{jl}, \tag{3.68}$$

et en particulier

$$\sum_{k=0}^{N} \left[\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\right]^2 \omega_j = 1. \quad \square \tag{3.69}$$

Remarque III.1 *En considérant $f(v) = P(\alpha v)$ dans (3.59) et en posant*

$$g(v) = P(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2},$$

on peut déduire une autre formule de quadrature :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(v)\,dv \approx \sum_{k=0}^{N} \bar{\omega}_k\, g\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right), \tag{3.70}$$

où les poids d'intégration $\bar{\omega}_k$ sont égaux à

$$\bar{\omega}_k = \omega_k\ e^{\xi_k^2} = \frac{e^{\xi_k^2}}{\sum_{k=0}^{N}\left[\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\right]^2}. \tag{3.71}$$

III.2 Procédé d'interpolation construit sur les polynômes de Lagrange : méthode LSCM

A partir d'un ensemble discret de valeurs $(g_k)_{k=0,\dots,N}$, on construit une fonction d'interpolation $\mathcal{I}_L^N g$ par combinaison linéaire de fonctions particulières : les polynômes de Lagrange L_k, définis en (3.64), multipliés par une maxwellienne dépendant du facteur d'échelle α,

$$\mathcal{I}_L^N\, g(v) \;=\; \sum_{k=0}^{N} g_k\, e^{\xi_k^2}\, L_k(\alpha v)\, e^{-\alpha^2 v^2}. \tag{3.72}$$

Quel que soit le polynôme P de degré inférieur ou égal à N, on a l'égalité suivante,

$$P(v) \;=\; \sum_{k=0}^{N} P(\xi_k)\, L_k(v), \tag{3.73}$$

donc,

$$P(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2} = \sum_{k=0}^{N} P(\xi_k)L_k(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2} = \sum_{k=0}^{N} P(\xi_k)e^{-\xi_k^2}\, e^{\xi_k^2} L_k(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2}.$$

On en déduit que l'interpolation (3.72) d'une fonction g définie par

$$g(v) = P(\alpha v)e^{-\alpha^2 v^2}, \quad P \in \mathbb{P}^N, \tag{3.74}$$

est exacte, avec les points collocation $\{\xi_k/\alpha\}_{k=0,\dots,N}$:

$$g_k = g\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right). \tag{3.75}$$

Les points de collocation sont identiques aux points de quadrature (3.70). De plus, on a vu au paragraphe précédent (III.1) que cette quadrature était exacte quel que soit la fonction g de la forme (3.74), avec $P \in \mathbb{P}^{2N+1}$, le procédé d'interpolation (3.72) est donc associé à la quadrature de Gauss-Hermite définie en (3.70).

III.3 Procédé d'interpolation basé sur des fonctions de Hermite : méthode HSCM

A partir de la formule de quadrature (3.59), on construit l'interpolée d'ordre élevé $\mathcal{I}_H^N f$ d'une fonction f continue sur $\mathbb{R}$. Les points $\{\xi_k/\alpha\}_{k=0,\dots,N}$ sont utilisés comme points de collocation et les fonctions de base de l'interpolation sont les fonctions de Hermite $\bar{H}_k(v)$ dépendant d'un facteur d'échelle α et définies par :

$$\bar{H}_k(v) = \mathcal{H}_k(v)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}. \tag{3.76}$$

On note que ces fonctions $\bar{H}_k$ vérifient $(\bar{H}_k,\, \bar{H}_l) = \delta_{kl}$. Pour une fonction f appartenant à l'espace de Sobolev pondéré $L^2_{\omega(v)}(\mathbb{R})$, avec $\omega(v) = e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}$, on définit sa projection orthogonale $\Pi^N f$ sur l'espace vectoriel engendré par les $\bar{H}_k$ telle que :

$$\Pi^N f(v) = \sum_{k=0}^{N} (f, \bar{H}_k)\, \bar{H}_k(v). \tag{3.77}$$

Et pour une fonction $f \in vect(\bar{H}_k)_{k=0,N}$, on a

$$\Pi^N f(v) = f(v) = \sum_{k=0}^{N} \left(f(v) e^{\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}, \mathcal{H}_k(v) \right)_{e^{-\alpha^2 v^2}} \bar{H}_k(v). \tag{3.78}$$

Comme $f(v)e^{\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}\mathcal{H}_k(v) \in \mathbb{P}^{2N+1}$, la formule de quadrature (3.59) est exacte et l'on obtient :

$$f(v) = \sum_{k=0}^{N} \sum_{l=0}^{N} \omega_l \; e^{\frac{1}{2}{\xi_l}^2} \; f\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \bar{H}_k(v). \tag{3.79}$$

On est alors amené à définir l'opérateur linéaire d'interpolation,

$$\mathcal{I}_H^N : \mathcal{C}^0(\mathbb{R}) \to vect(\bar{H}_k)_{k=0,N}, \tag{3.80}$$

défini par :

$$\mathcal{I}_H^N f(v) = \sum_{k=0}^{N} \sum_{l=0}^{N} \omega_l \; e^{\frac{1}{2}{\xi_l}^2} \; f\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \bar{H}_k(v). \tag{3.81}$$

En utilisant les notations introduites par Tang [122], cela revient à définir $\mathcal{I}_H^N$ comme suit :

$$\mathcal{I}_H^N f(v) = \sum_{k=0}^{N} a_k \bar{H}_k(v), \tag{3.82}$$

avec

$$a_k = \sum_{j=0}^{N} \frac{1}{C_j} f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \tag{3.83}$$

et

$$C_j = \frac{e^{-{\xi_j}^2}}{\omega_j} = \sum_{k=0}^{N} \left[\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \right]^2. \tag{3.84}$$

III.4 Estimation de l'erreur

Guo et Xu ont étudié dans [63] les propriétés de l'interpolation de Gauss-Hermite et ont prouvé l'estimation suivante.

Théorème III.1 *Pour toute fonction $f \in H_\omega^m(\mathbb{R})$, il existe une constante C telle que :*

$$||f - \mathcal{I}^N f||_{H_\omega^k(\mathbb{R})} \leq C \, N^{\frac{1}{3}+\frac{k-m}{2}} \, ||f||_{H_\omega^m(\mathbb{R})}, \tag{3.85}$$

pour $m \geq 1$ et $0 \leq k \leq m$.

IV Choix et apports du facteur d'échelle

Dans cette partie, nous étudions la sensibilité des méthodes au facteur d'échelle α, afin de déterminer un intervalle de valeurs de ce paramètre, pour lesquelles les méthodes sont très précises. Nous regardons les solutions approchées, obtenues par les méthodes SGM, LSCM et HSCM, d'une gaussienne centrée (3.86) et d'une fonction de type "two-stream" (3.87),

$$f_1(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}}, \tag{3.86}$$

$$f_2(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v^2 e^{-\frac{v^2}{2}}. \tag{3.87}$$

Ces fonctions seront très largement utilisées comme fonctions initiales dans les simulations (cf chapitre 5).

Pour les trois méthodes, SGM, LSCM et HSCM, le nombre de polynômes de Hermite est fixé à $N = 20$ dans un premier temps, puis à $N = 80$. Nous calculons l'erreur de projection spectrale e_P (3.88) pour SGM, l'erreur d'interpolation e_I (3.89) et l'erreur de quadrature e_Q (3.90) pour LSCM et HSCM. Le facteur d'échelle α varie entre 0.1 et 1.2 pour SGM, entre 0.1 et 6 pour LSCM, et de $\xi_N/20$ à ξ_N pour HSCM, avec dans chacun des cas un pas égal à 0.1.

$$e_P = \log_{10}(\|P_N f - f\|_\infty), \tag{3.88}$$

$$e_I = \log_{10}(\|\mathcal{I}_H f - f\|_\infty), \tag{3.89}$$

$$e_Q = \log_{10} \left(\left| \sum_k \frac{1}{C_k} f\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right) - \int_{\mathbb{R}} f(v)dv \right| \right). \tag{3.90}$$

On définit alors, à partir des courbes d'erreur obtenues (cf graphes a, b, f et g - figure 3.2 pour SGM, figure 3.3 pour LSCM et figure 3.4 pour HSCM), un facteur d'échelle optimal α_{opt}. Dans le cas $N = 20$, nous illustrons les courbes d'erreur par la superposition des fonctions approchées en traits gras et de la fonction exacte en pointillés (cf graphes c, d, e, h, i et j des mêmes figures) pour trois valeurs différentes de α telles que :

$$\alpha < \alpha_{opt},\ \alpha = \alpha_{opt} \text{ et } \alpha > \alpha_{opt}.$$

IV.1 Choix du facteur d'échelle optimal pour SGM

Pour les fonctions f_1 et f_2, il existe un choix de α optimal, $\alpha_{opt} = 1/\sqrt{2}$, pour lequel la fonction approchée par la méthode de Galerkin est exacte si $N \geq 3$:

$$f_1(v) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}}} \tilde{H}_0(v), \tag{3.91}$$

$$f_2(v) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}}} \tilde{H}_0(v) + \sqrt{\sqrt{\frac{2}{\pi}}}\, \tilde{H}_2(v). \tag{3.92}$$

Comportement de l'erreur de projection

Les figures 3.2a, 3.2b, 3.2f et 3.2g montrent que la dépendance en α de l'erreur de projection spectrale est très forte, ce qui justifie l'importance d'un bon calibrage du facteur d'échelle avant une simulation. Les courbes définissent une région centrée autour de α_{opt} où la méthode numérique est très précise. On remarque que cette région s'élargit quand on augmente le nombre de polynômes de Hermite. Ainsi, la méthode est très précise avec un petit nombre de polynômes à condition que l'on choisisse correctement le facteur d'échelle. Ce choix est moins important pour un grand nombre de polynômes.

Comportement des fonctions approchées

Avec $\alpha = \alpha_{opt}$ (figures 3.2d et 3.2i), les courbes approchent parfaitement la solution exacte comme le prédisait la théorie. Dans le cas $\alpha < \alpha_{opt}$, (figures 3.2c et 3.2h), des oscillations apparaissent et la positivité des fonctions n'est pas conservée. Pour $\alpha > \alpha_{opt}$ la forme de la Gaussienne est reproduite avec de faibles oscillations (figure 3.2e) ; quand à la fonction "two-stream" (figure 3.2j), elle n'est pas du tout reconstruite, elle est approchée par une fonction oscillante de même support (phénomène de Gibbs).

IV.2 Choix du facteur d'échelle optimal pour LSCM

Comportement des erreurs d'interpolation et de quadrature

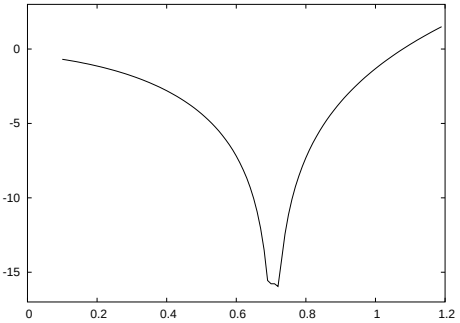
Sur les figures 3.3a, 3.3b, 3.3f et 3.3g, on peut voir que les erreurs d'interpolation et de quadrature sont, de la même manière que pour la méthode SGM, fortement dépendantes du facteur d'échelle α. Afin que l'interpolation soit très précise il apparaît nécessaire de choisir le facteur d'échelle optimal $\alpha_{opt} = 1/\sqrt{2}$, en particulier pour un petit nombre de points de collocation ($N = 20$). Pour un nombre N "assez"grand ($N = 80$), il est nécessaire de choisir un facteur d'échelle dans la région centrée sur α_{opt} que l'on voit sur le graphe, entre 0.55 et 0.85. On peut cependant observer, dans le cas où N est grand, que l'erreur d'interpolation devient très grande lorsque le facteur d'échelle est choisi au delà de la région centrée sur α_{opt}.

Comportement des fonctions approchées

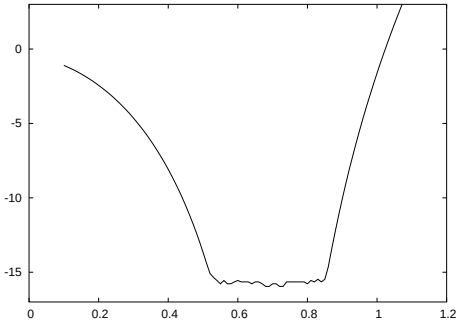
L'allure des courbes sur les figures 3.3d et 3.3i confirment le choix $\alpha = \alpha_{opt}$. Quand le facteur d'échelle est tel que $\alpha < \alpha_{opt}$ (figures 3.2c et 3.3h), les fonctions ne sont pas reproduites correctement et en particulier leur positivité n'est pas conservée. Dans le cas $\alpha > \alpha_{opt}$, les figures 3.3e et 3.3j montrent un important phénomène de Gibbs.

IV.3 Choix du facteur d'échelle optimal pour HSCM

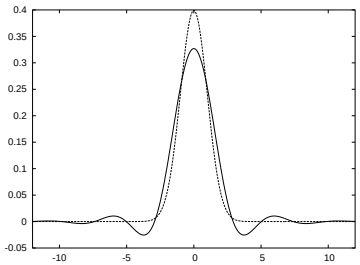
A la différence de la méthode SGM, il n'y a pas de valeur théorique du facteur d'échelle α pour laquelle la méthode HSCM serait exacte. Ainsi quelques articles parlent de la façon dont on doit choisir le facteur d'échelle. Par exemple, Tang dans [122] propose de considérer :



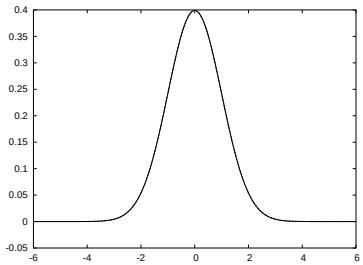
3.2a - $N = 20$ pour $f_1(v)$.



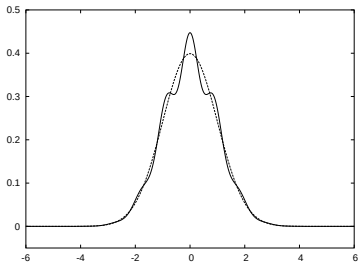
3.2b - $N = 80$ pour $f_1(v)$.



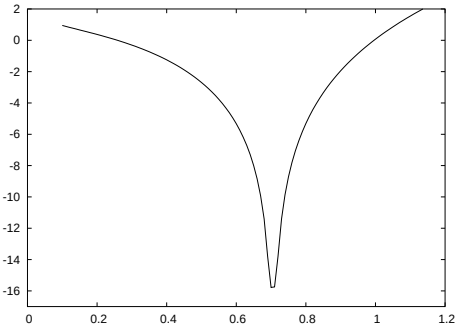
3.2c - $\alpha = 0.2$ pour $f_1(v)$.



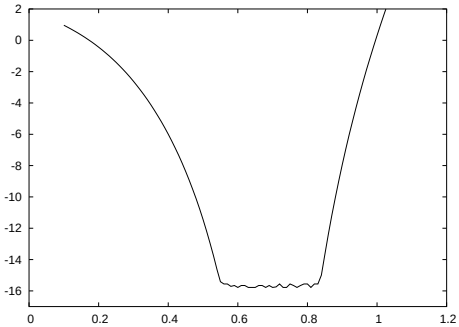
3.2d - $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour $f_1(v)$.



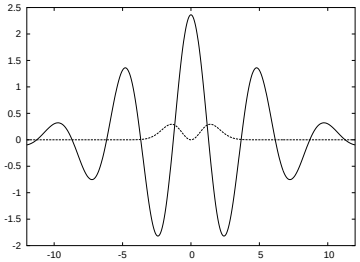
3.2e - $\alpha = 1$ pour $f_1(v)$.



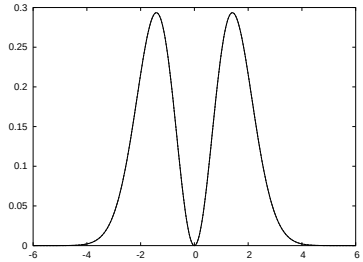
3.2f - $N = 20$ pour $f_2(v)$.



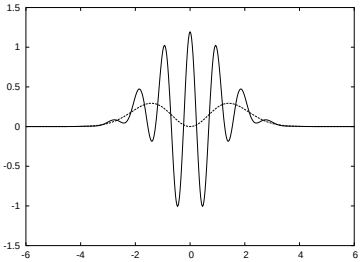
3.2g - $N = 80$ pour $f_2(v)$.



3.2h - $\alpha = 0.2$ pour $f_2(v)$.

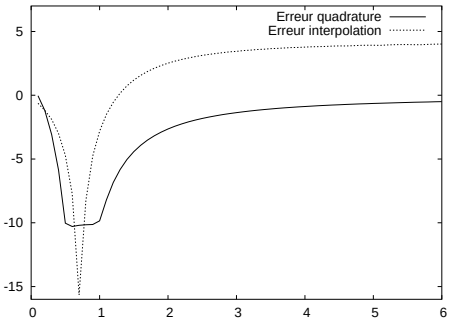


3.2i - $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour $f_2(v)$.

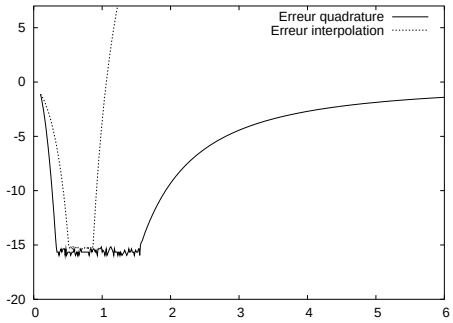


3.2j - $\alpha = 1$ pour $f_2(v)$.

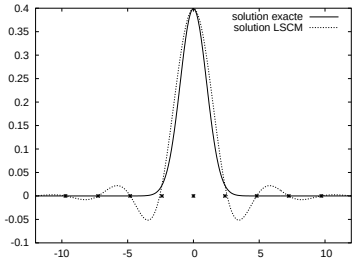
FIG. 3.2 – *Méthode SGM. Estimation de l'erreur numérique en fonction du facteur d'échelle α et fonctions approchées pour trois α différents.*



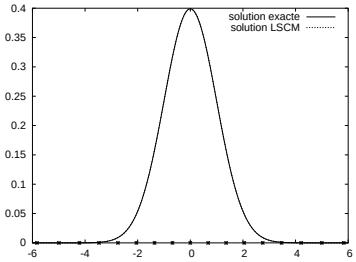
3.3a - $N = 20$ pour $f_1(v)$.



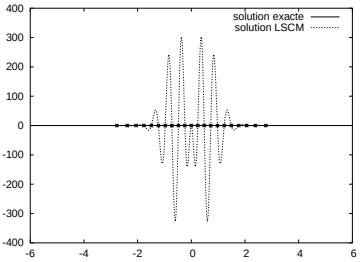
3.3b - $N = 80$ pour $f_1(v)$.



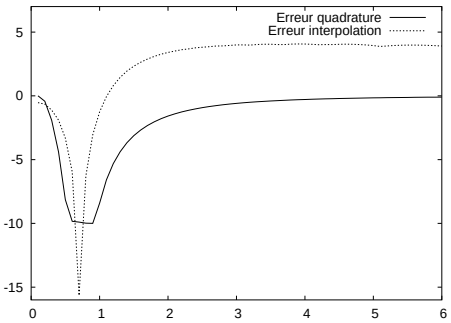
3.3c - $\alpha = 0.2$ pour $f_1(v)$.



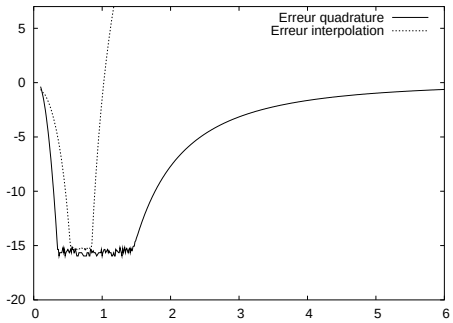
3.3d - $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour $f_1(v)$.



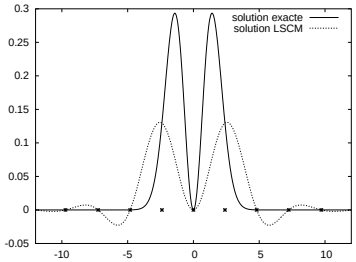
3.3e - $\alpha = 1$ pour $f_1(v)$.



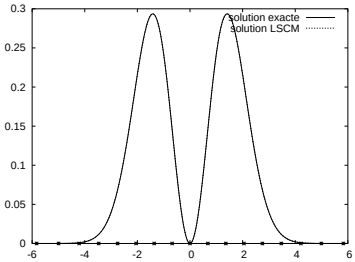
3.3f - $N = 20$ pour $f_2(v)$.



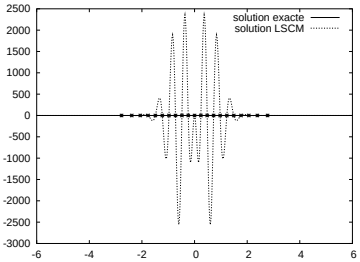
3.3g - $N = 80$ pour $f_2(v)$.



3.3h - $\alpha = 0.2$ pour $f_2(v)$.



3.3i - $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour $f_2(v)$.



3.3j - $\alpha = 2$ pour $f_2(v)$.

FIG. 3.3 – *Méthode LSGM. Estimation de l'erreur numérique en fonction du facteur d'échelle α et fonctions approchées pour trois α différents.*

$$\alpha = \max_{i=0...N} \xi_i = \frac{\xi_N}{K}, \quad K > 0, \tag{3.93}$$

où le choix du dénominateur K est détaillé dans l'analyse des courbes du comportement de l'erreur ci-dessous.

Comportement des erreurs d'interpolation et de quadrature

Comme précédement, on peut voir sur les courbes d'erreur d'interpolation (en traits pleins) et d'erreur de quadrature (en pointillés), figures 3.4a, 3.4b, 3.4f, 3.4g, que le choix du α joue un rôle considérable dans l'efficacité de la méthode. Ansi, il existe un intervalle de valeurs α pour lesquelles la méthode est très précise. On peut remarquer que, contrairement à ce que l'on obtenait avec la méthode SGM, la taille de l'intervalle ne varie pas avec le nombre de points de collocation. Les résultats numériques montrent que le choix optimal pour K dépend de N. Ainsi, pour $N = 20$, $K = 6$ est un bon choix, tandis que pour $N = 80$, le choix $K = 10$ apporterait de meilleurs résultats. De manière générale, pour $K = 6$ la précision de la méthode est très élevée, on peut donc fixer la valeur du K optimal à

$$K_{opt} = 6. \tag{3.94}$$

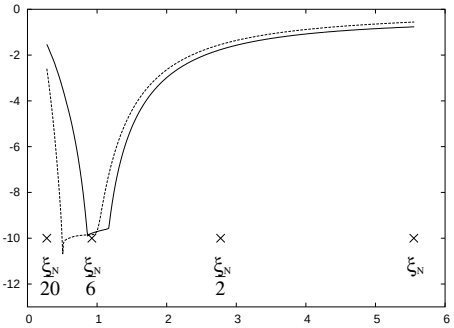
Comportement des fonctions approchées

On peut faire ici des commentaires comparables à ceux des paragraphes précédents pour SGM et LSCM. Pour $K = K_{opt}$ (figures 3.4d et 3.4i), le procédé d'interpolation donne de très bons résultats. Pour des K supérieurs à K_{opt} (figures 3.4c et 3.4h) des oscillations apparaissent, avec une perte de positivité de la fonction. On peut interpréter ces oscillations comme un phénomène de Gibbs. Pour des K plus petits que K_{opt} (figures 3.4e et 3.4j), la forme de la distribution est assez bien reproduite. On peut comprendre ces résultats en regardant la position, dépendant du facteur d'échelle α, des points de collocation. En effet lorsque $K < K_{opt}$, ces points ne recouvrent pas bien le support de la fonction, ainsi des informations sont perdues et la fonction est mal reproduite au bord de son support.

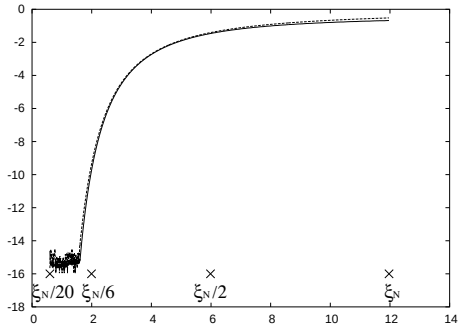
Pour les trois méthodes, nous avons déterminé le facteur d'échelle optimal :

$$\begin{cases} \alpha_{opt-SGM} &= 1/\sqrt{2}, \\ \alpha_{opt-LSCM} &= 1/\sqrt{2}, \\ \alpha_{opt-HSCM} &= \xi_N/6, \end{cases} \tag{3.95}$$

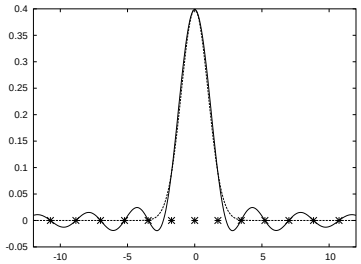
L'utilisation d'un facteur d'échelle adapté est particulièrement intéressante pour réduire la complexité algorithmique d'un problème à une précision donnée. Cela permet ainsi de diminuer très fortement les temps de calcul de la méthode numérique.



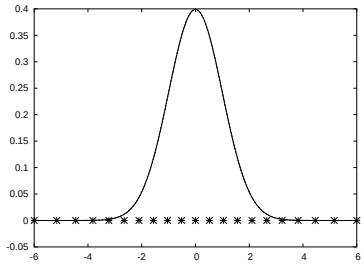
3.4a - $N = 20$ pour $f_1(v)$.



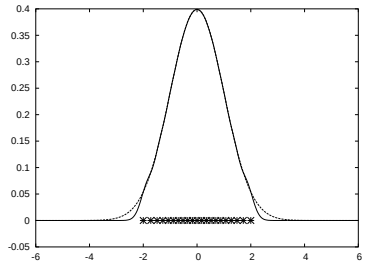
3.4b - $N = 80$ pour $f_1(v)$.



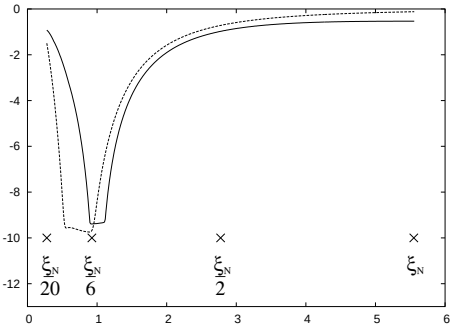
3.4c - $\alpha = \xi_N/20$ pour $f_1(v)$.



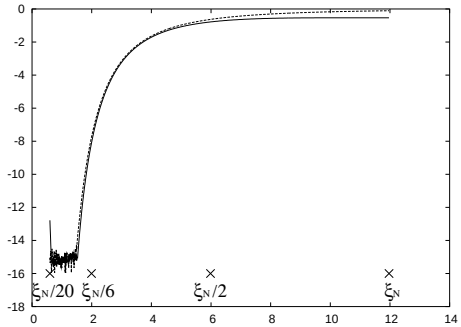
3.4d - $\alpha = \xi_N/6$ pour $f_1(v)$.



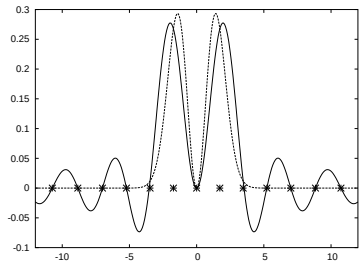
3.4e - $\alpha = \xi_N/2$ pour $f_1(v)$.



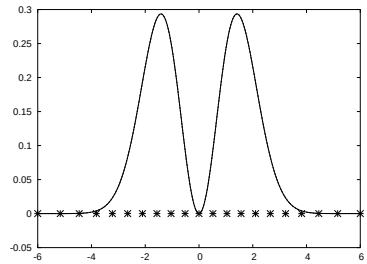
3.4f - $N = 20$ pour $f_2(v)$.



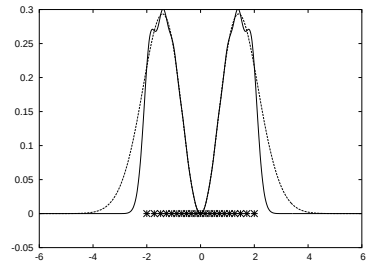
3.4g - $N = 80$ pour $f_2(v)$.



3.4h - $\alpha = \xi_N/20$ pour $f_2(v)$.



3.4i - $\alpha = \xi_N/6$ pour $f_2(v)$.



3.4j - $\alpha = \xi_N/2$ pour $f_2(v)$.

FIG. 3.4 – *Méthode HSCM. Estimation de l'erreur numérique en fonction du facteur d'échelle α et fonctions approchées pour trois α différents.*

Chapitre 4

Application au système de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv

Dans un plasma sans champ magnétique, le système des équations de Vlasov-Maxwell se réduit au système de Vlasov-Poisson. On ne considère ici qu'une seule espèce classique de particules en mouvement : les électrons. Les ions présents dans le plasma ont une densité constante en temps et en espace et forment ainsi un fond électriquement neutralisant.

Après avoir rappelé les équations du système adimensionné de Vlasov-Poisson 1Dx-1dv, nous détaillerons les calculs de discrétisation en vitesse de l'équation de Vlasov à partir des trois méthodes spectrales présentées au chapitre précédent. Puis nous présenterons un schéma de *splitting* d'ordre deux en temps, quelques schémas pour résoudre numériquement l'équation d'advection et un schéma de discrétisation pour les équations de Poisson. Enfin, nous verrons une technique de gain en performance des algorithmes à l'aide d'une méthode de *subcycling* temporel.

I Le système de Vlasov Poisson

Soit $\Omega \in \mathbb{R}$ un domaine spatial. Le système adimensionné de Vlasov-Poisson 1Dx-1Dv s'écrit pour $(x, v, t) \in \Omega \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{\partial}{\partial t} f(x,v,t) & + & v \dfrac{\partial}{\partial x} f(x,v,t) + E(x,t) \dfrac{\partial}{\partial v} f(x,v,t) = 0, \\ E(x,t) & = & -\dfrac{\partial}{\partial x} \phi(x,t), \\ -\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) & = & \rho(x,t) - 1, \end{array} \right. \tag{4.1}$$

où $E(x,t)$ désigne le champ électrique et $\rho(x,t) = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} f(x,v,t)\, dv$ est la densité de charge.

Le système (4.1) est adimensionné de la manière suivante : l'unité en temps est l'inverse de la pulsation plasma $\omega_p^{-1} = \sqrt{(m\epsilon_0)/(n_e e^2)}$, l'unité en espace est la longueur de Debye λ_d (2.37) et les vitesses sont exprimées en unité de vitesse thermique $v_{th} = \sqrt{2K_B/m}$, où l'on a noté :

- m la masse de l'électron,
- ϵ_0 la permittivité du vide,
- n_e la densité des électrons,
- e la charge élémentaire,
- K_B la constante de Bolzmann.

Dans ce problème simplifié, le plasma est périodique de période L. On travaille donc sur l'intervalle $\Omega = [0, L]$ et les fonctions E, ϕ et f satisfont les conditions suivantes de périodicité aux bords du domaine :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} f(0,v,t) & = & f(L,v,t), & v \in \mathbb{R},\ t \geq 0, \\ E(0,t) & = & E(L,t), & t \geq 0, \\ \phi(0,t) & = & \phi(L,t) = 0, & t \geq 0. \end{array} \right. \tag{4.2}$$

En supposant que la condition initiale,

$$f(x,v,0) = f^0(x,v), \tag{4.3}$$

est assez régulière, le problème (4.1)-(4.2)-(4.3) est bien posé (Wollman-Ozizmir [131]).

II Discrétisation en vitesse

II.1 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode SGM

L'application de la méthode SGM, définie au chapitre 3-paragraphe II, à l'équation de Vlasov 1Dx-1Dv revient à développer la fonction de distribution f sur la base de fonctions de Hermite $(\tilde{H}_n(v))_n$,

$$f(x,v,t) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x,t)\tilde{H}_n(v). \tag{4.4}$$

En insérant l'expression (4.4) dans l'équation de Vlasov et en appliquant les formules de récurrence (Propriété I.3-chapitre 3), on obtient par identification les égalités suivantes :

$$
\begin{aligned}
\bullet\ \frac{\partial}{\partial t}f(x,v,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}f_n(x,t)\tilde{H}_n(v),\\
\bullet\ v\frac{\partial}{\partial x}f(x,v,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}f_n(x,t)v\tilde{H}_n(v)\\
&= \frac{1}{\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}f_n(x,t)\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\tilde{H}_{n+1}(v)+\sqrt{\frac{n}{2}}\tilde{H}_{n-1}(v)\right]\\
&= \frac{1}{\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\frac{\partial}{\partial x}f_{n-1}(x,t)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\frac{\partial}{\partial x}f_{n+1}(x,t)\right]\tilde{H}_n(v),\\
\bullet\ E(x,t)\frac{\partial}{\partial v}f(x,v,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}E(x,t)f_n(x,t)\tilde{H}_n'(v)\\
&= -\alpha\sum_{n=0}^{\infty}E(x,t)f_n(x,t)\sqrt{2(n+1)}\tilde{H}_{n+1}(v)\\
&= -\alpha\sum_{n=0}^{\infty}E(x,t)f_{n-1}(x,t)\sqrt{2n}\tilde{H}_n(v).
\end{aligned}
$$

En réalisant une troncature à l'ordre N, on obtient le système suivant de $(N+1)$ équations aux dérivés partielles du premier ordre,

$$
\left\{\begin{array}{c}
\dfrac{\partial}{\partial t}f_0(x,t)+\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{1}{2}}\dfrac{\partial}{\partial x}f_1(x,t)=0,\\
\vdots\\
\dfrac{\partial}{\partial t}f_n(x,t)+\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{n}{2}}\dfrac{\partial}{\partial x}f_{n-1}(x,t)+\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\dfrac{\partial}{\partial x}f_{n+1}(x,t)\\
-\alpha\sqrt{2n}E(x,t)f_{n-1}(x,t)=0, \qquad n=1,...,N-1,\\
\vdots\\
\dfrac{\partial}{\partial t}f_N(x,t)+\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{N}{2}}\dfrac{\partial}{\partial x}f_{N-1}(x,t)-\alpha\sqrt{2N}E(x,t)f_{N-1}(x,t)=0\ .
\end{array}\right.
$$

En notant,

$$
F\equiv F(x,t)=\begin{pmatrix} f_0(x,t)\\ \vdots\\ f_N(x,t)\end{pmatrix},\quad D_G=-\alpha\begin{pmatrix} 0 & & & (0)\\ \sqrt{2\times 2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ (0) & & \sqrt{2(N+1)} & 0\end{pmatrix},
$$

et avec,

$$
R=\frac{1}{\alpha}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & & & (0)\\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \sqrt{\frac{N+1}{2}}\\ (0) & & & \sqrt{\frac{N+1}{2}} & 0\end{pmatrix},
$$

le système discret à résoudre s'écrit sous la forme matricielle,

$$\partial_t F + R\,\partial_x F + E(x,t) D_G\, F = 0. \tag{4.5}$$

Remarque II.1 *Les deux matrices mises en jeu, R et D_G, ont l'avantage d'être à la fois creuses et de ne pas dépendre du temps ; elles ne doivent être calculées qu'une seule fois au début du calcul.*

Calcul du champ E

Le champ $E(x,t)$ est calculé via les équations de Poissons qui nécessitent la donnée du second membre $\rho(x,t)$. Par la propriété d'orthogonalité des fonctions de base et avec l'égalité $\tilde{H}_0(v) = \sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 v^2}$, la méthode SGM permet d'obtenir une expression exacte de la densité de charge ρ, qui est proportionnelle au premier cœfficient spectral :

$$\rho(x,t) \equiv \int_{\mathbb{R}} f(x,v,t)\, dv = \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}} \int_{\mathbb{R}} f(x,v,t) \tilde{H}_0(v) e^{\alpha^2 v^2}\, dv = \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}} f_0(x,t). \tag{4.6}$$

II.2 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode LSCM

Dans cette partie, on applique la méthode de collocation LSCM définie au chapitre 3-paragraphe III.2 pour la discrétisation en vitesse l'équation de Vlasov 1Dx-1Dv (4.1).

L'interpolée $f^N \equiv \mathcal{I}_L^N f$ de la fonction de distribution f s'écrit de la manière suivante :

$$f(x,v,t) \approx f^N(x,v,t) = \sum_{k=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_k}{\alpha}, t\right) e^{\xi_k^2} L_k(\alpha v) e^{-\alpha^2 v^2}. \tag{4.7}$$

L'approximation de l'équation de Vlasov par la méthode LSCM, pour tout $n = 0, ..., N$, donne :

$$\partial_t f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + \frac{\xi_n}{\alpha}\, \partial_x f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + E(x,t) (\partial_v^N f)(x,v,t)|_{v=\frac{\xi_n}{\alpha}} = 0, \tag{4.8}$$

où $\partial_v^N f$ est la dérivée en vitesse de la fonction d'interpolation f^N,

$$\begin{aligned} \partial_v^N f(x,v,t)|_{v=\frac{\xi_n}{\alpha}} &= \sum_{k=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_k}{\alpha}, t\right)\ e^{\xi_k^2 - \xi_n^2}\ (\alpha L_k'(\xi_n) - 2\alpha \xi_n \delta_{kn}) \\ &= \sum_{k=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_k}{\alpha}, t\right) e^{\xi_k^2 - \xi_n^2}\, \alpha L_k'(\xi_n)\ -\ 2\alpha \xi_n\ f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right). \end{aligned}$$

Sous forme matricielle, le problème s'écrit

$$\partial_t F + C_{LC} \partial_x F + E(x,t) D_{LC} F = 0, \tag{4.9}$$

où le vecteur des inconnues est ici

$$F = \begin{pmatrix} f^N\left(x, \frac{\xi_0}{\alpha}, t\right) \\ \vdots \\ f^N\left(x, \frac{\xi_N}{\alpha}, t\right) \end{pmatrix}.$$

La matrice de convection est la matrice diagonale,

$$C_{LC} = \text{diag}\left(\frac{\xi_n}{\alpha}\right)_{n=0...N}, \tag{4.10}$$

et la matrice de dérivation D_{LC} a des éléments de la forme,

$$\begin{aligned} d_{ij}^{LC} &= \alpha\left(L_i'(\xi_i) - 2\xi_i\right), \quad \text{pour } i = j, \\ d_{ij}^{LC} &= \alpha L_j'(\xi_i) e^{\xi_j^2 - \xi_i^2}, \quad \text{pour } i \neq j. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Remarque II.2 *On observe que la matrice de dérivation D_{LC}, indépendante du temps, peut être calculée qu'une seule fois au début du "run". Quand à la matrice de convection, elle possède le double avantage d'être à la fois indépendante en temps et diagonale. Son stockage en mémoire est donc peu coûteux.*

Calcul du champ E

Le second membre de l'équation de Poisson, la densité de charge ρ, est calculé à partir de la formule de quadrature de Gauss-Hermite (3.70) :

$$\rho(x,t) = \int_{\mathbb{R}} f dv \approx \sum_{k=0}^{N} \bar{\omega}_k f^N\left(x, \frac{\xi_k}{\alpha}, t\right). \tag{4.12}$$

II.3 Discrétisation de l'équation de Vlasov avec la méthode HSCM

Dans cette partie on discrétise l'équation de Vlasov à l'aide d'une autre méthode de collocation en vitesse, basée sur des polynômes de Hermite : la méthode HSCM (chapitre 3-paragraphe III.3).

Avec cette méthode, la fonction de distribution f est approchée par son interpolée $\mathcal{I}_H^N f \equiv f^N$:

$$f(x,v,t) \approx f^N(x,v,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(x,t)\bar{H}_k(v), \tag{4.13}$$

où les cœfficients a_k sont de la forme

$$a_k(x,t) = \sum_{j=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \frac{1}{C_j}. \tag{4.14}$$

L'approximation pseudo-spectrale de l'équation de Vlasov semi-discrétisée en vitesse s'écrit alors pour $n = 0, ..., N$:

$$\partial_t f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + \frac{\xi_n}{\alpha}\partial_x f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + E(x,t)\ (\partial_v^N f)(x,v,t)|_{v=\frac{\xi_n}{\alpha}} = 0,$$

où l'on a noté $\partial_v^N f$ la dérivée par rapport à v de l'interpolée f^N :

$$\partial_v^N f(x,v,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(x,t)\bar{H}_k'(v).$$

Aux points de collocation ξ_n/α, cette dérivée partielle s'écrit pour tout $n = 0, ..., N$,

$$\partial_v^N f\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{j=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \frac{1}{C_j} \bar{H}'_k\left(\frac{\xi_n}{\alpha}\right).$$

Le problème a une forme matricielle similaire au problème discret obtenu avec la méthode de collocation LSCM :

$$\partial_t F + C_{HC}\partial_x F + E(x,t) D_{HC}\, F = 0, \tag{4.15}$$

où le vecteur des inconnues s'écrit,

$$F = \begin{pmatrix} f^N\left(x, \frac{\xi_0}{\alpha}, t\right) \\ \vdots \\ f^N\left(x, \frac{\xi_N}{\alpha}, t\right) \end{pmatrix},$$

la matrice de convection C_{HC} contient les mêmes éléments que C_{LC} (4.10),

$$C_{HC} = \operatorname{diag}\left(\frac{\xi_n}{\alpha}\right)_{n=0\ldots N}$$

et la matrice de dérivation spectrale D_{HC} contient les éléments d_{ij}^{HC},

$$\begin{aligned} d_{ij}^{HC} &= \sum_{k=0}^{N} \frac{1}{C_j} \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}'_k\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) \\ &= \frac{\alpha}{C_j} \sum_{k=1}^{N-1} \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \left[\sqrt{\frac{k}{2}} \bar{H}_{k-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \bar{H}_{k+1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right)\right] \\ &\qquad -\sqrt{\frac{1}{2}} \bar{H}_0\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_1\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) + \sqrt{\frac{N}{2}} \bar{H}_N\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_{N-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right), \end{aligned}$$

avec C_j défini en (3.84).

Les matrices de la méthode HSCM ont les mêmes caractéristiques que celles obtenues avec la méthode LSCM : elles sont indépendantes en temps et la matrice de convection est diagonale.

Comme dans la méthode LSCM, la densité de charge ρ est calculée par quadrature de Gauss-Hermite (4.12).

III Semi-discrétisation en temps

On définit un pas de temps $\Delta t > 0$ et les temps discrets $(t^j = j\Delta t)_{j\in\mathbb{N}}$. A partir d'une donnée initiale $F^0 = F^0(x) = (f_n^0(x))_{n=0,\ldots,N}$, on utilise une méthode à pas fractionnaire en temps pour résoudre les systèmes matriciels (4.5), (4.9) et (4.15).

On réécrit les trois systèmes précédents sous la forme générique,

$$\partial_t F + C\partial_x F + E(x,t) D\, F = 0, \tag{4.16}$$

où C est la matrice de convection et D la matrice de dérivation spectrale.

III.1 Deux méthodes de splitting d'ordre deux

On introduit l'opérateur $\mathcal{T}(t)$ associé au transport,

$$\mathcal{T}(t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t} \;+\; C\,\frac{\partial}{\partial x}, \tag{4.17}$$

et $\mathcal{E}_F(t)$ un opérateur d'échange spectral,

$$\mathcal{E}_F(t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t} \;+\; E(x,t)\;D. \tag{4.18}$$

En appliquant la méthode à pas fractionnaire en temps (*splitting*), présentée au chapitre 2-paragraphe III.3, on obtient une solution pour l'équation (4.16) en résolvant séparément,

$$\mathcal{T}(t)\,F \;=\; 0, \tag{4.19}$$

et

$$\mathcal{E}_F(t)\,F \;=\; 0. \tag{4.20}$$

A l'ordre deux, le splitting peut s'écrire de deux manières :

$$F(\Delta t) \approx F^{\Delta}(\Delta t) = \mathcal{E}_F(\Delta t/2)\,\mathcal{T}(\Delta t)\,\mathcal{E}_F(\Delta t/2)\,F^0, \tag{4.21}$$

ou

$$F(\Delta t) \approx F^{\Delta}(\Delta t) = \mathcal{T}(\Delta t/2)\,\mathcal{E}_F(\Delta t)\,\mathcal{T}(\Delta t/2)\,F^0. \tag{4.22}$$

Dans ces formules, l'opérateur $\mathcal{E}$ n'est pas totalement explicite car il dépend de F. Il faut alors fixer F.
A partir du vecteur de fonctions $G(x) = (g_0(x), ..., g_N(x))^T$, on définit la fonction $\bar{E}_G(x)$ telle que,

$$\bar{E}_G(x) = -\phi'(x), \tag{4.23}$$

avec ϕ solution du problème de Poisson stationnaire :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\phi''(x) & = & \sqrt{\dfrac{\sqrt{\pi}}{\alpha}}\,g_0(x) - 1, \\ \phi(0) & = & \phi(L) = 0, \\ \phi'(0) & = & \phi'(L). \end{array}\right. \tag{4.24}$$

On définit alors l'opérateur

$$\bar{\mathcal{E}}_G(t) \;=\; \frac{\partial}{\partial t} \;+ \bar{E}_G(x)\,D.$$

En notant

$$F^1 \;=\; \mathcal{T}(\Delta t)\,\bar{\mathcal{E}}_F(\Delta t/2)\,F^0$$

et

$$F^2 \;=\; \mathcal{T}(\Delta t/2)\,F^0,$$

les méthodes à pas fractionnaires (4.21) et (4.22) deviennent,

$$F^{\Delta}(\Delta t) = \bar{\mathcal{E}}_{F^1}(\Delta t/2)\,\mathcal{T}(\Delta t)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^0}(\Delta t/2)\,F^0, \tag{4.25}$$

$$F^{\Delta}(\Delta t) = \mathcal{T}(\Delta t/2)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^2}(\Delta t)\,\mathcal{T}(\Delta t/2)\,F^0. \tag{4.26}$$

On cherche alors à savoir quelle est la méthode de splitting la plus efficace pour chacune des discrétisations spectrales en vitesse. Pour cela, on doit estimer les coûts de chacune des étapes en fonction des matrices mises en jeu dans les systèmes matriciels obtenus avec les trois méthodes SGM, LSCM et HSCM.

III.2 Méthode de splitting pour SGM

D'après le théorème (I.1) du chapitre 3, la matrice de convection intervenant dans la méthode de Galerkin SGM, la matrice R, a pour valeurs propres les $\gamma_k = \xi_k/\alpha$ et pour matrices de passage les matrices P et P^{-1} dont les éléments sont respectivement donnés par :

$$\begin{aligned} P_{nk} &= \frac{C_k}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi_k) \\ (P^{-1})_{nk} &= \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} H_k(\xi_n), \end{aligned}$$

avec $C_k = 1/\left(\sum_{n=0}^{N} [H_n(\xi_k]^2/[2^n n!]\right)$. La diagonalisation de la matrice R s'écrit donc :

$$P^{-1}RP \equiv C_G \equiv \mathrm{diag}(\gamma_0, \ldots, \gamma_N), \tag{4.27}$$

et le changement de variable $\tilde{F} = P^{-1}F$ conduit au système matriciel,

$$\partial_t \tilde{F} + C_G\,\partial_x \tilde{F} = 0. \tag{4.28}$$

La solution du problème de transport,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mathcal{T}(t)F &=& 0, \quad t > 0, \\ F(0) &=& F^0 \end{array} \right. \tag{4.29}$$

est alors donnée par,

$$F(x,t) = U\ \left[\left(U^{-1}F^0\right)_k (x - \xi_k t)\right]_k,\ k = 0, ..., N, \quad t > 0. \tag{4.30}$$

Pour un x fixé, le problème d'échange spectral

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \bar{\mathcal{E}}_F(t)F(x) &=& 0, \qquad t > 0, \\ F(x,0) &=& F^0(x) \end{array} \right. \tag{4.31}$$

est bien posé et sa solution maximale est donnée par,

$$F(x,t) = \exp\left[\alpha E^0(x) D t\right]\ F^0(x). \tag{4.32}$$

Dans cette méthode, la matrice $D \equiv D_G$ est nilpotente, il est donc facile de calculer son exponentielle.

Ainsi, nécessitant des changements de variables, l'étape de transport est coûteuse ; quand à l'étape d'échange spectral, elle est explicite et nécessite peu d'opérations car la matrice D_G est creuse. On en déduit que le splitting (4.25) est le plus efficace pour la méthode SGM .

III.3 Méthode de splitting pour LSCM et HSCM

Pour les méthodes de collocation LSCM et HSCM, il semble intéressant de choisir le splitting (4.26). En effet, dans ces méthodes, l'opérateur discret d'advection est déjà diagonal et demande donc un nombre peu important d'opérations. De plus, la matrice de dérivation intervenant dans l'étape d'échange spectral étant pleine, on ne peut pas calculer explicitement son exponentielle. On utilise alors un schéma de Runge-Kutta d'ordre quatre (RK4) pour résoudre le problème (4.31) écrit aux points de la grille spatiale.

IV Discrétisation spatiale

On cherche un schéma de discrétisation spatiale pour la résolution numérique de l'étape de transport. Pour les trois méthodes de discrétisation en vitesse, la matrice mise en jeu dans cette étape est soit diagonale soit diagonalisée. Les éléments de la diagonale étant les zéros du polynôme de Hermite de degré $N+1$ divisés par le facteur d'échelle α, on en déduit que les équations du système de l'étape de transport sont de la forme :

$$\partial_t f + \gamma \partial_x f = 0, \tag{4.33}$$

où $\gamma \in \left\{\frac{\xi_0}{\alpha}, ..., \frac{\xi_N}{\alpha}\right\}$.

IV.1 Méthode de Galerkin discontinue *VL3*

Dans [84], Mangeney *et al.* mettent en œuvre un schéma de discrétisation spatiale d'ordre trois pour résoudre numériquement l'équation d'advection (4.33). Le schéma, appelé *VL3*, est construit à partir d'une méthode de Galerkin discontinue. De plus en plus utilisées, les méthodes de Galerkin discontinues sont à mi-chemin entre les éléments finis et les volumes finis : elles utilisent une représentation polynômiale des inconnues comme la méthode des éléments finis et les flux sont évalués entre deux cellules voisines comme en volumes finis.

On considère la grille $(x_i)_{i\in\mathbb{Z}}$ à pas constants h tels que $x_i = ih$. A chaque points de la grille x_i est associée une cellule de calcul $C_i =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$ avec $x_{i+\frac{1}{2}} = (i+\frac{1}{2})h$.

L'équation à résoudre (4.33) correspond à la translation de la distribution initiale $f^0(x)$, que l'on peut écrire :

$$T^t f^0(x) = e^{\Lambda t} f^0(x) = f^0(x - \gamma t), \tag{4.34}$$

où Λ est l'opérateur de déplacement défini par

$$\Lambda \equiv \frac{\partial}{\partial t} = -\gamma \frac{\partial}{\partial x}.$$

A partir de la donnée initiale $f^0 \in L^1(\mathbb{R})$, on construit une suite d'éléments $(f_i^0)_i$ tels que,

$$f_i^0 \;=\; \int_{C_i} f^0(x)\, dx. \tag{4.35}$$

Le principe de la méthode *VL3* est le suivant. A partir des éléments $(f_i^j)_{i\in\mathbb{Z},j\in\mathbb{N}}$ à l'instant t^j, on cherche à calculer (f_i^{j+1}) à l'instant $t^{j+1} = t^j + \Delta t$. Le champ $f^j(x)$ est reconstruit à l'instant t^j puis transporté. La reconstruction polynômiale par morceaux utilisée est précise à l'ordre trois et est basée sur la projection sur des espaces de dimension finie de fonctions polynômiales discontinues par morceaux. Les solutions du problème de transport sont alors appliquées au champ reconstruit $f^j(x)$.

On considère le problème périodique :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \partial_t f + \gamma\, \partial_x f & = & 0, & x \in \Omega \equiv]0, L[,\ t > 0, \\ f(0,t) & = & f(L,t), & t > 0, \end{array} \right. \tag{4.36}$$

où $\gamma \in \mathbb{R}$.

Pour approcher ce problème avec la méthode de Galerkin, on introduit comme espaces d'approximation, les espaces V_{IL} de fonctions polynômiales par morceaux.

Soient les fonctions polynômiales par morceaux suivantes :

$$\phi_{il}(x) = H_i(x) P_l \left(\frac{2(x - x_i)}{\Delta x} \right), \quad x \in C_i, \tag{4.37}$$

où les P_l sont les polynômes de Legendre, orthogonaux sur $[-1, 1]$,

$$P_l(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}} 2^l l!\, \frac{d^l}{dx^l}(x^2 - 1)^l, \tag{4.38}$$

et les $H_i(x)$ sont les fonctions caractéristiques sur une cellule C_i :

$$H_i(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & \text{sur } C_i, \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{array} \right. \tag{4.39}$$

Les $\phi_{il}(x)$ forment une base orthogonale de V_{IL} pour le produit scalaire de $L^2(\Omega)$.

On cherche une solution approchée du problème (4.36) dans l'espace d'approximation V_{IL}. On peut donc écrire cette solution sous la forme :

$$f(x,t) \approx \tilde{f}(x,t) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l=1}^{L} a_{il}(t)\ \phi_{il}(x). \tag{4.40}$$

Soit $\tilde{g} \in V_{IL}$, on définit les cœfficients b_{il} par : $\tilde{g}(x) = \sum_{i,l} b_{il}\phi_{il}(x)$. Le produit scalaire de L^2 est noté $(.,.)$ et sa norme associée $\|.\|$. A partir des égalités suivantes :

$$(\tilde{f}, \tilde{g}) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l=0}^{L} c_l^2 b_{il} a_{il}$$

et

$$\|\tilde{f}\|^2 = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l=0}^{L} c_l^2 a_{il}^2,$$

où

$$c_l^2 = (\phi_{il}, \phi_{il}) = \int_{C_i} P_l^2 \left(\frac{2(x - x_i)}{\Delta x} \right) dx = \frac{\Delta x}{2} \int_{-1}^{1} P_l^2(\xi) d\xi = \frac{\Delta x}{2l+1},$$

on obtient une expression des cœfficients de (4.40) :

$$a_{il}(t) = \frac{2}{\Delta c_l^2} \int_{C_i} \phi_{il}(x) \tilde{f}(x,t) dx = \frac{1}{c^2} \int_{-1}^{1} P_l(\xi) \tilde{f} \left(x_i + \frac{\Delta x}{2} \xi, t \right) d\xi.$$

En prenant les $\phi_{il}(x)$ comme fonctions tests, la formulation variationnelle du problème approché de (4.36) est donnée par,

$$\int \partial_t \tilde{f}(x,t) \phi_{il}(x) \, dx + \gamma \int \partial_x \tilde{f}(x,t) \phi_{il}(x) \, dx = 0,$$

qui s'écrit également,

$$\sum_{i',l'} \left[\frac{\partial}{\partial t} a_{i'l'}(t) (\phi_{il}, \phi_{i'l'}) + \gamma \, a_{i'l'}(t) \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_{il}, \phi_{i'l'} \right) \right] = 0.$$

Du problème discrétisé en espace et en temps, on déduit une expression pour les cœfficients a_{il} à l'instant t^{j+1} :

$$\begin{aligned} a_{il}(t^{j+1}) &= \frac{1}{c_l^2} \int \phi_{il}(x) \tilde{f}(x, t^{j+1}) dx \\ &= \frac{2l+1}{\Delta x} \int \phi_{il}(x) e^{\Lambda t} \tilde{f}(x, t^j) dx \\ &= \sum_{p,k} A_{pk}^{il} a_{pk}(t^j), \end{aligned}$$

où les A_{pk}^{il} sont les cœfficients de la matrice de projection de l'opérateur $e^{\Lambda t}$. Dans cette matrice, l prend seulement les valeurs suivantes :

$$l = i \text{ ou } i-1 \text{ pour } \gamma \geq 0,$$

$$l = i \text{ ou } i+1 \text{ pour } \gamma < 0.$$

On obtient alors pour $\gamma \geq 0$:

$$\tilde{f}(x_i, t^{j+1}) = \sum_{k=-K+1}^{K} A_k(\delta) \tilde{f}(x_{i+k}, t^j), \tag{4.41}$$

et pour $\gamma < 0$:

$$\tilde{f}(x_i, t^{j+1}) = \sum_{k=-K}^{K+1} A_k(\delta) \tilde{f}(x_{i-k}, t^j), \tag{4.42}$$

où l'on a noté : $\delta = |\gamma| \Delta t / \Delta x$.

L'ordre trois est obtenu quand on prend des polynômes de Legendre de degré inférieur ou égal à $L = 2$. Ainsi, avec $L = 2$ et $\gamma \geq 0$, sur chaque cellule C_i pour $i \in \{3, \ldots, I-1\}$, on a :

$$\tilde{f}(x_i, t^{j+1}) = A_{-3}\ \tilde{f}(x_{i-3}, t^j) + A_{-2}\ \tilde{f}(x_{i-2}, t^j) + A_{-1}\ \tilde{f}(x_{i-1}, t^j) + A_0\ \tilde{f}(x_i, t^j) + A_1\ \tilde{f}(x_{i+1}, t^j) + A_2\ \tilde{f}(x_{i+2}, t^j),$$

et le système matriciel à résoudre est le suivant :

$$\begin{pmatrix} \tilde{f}(x_1, t^{j+1}) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \tilde{f}(x_I, t^{j+1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0 & A_1 & A_2 & & & A_{-1} & A_{-2} & A_{-3} \\ A_{-1} & \ddots & \ddots & \ddots & & & A_{-1} & A_{-2} \\ A_{-2} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & A_{-1} \\ A_{-3} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ A_2 & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & A_1 \\ A_1 & A_2 & & & A_{-3} & A_{-2} & A_{-1} & A_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{f}(x_1, t^j) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \tilde{f}(x_I, t^j) \end{pmatrix}.$$

Les conditions périodiques aux bords font apparaître des éléments extra-diagonaux dans la matrice.

Grâce aux propriétés de symétrie de la méthode, on en déduit la solution dans le cas $\gamma < 0$:

$$\begin{cases} c_l^2\, A_{ik}^{il}(\gamma < 0) &=& c_k^2\, A_{il}^{ik}(\gamma \geq 0), \\ c_l^2\, A_{i+1\ k}^{il}(\gamma < 0) &=& c_k^2\, A_{i-1\ l}^{ik}(\gamma \geq 0). \end{cases}$$

Ce schéma explicite nécessite une condition restrictive sur le pas de temps de type Courant-Friedrichs-Lewy (condition CFL) pour être stable. Sur un maillage uniforme, cette condition s'écrit :

$$|\gamma| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{4.43}$$

IV.2 Autres schémas possibles

Dans cette partie, deux schémas explicites de différences finies bien connus pour la résolution de l'équation d'advection, sont rappelés : le schéma "upwind" et le schéma de Lax-Wendroff. Nous comparerons au chapitre suivant les résultats obtenus avec ces deux schémas et ceux obtenus avec la méthode *VL3*.

Schéma upwind

Le schéma "upwind" est un schéma décentré qui, avec la notation $f_i^n = f(x_i, t^n)$, s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \gamma \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x} &= 0, \quad \text{si} \quad \gamma > 0, \\ \frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \gamma \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{\Delta x} &= 0, \quad \text{si} \quad \gamma \leq 0. \end{aligned} \tag{4.44}$$

Le schéma upwind est d'ordre un en espace et stable sous la condition CFL,

$$|\gamma|\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{4.45}$$

Schéma de Lax-Wendroff

Le schéma de Lax-Wendroff est le schéma centré,

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \gamma \frac{\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0, \tag{4.46}$$

avec les variables de flux $\phi_{i+1/2}^n$, définies aux points $x_i + \Delta x/2$, par

$$\phi_{i+1/2}^n = \frac{f_i^n + f_{i+1}^n}{2} - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2}. \tag{4.47}$$

Le schéma de Lax-Wendroff, d'ordre deux en espace et en temps, est stable sous la condition CFL,

$$|\gamma|\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{4.48}$$

Les méthodes de discrétisation en vitesse, en espace et en temps présentées permettent de résoudre complètement l'équation de Vlasov 1Dx-1Dv sur une itération en temps. Une fois la fonction de distribution approchée connue, on doit résoudre l'équation de Poisson pour obtenir la valeur du champ électrique $E(x,t)$.

V Discrétisation de l'équation de Poisson

La discrétisation spatiale de l'équation de Poisson est réalisée à l'aide d'une méthode d'éléments finis $\mathbb{P}_1$. On rappelle que $\mathbb{P}_1$ est l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à un.

L'équation de Poisson normalisée,

$$E(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\phi(x,t), \tag{4.49}$$

est associée au problème elliptique, avec des conditions de Dirichlet homogènes aux bords, suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,t) & = & \rho(x,t) - 1, & x \in \Omega \equiv]0, L[,\ t > 0, \\ \phi(0,t) & = & \phi(L,t) = 0. & \end{array} \right. \tag{4.50}$$

où ϕ est un potentiel électrique. La densité de charge $\rho(x,t)$ est obtenue par quadrature de Gauss dans le cas des méthodes de collocation pour la discrétisation en vitesse de l'équation de Vlasov (4.12) et est donnée explicitement à partir des cœfficients spectraux pour la méthode de Galerkin (4.6).

On note $\phi^j(x)$ les valeurs de la solution $\phi(x,t)$ aux instants $t^j = j\Delta t$ de la grille de discrétisation temporelle et on introduit les espaces variationnels suivants :

$$H^1(\Omega) = \left\{\phi \in L^2(\Omega) \text{ tel que } \phi'(x) \in L^2(\Omega)\right\},$$
$$H_0^1(\Omega) = \left\{\phi \in H^1(\Omega) \text{ tel que } \phi(0) = \phi(L) = 0\right\}.$$

La formulation variationnelle du problème (4.50) s'écrit : trouver $\phi^j(x) \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$-\int_\Omega \frac{d^2}{dx^2}\phi^j(x)\psi(x)dx \;=\; \int_\Omega \left(\rho_N(x,t^j) - 1\right)\,\psi(x)dx, \qquad \forall \psi \in H_0^1(\Omega). \tag{4.51}$$

Par une intégration par partie du membre de droite de (4.51), on obtient :

$$\int_\Omega \frac{d}{dx}\phi^j(x)\frac{d}{dx}\psi(x)dx \;=\; \int_\Omega \left(\rho_N(x,t^j) - 1\right)\,\psi(x)dx, \quad \forall \psi \in H_0^1(\Omega). \tag{4.52}$$

Soit H_h l'espace d'approximation,

$$H_h = \left\{\phi \in C^0(\Omega) \text{ tel que } \forall x \in [x_i, x_{i+1}]\ \phi(x) \in \mathbb{P}^1\right\},$$

et V_h l'espace de fonctions tests,

$$V_h = \left\{\phi \in H_h \text{ tel que } \phi(0) = \phi(L) = 0\right\}.$$

A partir de (4.52), on écrit la formulation variationnelle discrète : trouver $\phi_h^j(x) \in V_h$ tel que

$$\int_\Omega \frac{d}{dx}\phi_h^j(x)\frac{d}{dx}\psi(x)dx = \int_\Omega \left(\rho_N(x,t^j) - 1\right)\psi(x)dx, \qquad \forall \psi \in V_h(\Omega). \tag{4.53}$$

La décomposition de $\phi_h^j(x)$ sur une base de H_h, la base des fonctions chapeaux $(w^i(x))_{i=1...I}$ telles que,

$$w^i(x_k) = \delta_{ik}, \quad k = 1...I,$$

donne,

$$\phi_h^j(x) = \sum_{i=1}^{I} \phi_i^j w^i(x).$$

La formulation variationnelle discrète (4.53) étant linéaire par rapport à $\psi \in V_h$, il suffit de prendre successivement $\psi = w^k, \quad k = 1...I$ pour s'assurer que l'équation est vérifiée pour tout $\psi \in V_h$. On obtient alors le problème discret,

$$\sum_{i=1}^{I} \phi_i^j \int_\Omega \frac{d}{dx}w^i(x)\frac{d}{dx}w^k(x)dx = \int_\Omega \left(\rho_N(x,t^j) - 1\right) w^k(x)dx, \qquad \forall k = 1...I. \tag{4.54}$$

Ces équations forment un système linéaire de dimension I, qui s'écrit sous forme matricielle,

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^j \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi_I^j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -h^2(\rho_N(x_1,t^j) - 1) \\ \vdots \\ \vdots \\ -h^2(\rho_N(x_I,t^j) - 1) \end{pmatrix}. \tag{4.55}$$

Les inconnues ϕ_i^j du problème (4.54) sont obtenues en inversant le système linéaire (4.55).

Remarque V.1 *Pour le calcul du second membre, on a fait l'approximation suivante : sur l'intervalle* $[x_{k-1}, x_{k+1}]$ *toute la masse de* $\rho_N(., t^j)$ *est concentrée en* x_k*. Ainsi, pour tout* $k = 1...I$*,*

$$\int_\Omega \left(\rho_N(x, t^j) - 1\right) w^k(x) dx = \left(\rho_N(x_k, t^j) - 1\right) \int_\Omega w^k(x) dx = h \left(\rho_N(x_k, t^j) - 1\right).$$

On déduit, des calculs précédents et de l'équation de Poisson (4.49), des valeurs approchées $E(x_i, t^j)$ du champ électrique aux points du maillage spatio-temporel. Le système de Poisson en dimension un est ainsi complètement résolu.

VI Optimisation : Méthode de subcycling

VI.1 Principe de la méthode de subcycling

Une méthode de subcycling est proposée dans cette thèse. Elle permet d'accélérer le temps d'exécution d'un code en relaxant la condition CFL sur différentes classes de vitesses.

Le principe de cette méthode est le suivant. Si l'on décompose un opérateur L en une somme des deux opérateurs,

$$L = A + B, \tag{4.56}$$

où les opérateurs A et B n'ont pas les mêmes conditions CFL, on est généralement contraint à choisir un pas de temps qui satisfait la condition CFL la plus exigeante, c'est à dire le pas de temps le plus petit. Ainsi, si l'opérateur A nécessite un pas de temps Δt_A plus petit que celui utile à l'opérateur B,

$$\Delta t_{Amax} < \Delta t_{Bmax}, \tag{4.57}$$

le pas de temps choisi est,

$$\Delta t_{non-opt} = \Delta t_{Amax}, \tag{4.58}$$

et le schéma s'écrit,

$$u^{j+1} = A(\Delta t_{Amax})\, B(\Delta t_{Amax})\, u^j$$

La méthode de subcycling permet de relaxer la contrainte CFL de l'opérateur A et de choisir ainsi le pas de temps le plus grand,

$$\Delta t_{sub} = \Delta t_{Bmax}. \tag{4.59}$$

Pour cela, un nombre entier de sous-cycles N_{sub} de l'opérateur A est réalisé de manière à ce que la condition CFL de l'opérateur A soit toujours satisfaite. On calcule le pas de temps Δt_{Asub} ainsi que le nombre de cycles N_{sub} tel que Δt_{Asub} soit le plus grand pas de temps vérifiant,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} N_{sub}\Delta t_A & = & \Delta t_{Bmax}, \\ \Delta t_A & \leq & \Delta t_{Amax}. \end{array} \right. \tag{4.60}$$

Le schéma s'écrit alors,

$$u^{j+1} = \underbrace{A(\Delta t_{Asub})...A(\Delta t_{Asub})}_{N_{sub} \text{ fois}}\ B(\Delta t_{Bmax})\, u^j.$$

On définit *speed-up* le rapport,

$$s = \frac{\text{temps du calcul sans subcycling}}{\text{temps du calcul avec subcycling}}. \tag{4.61}$$

Afin d'évaluer le speed-up du subcycling, on suppose que les nombres de courant des opérateurs A et B sont tels que l'on puisse trouver un entier N_{sub} vérifiant,

$$N_{sub}\,\Delta t_{Amax} = \Delta t_{Bmax}.$$

On note t_A le temps d'intégration de l'opérateur discret A et t_B celui de B. Si l'on veut calculer l'algorithme jusqu'à l'instant $t = \Delta t_{Bmax}$, on doit, dans le cas non optimisé, réaliser N_{sub} itérations de la forme,

$$\underbrace{A(\Delta t_{Amax})B(\Delta t_{Amax})\,...\,A(\Delta t_{Amax})B(\Delta t_{Amax})}_{N_{sub}\text{ fois}}.$$

Tandis que, dans le cas où l'on applique la méthode de subcycling, on doit réaliser une seule itération de la forme,

$$\underbrace{A(\Delta t_{Amax})...A(\Delta t_{Amax})}_{N_{sub}\text{ fois}}\ B(\Delta t_{Bmax}).$$

La formule du speed-up (4.61) s'écrit alors,

$$s = \frac{N_{sub}\,(t_A + t_B)}{N_{sub}\,t_A + t_B} = 1 + \frac{(N_{sub} - 1)\,t_B}{N_{sub}\,t_A + t_B}. \tag{4.62}$$

Ainsi la méthode de subcycling est d'autant plus intéressante à utiliser que le speed-up est grand devant un, c'est à dire dans les cas où les CFL des opérateurs A et B sont très différentes ($N_{sub} >> 1$) et où t_A, le temps d'intégration de l'opérateur A, est petit.

VI.2 Application aux algorithmes utilisés

On notera ici $\gamma_k \equiv \xi_k/\alpha$ pour tout $k = 0...N$. Pour l'étape de transport du splitting d'opérateur, on doit résoudre $N + 1$ équations d'advection dont les vitesses $\{\gamma_k\}_{k=0...N}$ sont distinctes. Chacune de ces équations doit vérifier la condition de stabilité CFL,

$$|\gamma_k|\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{4.63}$$

Sans optimisation, le pas de temps choisi pour l'étape de transport est donc naturellement,

$$\Delta t_{non-opt} = \frac{\Delta x}{\max_{k=0...N}|\gamma_k|} = \frac{\Delta x}{\gamma_N}. \tag{4.64}$$

Cette condition CFL globale, nécessaire à une seule équation ($k = N$), contraint cependant les $N + 1$ équations d'advection. On cherche donc à relaxer cette condition en

reprenant le principe du subcycling présenté au paragraphe précédent. On découpe la grille des vitesses positives en deux parties égales et on note A l'opérateur des advections dont les vitesses associées sont telles que,

$$v \in \left[-\gamma_N, -\frac{\gamma_N}{2}\right] \cup \left[\frac{\gamma_N}{2}, \gamma_N\right], \tag{4.65}$$

et B l'opérateur des advections de vitesses vérifiant,

$$-\frac{\gamma_N}{2} \leq v \leq \frac{\gamma_N}{2}. \tag{4.66}$$

La CFL associée à A est donc donnée par :

$$|\gamma_N| \frac{\Delta t_A}{\Delta x} \leq 1, \tag{4.67}$$

et celle associée à B par,

$$\frac{|\gamma_N|}{2} \frac{\Delta t_B}{\Delta x} \leq 1, \tag{4.68}$$

et l'on a,

$$\Delta t_{Bmax} = 2\Delta t_{Amax}. \tag{4.69}$$

La méthode de subcycling permet donc de choisir comme pas de temps Δt_{Bmax} en réalisant deux sous-cycles de $A(\Delta t_{Amax})$,

$$\mathcal{T}(\Delta t_{Bmax}) = A(\Delta t_{Amax})\, A(\Delta t_{Amax})\, B(\Delta t_{Bmax}), \tag{4.70}$$

où $\mathcal{T}$ est l'opérateur de transport du splitting, défini en (4.17). D'après la formule (4.62), on obtient le speed-up,

$$s = 1 + \frac{t_B}{2\, t_A + t_B}.$$

La grille formée par les $\{\gamma_k\}_{k=0\ldots N}$ est non uniforme et plus dense au centre, les ξ_k étant les zéros du polynôme de Hermite de degré $N+1$. On en déduit que le découpage choisi permet à ce que l'opérateur sous-cyclé A traîte moins d'équations d'advection que l'opérateur B. Donc les temps d'intégration des opérateurs sont tels que,

$$t_A < t_B.$$

Le speed-up vérifie alors,

$$s > 4/3. \tag{4.71}$$

Le procédé employé est itératif. En notant $A^0 \equiv A$ et $A^1 \equiv B$, à l'itération un, le subcycling permet donc d'avancer à des pas de temps égaux à $2\Delta t_{A^0}$ au lieu de Δt_{A^0} et l'on a,

$$\mathcal{T}(2\Delta t_{A^0}) = [A^0(\Delta t_{A^0})]^2\, A^1(2\Delta t_{A^0}).$$

A l'itération suivante, on découpe en deux parties égales la grille de vitesses positives $[0, \gamma_N/2]$ et l'on a des pas de temps qui valent $4\Delta t_{A^0}$ et,

$$\mathcal{T}(4\Delta t_{A^0}) = [A^0(\Delta t_{A^0})]^4\, [A^1(2\Delta t_{A^0})]^2\, A^2(4\Delta t_{A^0}),$$

où l'opérateur A^2 est l'opérateur d'advection aux vitesses $v \in [-\gamma_n/4, \gamma_N/4]$.
A l'itération j, on peut avancer aux pas de temps $2^j\Delta t_{A^0}$ et l'étape de transport devient,

$$\mathcal{T}(2^j\Delta t_{A^0}) = [A^0(\Delta t_{A^0})]^{2^j}\, [A^1(2\Delta t_{A^0})]^{2^{j-1}} \ldots\, A^j(2^j\Delta t_{A^0}). \tag{4.72}$$

Remarque VI.1 *Afin de conserver l'ordre deux en temps, il est préférable de symétriser les étapes du subcycling lorsque les opérateurs ne commutent pas. Le subcycling récursif s'écrit alors :*

$$\mathcal{T}(2^j\Delta t_{A^0}) = [A^0(\Delta t_{A^0})]^j\,[A^1(2\Delta t_{A^0})]^{j-1}\ldots A^j(2^j\Delta t_{A^0})\ldots[A^1(2\Delta t_{A^0})]^{j-1}\,[A^0(\Delta t_{A^0})]^j.$$

Dans ce travail, il n'a pas été nécessaire de symétriser le subcycling car les opérateurs A_i d'advection à vitesses constantes commutent.

Couplage avec le splitting d'ordre deux

On rappelle les formules de splitting en temps d'ordre deux utilisées respectivement pour la méthode de Galerkin et pour les méthodes de collocation,

$$\begin{aligned} F^{\Delta}(\Delta t) &= \bar{\mathcal{E}}_{F^1}(\Delta t/2)\,\mathcal{T}(\Delta t)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^0}(\Delta t/2)\,F^0, \\ F^{\Delta}(\Delta t) &= \mathcal{T}(\Delta t/2)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^2}(\Delta t)\,\mathcal{T}(\Delta t/2)\,F^0. \end{aligned}$$

On observe ici que le splitting des méthodes de collocation permet naturellement de relaxer la condition CFL car le transport est réalisé avec des pas de temps $\Delta t/2$.

Si on fait une itération du subcycling présenté, on obtient pour le splitting de SGM,

$$F^{\Delta}(\Delta t) = \bar{\mathcal{E}}_{F^1}(\Delta t/2)\,[A^0(\Delta t/2)]^2\,A^1(\Delta t)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^0}(\Delta t/2)\,F^0,$$

où le pas de temps Δt doit vérifier la CFL,

$$\frac{\gamma_N}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1\ ; \tag{4.73}$$

et pour le splitting de LSCM et HSCM,

$$F^{\Delta}(\Delta t) = [A^0(\Delta t/4)]^2\,A^1(\Delta t/2)\,\bar{\mathcal{E}}_{F^2}(\Delta t)\,[A^0(\Delta t/4)]^2\,A^1(\Delta t/2)\,F^0,$$

où Δt est tel que,

$$\frac{\gamma_N}{4}\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{4.74}$$

L'application de la méthode de subcycling est plus avantageuse dans le cas des méthodes de collocation LSCM et HSCM car l'étape de transport est peu coûteuse, la matrice étant déjà diagonale. La méthode de subcycling permet de conserver l'ordre deux du splitting en temps.

Ainsi, le splitting mis en œuvre ainsi que la méthode de subcycling utilisée augmentent de façon importante les performances des méthodes de collocation les rendant plus efficaces en termes de temps de calcul que la méthode de Galerkin.

Chapitre 5

Résultats 1Dx-1Dv

Dans ce chapitre, nous comparons les performances des trois méthodes présentées : SGM, LSCM et HSCM. On appelle désormais SGM, LSCM et HSCM la discrétisation complète de l'équation de Vlasov basée sur la méthode de discrétisation en vitesse correspondante, couplée au splitting d'ordre deux en temps et à la discrétisation de l'équation d'advection par la méthode de Galerkin discontinu d'ordre trois *VL3* (cf chapitre 4).

Différents cas tests numériques issus de la physique des plasmas sont mis en œuvre tels que les effets Landau linéaire et non linéaire, ou encore l'instabilité "two-stream". Afin de tester la robustesse des méthodes numériques employées, les tests sont réalisés aussi bien sur des temps courts, inférieurs à $50\omega_{pe}^{-1}$, où ω_{pe} est la pulsation plasma, que sur des temps longs ($t_{max} = 300\omega_{pe}^{-1}$). Pour chacun des cas tests, on précisera la validité des résultats apportés par les méthodes, d'une part quantitativement à partir des valeurs théoriques fournies par les théories linéaires et quasi-linéaires (cf chapitre 2-paragraphe II.2), et d'autre part qualitativement par rapport à la physique connue des phénomènes. On comparera également les méthodes entre elles en désignant dans chacun des cas la méthode la plus satisfaisante.

I Effet Landau linéaire

I.1 Présentation du cas test

Afin de valider les différentes méthodes numériques mises en œuvre, nous réalisons tout d'abord le cas test classique de l'effet Landau linéaire. Ce test consiste à introduire une petite perturbation dans un plasma maxwellien uniforme.

A la différence d'un code PIC, dans lequel les modes des instabilités sont excités à partir du bruit numérique, dans un code Vlasov, aucune instabilité n'est excitée si l'on ne perturbe pas les distributions sur le mode le plus instable. En notant k ce mode, les fonctions initiales des simulations sont donc choisies de la forme suivante,

$$f(x, v, t = 0) = C f_p(v)(1 + a\cos(kx)), \qquad (x, v) \in [0, L_x] \times \mathbb{R}, \tag{5.1}$$

où C est une constante de normalisation, $f_p(v)$ une fonction décrivant la distribution du plasma en vitesse et L_x est la taille de la boîte de simulation.

Dans ce cas test, la distribution initiale des particules du plasma est maxwellienne, la fonction initiale de la simulation est donc donnée par l'expression :

$$f(x,v,t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}} (1 + a\cos(kx)), \qquad (x,v) \in [0, L_x] \times \mathbb{R}, \tag{5.2}$$

où la perturbation est d'amplitude $a = 10^{-2}$, la boîte spatiale est de taille $L_x = 4\pi$ et k est le nombre d'onde du mode excité.

Les différents calculs présentés sont réalisés pour deux valeurs de k : 0.5 puis 1. Afin de tester l'influence des paramètres, on fait également varier le nombre de points en espace I et le nombre $N+1$ de polynômes (pour SGM) ou de points de collocation (pour LSCM et HSCM).

On fixe le pas de temps Δt de manière à vérifier la condition de stabilité CFL du schéma d'advection *VL3*, relaxée par la méthode de subcycling (cf le paragraphe I.4 de ce chapitre). Le facteur d'échelle α est choisi à partir de l'étude réalisée au chapitre 3-paragraphe IV. On prend donc ici, le α optimal dans le cas d'une gaussienne centrée : $\alpha_{SGM} = \alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$ et $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, où ξ_N est le plus grand point de collocation ($\xi_{60} \approx 10.25$ et $\xi_{100} \approx 13.48$).

Les résultats numériques obtenus avec les méthodes SGM, LSCM et HSCM sont présentés en figure 5.1. Ils montrent, en échelle logarithmique, l'évolution au cours du temps de l'amplitude du premier mode de Fourier du champ électrique pour trois ensembles de paramètres de simulation : dans les cas 1 et 2, on perturbe le mode $k = 0.5$ et on regarde l'influence du pas d'espace $\Delta x = L_x/I$ et du nombre de polynômes de Hermite $N+1$ sur la précision des résultats ; dans le cas 3, on perturbe le mode $k = 1$ et les paramètres I et N sont identiques au cas 1. Les paramètres des trois cas sont résumés dans le tableau 5.1.

Cas	Paramètres
1	N=100, I=120, k=0.5
2	N=60, I=100, k=0.5
3	N=100, I=120, k=1

TAB. 5.1 – *Trois différents cas de simulation réalisés pour l'effet Landau linéaire.*

I.2 Amortissement exponentiel du champ électrique

On observe pour chacune des méthodes et dans chacun des trois cas que, conformément à la théorie, le champ électrique décroît exponentiellement. On déduit des simulations les caractéristiques de l'effet Landau : le taux de décroissance γ et la pulsation des ondes ω_r.

Les résultats numériques, les valeurs du taux d'amortissement et de la pulsation des ondes excitées, sont rassemblés dans les tableaux 5.2 et 5.3. On y trouve également les

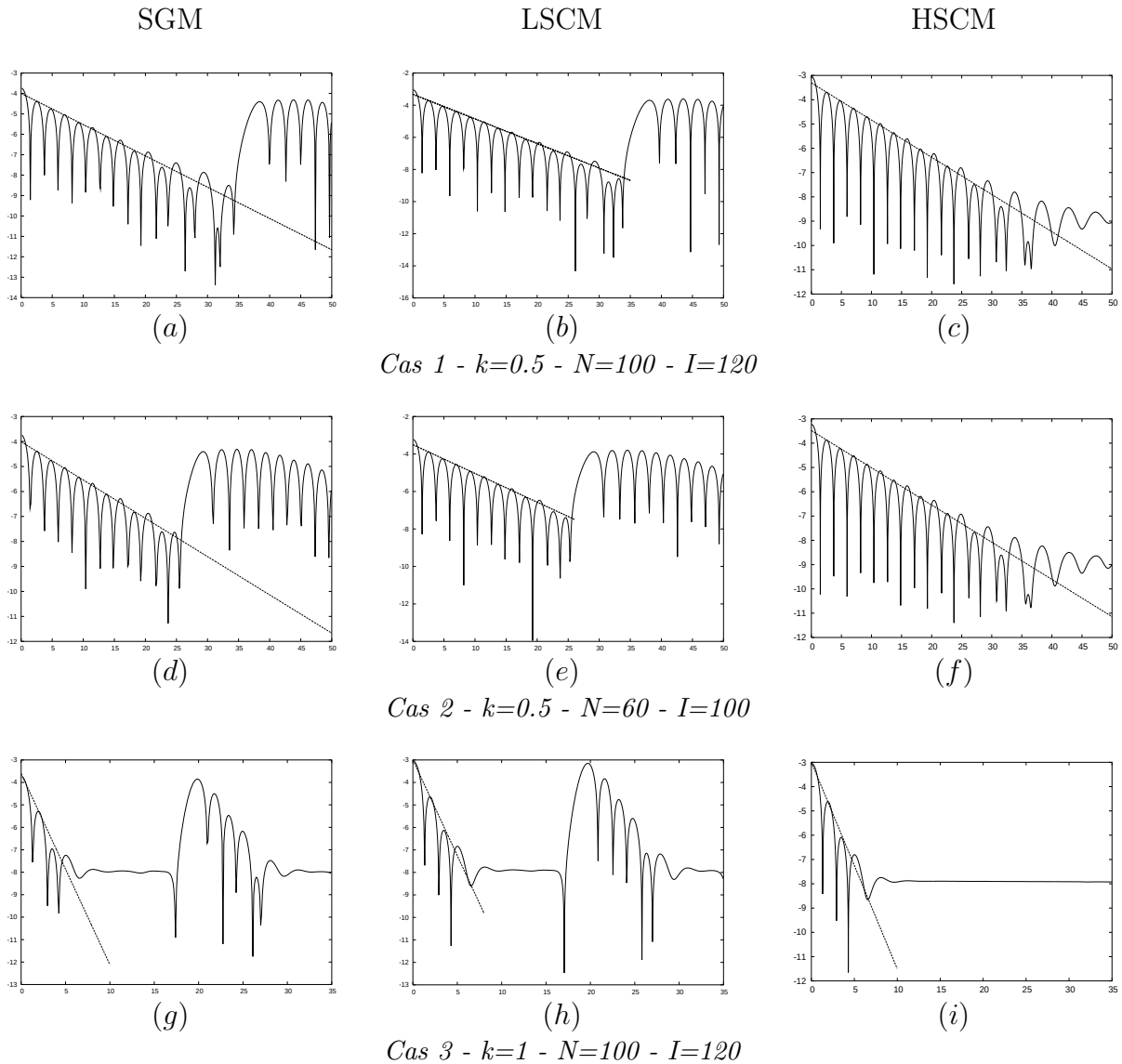


FIG. 5.1 – *Cas test de l'effet Landau linéaire. Evolution en temps du premier mode de Fourier du champ E obtenu avec les méthodes SGM, LSCM et HSCM. Les paramètres des simulations sont :* $a = 0.01$, $\alpha_{SGM} = \alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$ *et* $L_x = 4\pi$.

valeurs théoriques déduites de la résolution directe de la relation de dispersion associée à l'analyse linéaire du problème (cf chapitre 2-paragraphe II.2).

Cas	SGM	LSCM	HSCM	**Théorie linéaire**
1	-0.1522	-0.1521	-0.147	**-0.1533**
2	-0.1507	-0.1516	-0.1455	**-0.1533**
3	-0.9721	-0.9653	-0.944	**-0.8513**

TAB. 5.2 – *Taux d'amortissement des ondes électrostatiques dans l'effet Landau linéaire.*

Cas	SGM	LSCM	HSCM	**Théorie linéaire**
1	1.4081	1.4082	1.406	**1.4156**
2	1.4057	1.408	1.406	**1.4156**
3	2.0312	2.0336	2.016	**2.04**

TAB. 5.3 – *Pulsation des ondes électrostatiques dans l'effet Landau linéaire.*

La comparaison des valeurs rapportées dans les deux tableaux ci-dessus montre le bon accord entre les résultats obtenus, avec les trois méthodes de résolution numérique, et les résultats théoriques. On peut constater, dans ces tableaux, que les valeurs de γ et de ω_r obtenues dans le cas 2 sont moins proches des valeurs théoriques que celles obtenues avec plus de points en espace et plus de polynômes (cas 1). Cependant les courbes des cas 1 et 2 (figure 5.1) montrent que les résultats sont qualitativement aussi satisfaisants bien que le nombre de degrés de liberté du problème discret, dans le cas 2, soit moitié moins que dans le cas 1. Dans le cas 3, l'amortissement des ondes est beaucoup plus rapide et d'amplitude plus importante que pour les simulations avec $k = 0.5$. Ces phénomènes à priori plus difficiles à simuler, sont bien reproduits par les trois méthodes de discrétisation.

Remarque I.1 *Le taux de décroissance γ est calculé à partir de la droite passant par les sommets des oscillations obtenues entre $t = 0$ et $t = T_R/2$, où T_R est le temps de récurrence défini en* (5.3).

I.3 L'effet de récurrence

Puisque le champ électrique est initialement de faible amplitude et est amorti au cours du temps, on peut s'attendre à voir apparaître ce qu'on appelle l'*effet de récurrence*.

Ce phénomène est un problème intrinsèque au numérique qui fait réapparaître artificiellement des parties de la condition initiale au cours de la simulation. Le système approché a des propriétés de récurrence dues au fait que l'approximation numérique représente un système non dissipatif avec un nombre fini de degrés de liberté. Ainsi, à un moment donné, les modes caractéristiques reviendront à leur état initial. Ce phénomène peut être gênant, en particulier dans le cas de l'étude d'une onde sur un temps long et dans le cas où il n'existe pas d'autres processus dominants.

Le temps de récurrence dépend des paramètres de la simulation, on peut ainsi, en jouant sur ces paramètres, repousser le phénomène à la fin de la simulation. Schumer et Holloway [107] ont calculé le temps de récurrence pour le problème de "free-streaming" dans le cas d'une méthode spectrale de discrétisation en vitesse avec un facteur d'échelle α :

$$T_R = \frac{\alpha\pi\sqrt{N}}{k}. \tag{5.3}$$

D'après (5.3), une façon de repousser le temps de récurrence sans augmenter les coûts de calcul est d'augmenter le facteur d'échelle α. Cependant ceci n'est possible que dans la mesure où l'on ne perd pas la précision du calcul en prenant un facteur d'échelle non convenable (cf Chapitre 3-paragraphe IV), donc uniquement pour des simulations assez courtes.

	$\alpha = 1/\sqrt{2}$		$\alpha = \xi_N/6$	
Cas	Simulation	**Valeurs prédites**	Simulation	**Valeurs prédites**
1	38	**44.43**	> 50	**141.14**
2	29	**34.41**	> 50	**83.16**
3	19	**22.2**	> 35	**70.57**

TAB. 5.4 – *Temps de récurrence dans l'effet Landau linéaire.*

Le tableau 5.4 rapporte les temps de récurrence obtenus dans les simulations, pour les trois cas avec le facteur d'échelle $\alpha = 1/\sqrt{2}$ pour les méthodes SGM et LSCM et $\alpha = \xi_N/6$ pour HSCM. Les temps de récurrence, prédits par la formule (5.3) de Holloway, sont calculés afin de réaliser des comparaisons. On remarque que dans chacun des cas, les valeurs obtenues sont proches des valeurs calculées par la formule (5.3) mais que l'effet de récurrence arrive un peu plus tôt dans le problème complet que dans le problème de "free-streaming".

On peut constater ici que la méthode HSCM a l'avantage d'avoir un facteur d'échelle optimal plus grand que ceux des autres méthodes, ce qui permet de ne pas voir l'effet de récurrence sur les courbes obtenues avec cette méthode (figure 5.1).

Remarque I.2 *Dans le cas d'une méthode eulérienne, le temps de récurrence pour le problème de "free-streaming" est de la forme :*

$$T_{R\ eul} = \frac{2\pi}{k\Delta v},$$

où Δv est le pas en vitesse d'une grille uniforme. Ainsi, si l'on considère 100 *points de discrétisation en vitesse, on obtient les temps de récurrence suivants :*

$$T_{R\ eul} = 100 \quad si \quad k = 0.5,$$
$$T_{R\ eul} = 50 \quad si \quad k = 1.$$

Ces valeurs sont plus petites que celles obtenues dans le cas de la méthode de collocation HSCM (cf tableau 5.4), le phénomène apparaît donc plus tôt. Si l'on souhaite repousser le temps de récurrence, il est nécessaire de densifier la grille de points en vitesse, ce qui rend les calculs plus coûteux.

I.4 Remarque sur la CFL du schéma d'advection *VL3*

Sur la figure 5.2, on regarde l'évolution au cours du temps, du champ électrique obtenu avec la méthode HSCM couplée au schéma *VL3* avec différents pas de temps vérifiant la condition CFL[1],

$$\xi_N \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq c, \tag{5.4}$$

où c, le nombre de courant, varie entre 0.25 et 1.

D'après [84], la condition CFL du schéma est associée au nombre de courant $c = 1$. On peut cependant observer que les résultats sont plus précis avec le nombre de courant $c = 0.25$; la pente de l'amortissement Landau se rapprochant de la valeur théorique prédite par la théorie linéaire.

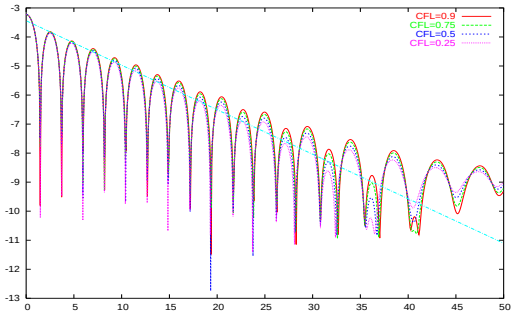


FIG. 5.2 – *Effet Landau linéaire. Comparaison de CFL pour VL3. Les paramètres de la simulation sont N=60, I= 100 et $\alpha = \xi_N/6$.*

Ainsi, dans la suite de ce chapitre, on choisira des pas de temps vérifiant une CFL associée au nombre de courant $c = 0.25$.

II Effet landau non linéaire.

II.1 Présentation du cas test

Dans ce cas test, comme dans l'effet Landau linéaire, la distribution initiale de particules est de la forme (5.2) mais avec une perturbation d'amplitude plus importante :

[1]Cette CFL correspond au cas sans splitting d'ordre deux et sans subcycling.

$a = 0.5$. Le mode perturbé est $k = 0.5$, la boîte spatiale est de taille $L_x = 4\pi$, le facteur d'échelle α correspond au facteur d'échelle optimal mis en évidence au chapitre 3-paragraphe IV : $\alpha_{SGM} = \alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$ et $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$ et l'on prend $I = 100$ et $N = 150$.

La théorie de l'effet Landau linéaire ne peut pas s'appliquer ici ; elle n'est en effet valide que sur des temps inférieurs au rapport $1/\sqrt{a}$ qui vaut $\sqrt{2} \approx 1.414$ quand $a = 0.5$. Pour des temps plus grands, les effets non-linéaires sont dominants.

II.2 Evolution en temps du champ électrique

La figure 5.3 montre l'amplitude du premier mode de Fourier du champ E au cours du temps, en échelle logarithmique. Comme dans l'effet Landau linéaire, la simulation commence par la décroissance exponentielle du champ électrique. Le taux de décroissance, obtenu avec les trois méthodes, est plus important que celui prédit par la théorie linéaire $\gamma \approx -0.288$. Vers $t = 15$, l'instabilité apparaît et le champ croît exponentiellement ($\gamma \approx 0.084$) jusqu'à la saturation à $t = 40$.

En comparant les courbes obtenues, on constate que les deux méthodes de collocation LSCM et HSCM donnent une croissance exponentielle beaucoup plus régulière que la méthode de Galerkin SGM.

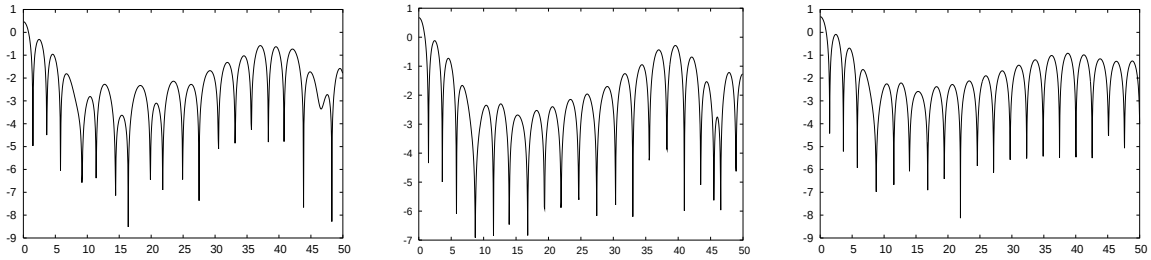
II.3 Evolution de la fonction de distribution

Sur la figure 5.4, on a tracé sur l'intervalle de vitesses $[0, 6]$ et à différents instants t, la fonction de distribution intégrée en espace. On a rapporté ici les résutats obtenus avec les deux méthodes de collocation, ces méthodes étant plus précises que la méthode de Galerkin dans ce cas test. Comme le prédit la théorie quasi-linéaire, au temps $t = 10$, un plateau apparaît, centré sur la vitesse $v = 2.8$, correspondant à la vitesse de phase de l'onde ($v_\phi = \omega/k$). A l'instant $t = 15$, il se forme une bosse ayant pour effet de générer l'instabilité et donc la croissance du mode. Ces graphes nous permettent d'observer le phénomène de la filamentation (cf Chapitre 2-paragraphe III) et son évolution au cours du temps.

On peut déduire de ces résultats que, dans le cadre de ce cas test, la méthode HSCM est bien plus précise que la méthode LSCM. En effet, à l'instant $t = 10$, le plateau est mieux représenté, de même que la bosse à $t = 15$ puis $t = 20$; enfin la filamentation est clairement mieux captée, en particulier à la fin de la simulation : à $t = 40$ et à $t = 50$.

Pour s'assurer de la bonne précision de la méthode HSCM pour ce cas test, on représente, figure 5.5, des coupes de la fonction de distribution dans l'espace des phases (x, v) à différents instants de la simulation. On observe alors très bien la formation et l'évolution de la filamentation ainsi que la croissance de l'instabilité entre les instants $t = 25$ et $t = 40$ par la formation de vortex centrés sur la vitesse de phase (en $-v_\phi$ et en v_ϕ).

L'ensemble de ces résultats est en bon accord avec ceux de Nakamura-Yabe [89] ou encore de Filbet-Sonnendrücker [52] pour ce même cas test.



1 - SGM *2 - LSCM* *3 - HSCM*

FIG. 5.3 – *Effet Landau non-linéaire. Evolution au cours du temps du premier mode de Fourier du champ électrique. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.5$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha_{SGM} = \alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, $N = 150$ *et* $I = 100$.

III L'instabilité two-stream

III.1 Présentation du cas test

On considère maintenant une instabilité, appelée instabilité *two-stream* et générée par une distribution initiale de particules de la forme :

$$f(x, v, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v^2 e^{-v^2/2}(1 + a\cos(kx)), \tag{5.5}$$

avec une pertubation de faible amplitude $a = 0.01$ et un mode excité $k = 0.5$. Les simulations sont réalisées avec $N = 80$, $I = 80$, $\alpha_{SGM} = \alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$ et $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$.

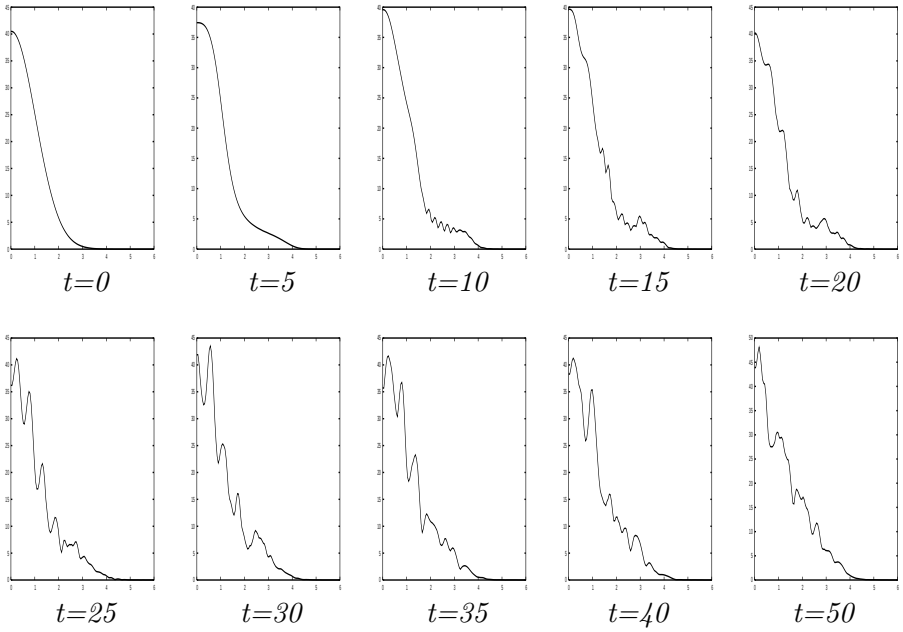
III.2 Evolution en temps des premiers modes de Fourier du champ électrique et de l'énergie électrique

La figure 5.6 montre, pour chacune des trois méthodes spectrales, l'évolution au cours du temps des trois premiers modes de Fourier du champ électrique E ainsi que de l'énergie électrique totale.

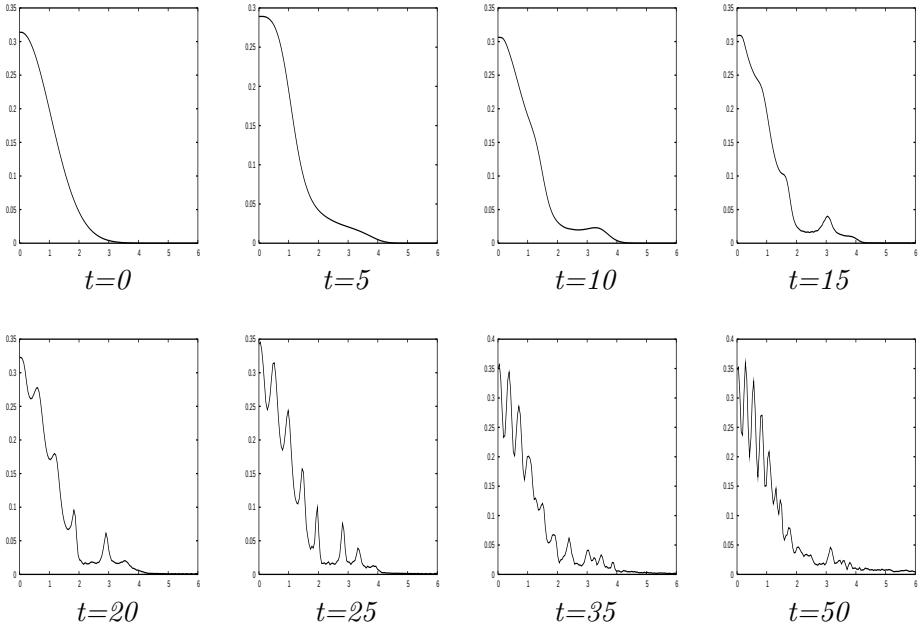
Description des courbes obtenues avec la méthode HSCM

Après un court régime transitoire, le premier mode croît exponentiellement avec le taux de croissance $\gamma \approx 0.2$, qui correspond à la valeur théorique $\gamma^{th} = 0.25$ calculée par Grant *et al* [62]. L'amplitude du champ sature vers $t \approx 25$ puis oscille avec une faible amplitude. L'oscillation, de période $T \approx 18$, mieux visible sur les courbes d'énergie électrique, correspond au piégeage des particules dans le potentiel ϕ associé au champ électrique. La valeur obtenue pour la période des oscillations est en accord avec la période de rebond des particules dont on connait l'ordre de grandeur [35] :

$$T_b \approx \frac{2\pi}{\sqrt{kE}} \approx 14.6,$$



1 - Résultats obtenus avec la méthode LSCM.



2 - Résultats obtenus avec la méthode HSCM.

FIG. 5.4 – *Effet Landau non-linéaire. Evolution en temps de la fonction de distribution intégrée en espace. Les paramètres sont pour les deux simulations :* $a = 0.5$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, $N = 150$ *et* $I = 100$.

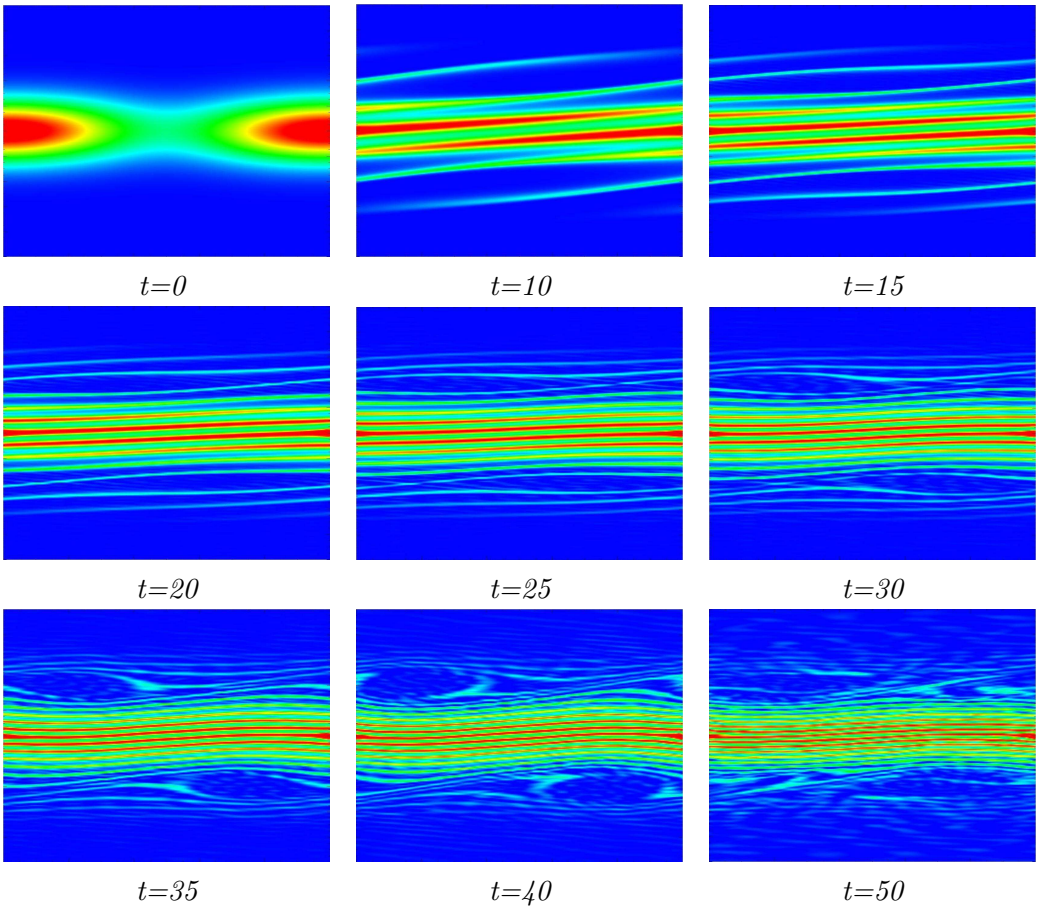


FIG. 5.5 – *Effet Landau non-linéaire. Evolution en temps de la fonction de distribution dans l'espace des phases* $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$. *Résultats obtenus avec la méthode HSCM. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.5$, $k = 0.5$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, $N = 150$ *et* $I = 100$. *L'espace est en abscisse et la vitesse en ordonnée.*

où E est la valeur, moyennée en espace, du premier mode du champ électrique à la saturation ($E \approx 0.37$). Les deux modes suivants $|E_2|$ et $|E_3|$ ont également une croissance exponentielle avant de saturer et d'osciller avec une période plus petite que celle du premier mode. L'énergie électrique (figure 5.6b) croît exponentiellement de $t \approx 10$ à $t \approx 25$ avec une taux de croissance à peu près égal à celui du premier mode. Après la saturation, elle oscille avec une période proche de la période de piégeage.

Ces résultats sont consistants avec ceux rapportés par Cheng-Knorr [27] et plus récemment par Nakamura-Yabe [89].

Comparaison avec les courbes obtenues avec les méthodes SGM et LSCM

Les résultats obtenus avec la méthode LSCM sont très similaires à ceux décrits précédement, obtenus avec la méthode HSCM et semblent donc tout aussi satisfaisants.

Inversement, les résultats obtenus avec la méthode SGM apparaîssent moins bons. En effet, on peut observer par exemple que les oscillations du premier mode, pendant la phase transitoire ($t < 10$), ont une amplitude nettement plus importante. On retrouve également ces oscillations au début de la courbe de l'énergie électrique tandis qu'elles ne sont pas visibles sur la courbe obtenue avec HSCM. La croissance exponentielle est alors moins bien décrite et l'on peut remarquer que la saturation arrive plus tôt, à $t \approx 18$. Sur la courbe de l'énergie électrique, on peut voir, après la saturation, des petites oscillations parasites. On remarque également que les périodes de piégeage des particules, $T \approx 22$ pour SGM et $T \approx 20$ pour LSCM, sont plus grandes que la valeur obtenue avec HSCM.

Les méthodes de collocation LSCM et HSCM semblent apporter des résultats très satisfaisants et très proches. Nous vérifions la précision de chacune d'elles en regardant la fonction de distribution à différents instants de la simulation.

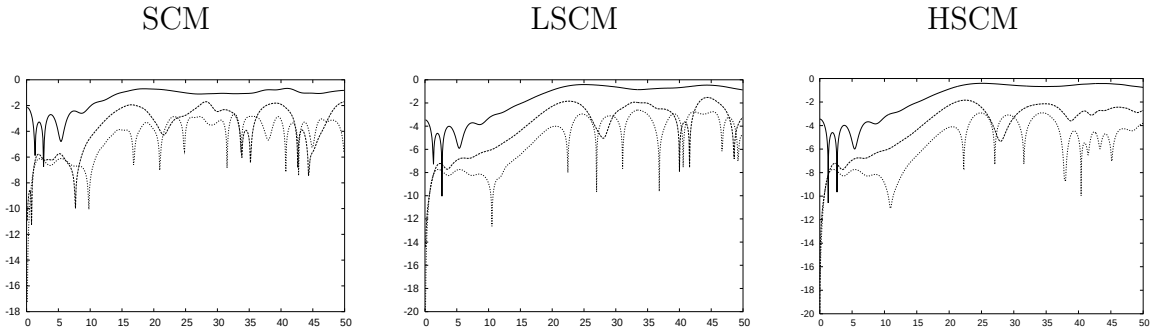
III.3 Evolution de la distribution de particules

La figure 5.7 montre l'évolution en temps de la fonction de distribution intégrée en espace et tracée sur l'intervalle de vitesses [0,6]. Les résultats sont obtenus avec les méthodes de collocation LSCM et HSCM.

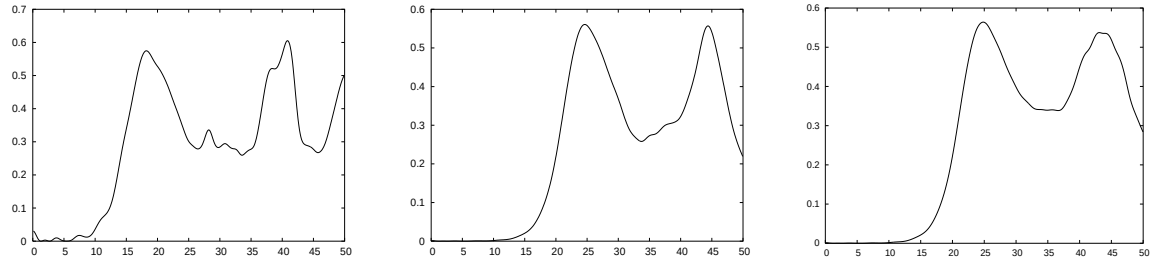
Les courbes montrent que le trou centré en la vitesse $v = 0$ se remplit au cours du temps, jusqu'à $t = 25$, qui correspond à l'instant de saturation. Puis la valeur du minimun en $v = 0$ oscille avec une faible amplitude jusqu'à la fin de la simulation. La différence majeure entre les courbes des deux méthodes réside au niveau du maximum de la fonction de distribution à partir de la saturation ($t = 25$). En effet, seulement sur les courbes de la méthode HSCM apparaîssent de fines oscillations. Cette observation prouve la meilleure précision de cette méthode puisqu'elle permet de mieux capturer la filamentation.

Cette affirmation est confirmée par les graphes des figures 5.8 et 5.9 qui donnent les coupes de la fonction de distribution dans l'espace des phases (x, v).

Pendant la croissance de l'instabilité, à partir de $t \approx 15$, apparaît une structure creuse. Et après $t \approx 25$, le vortex ainsi formé, qui correspond au piégeage des particules dans le champ électrique, tourne à la fréquence de piégeage.

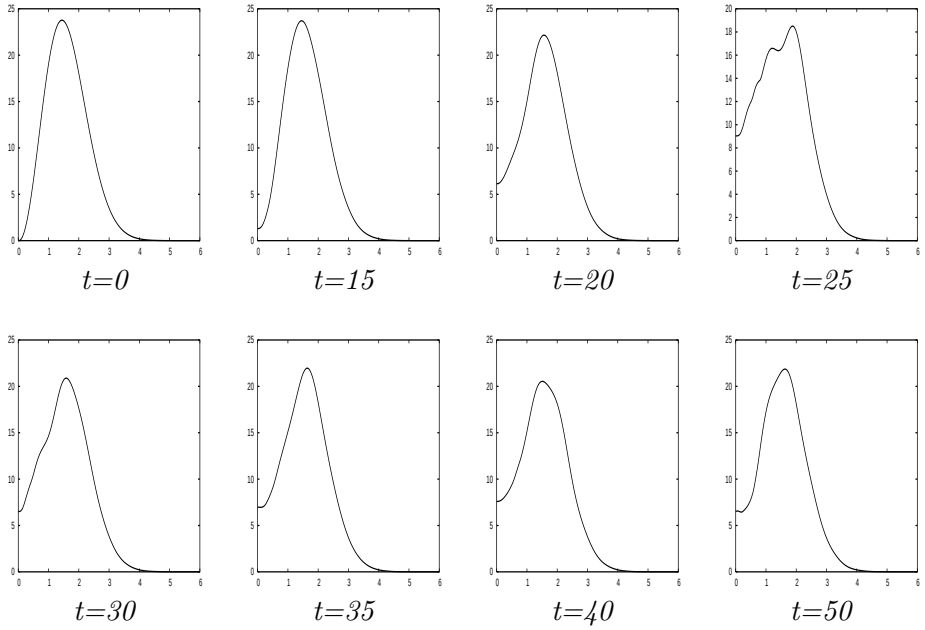


1 - Evolution en temps des trois premiers modes de Fourier du champ électrique.

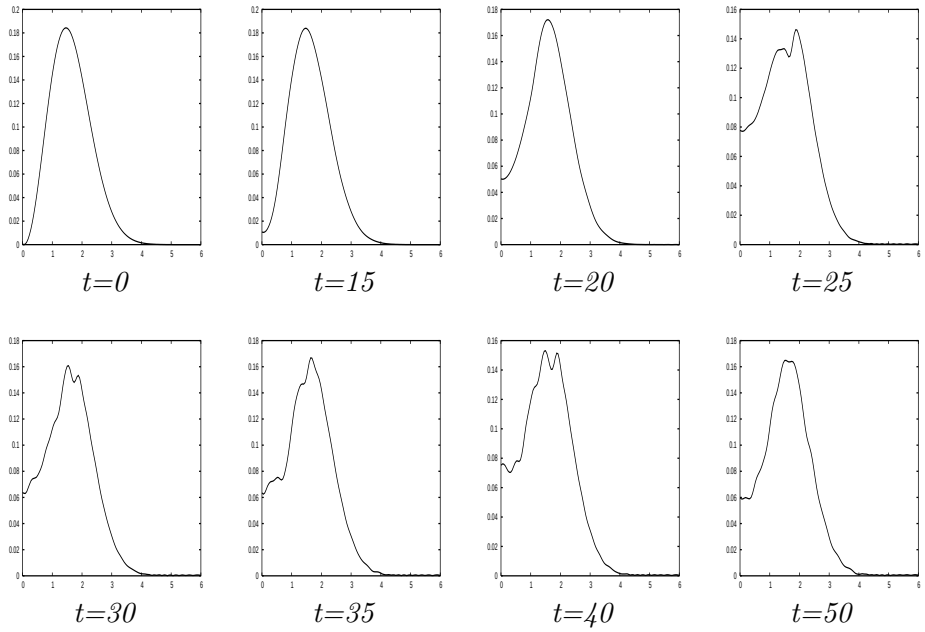


2 - Evolution en temps de l'énergie électrique totale.

FIG. 5.6 – *Instabilité "two-stream". Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = 1/\sqrt{2}$, $I = 80$ *et* $N = 80$.



1 - Résultats obtenus avec la méthode LSCM



2 - Résultats obtenus avec la méthode HSCM

FIG. 5.7 – *Instabilité "two-stream". Evolution en temps de la fonction de distribution intégrée en espace. Les paramètres sont pour les deux simulations :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, $N = 80$ *et* $I = 80$.

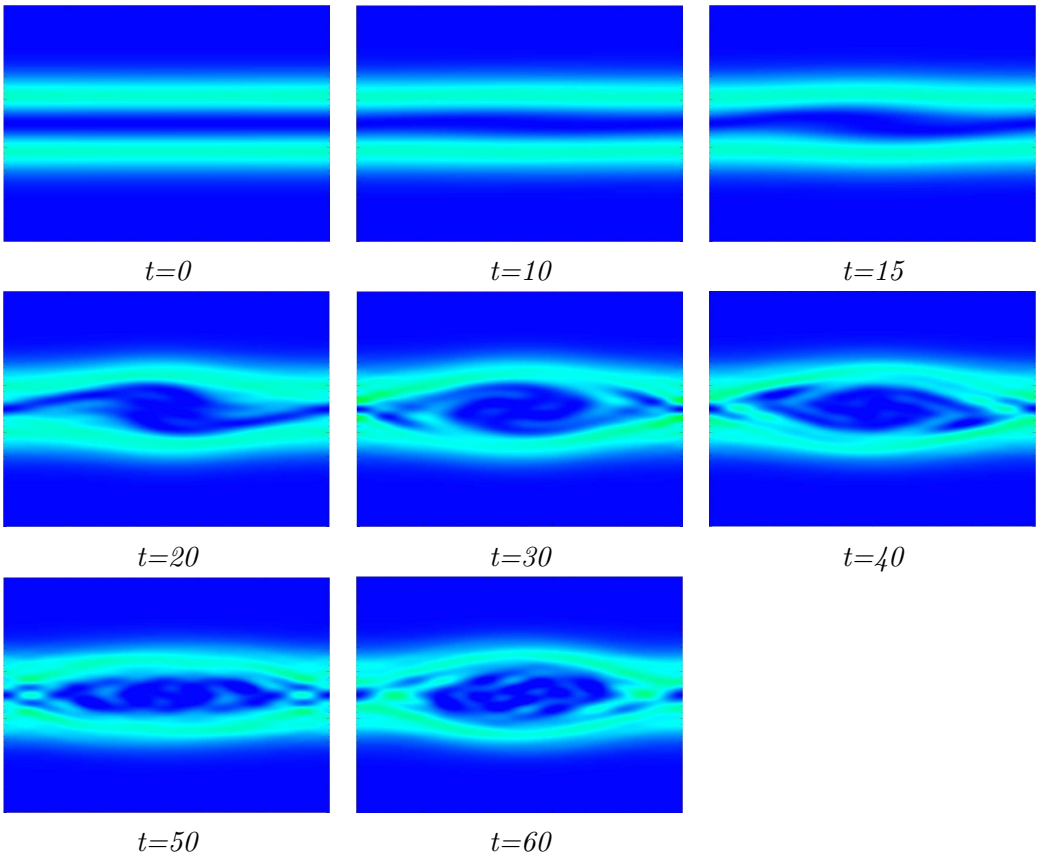


FIG. 5.8 – *Instabilité "two-stream". Evolution en temps de la fonction de distribution dans l'espace des phases* $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$. *Résultats obtenus avec la méthode LSCM. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $\alpha_{LSCM} = 1/\sqrt{2}$, $I = 80$ *et* $N = 80$. *L'espace est en abscisse et la vitesse en ordonnée.*

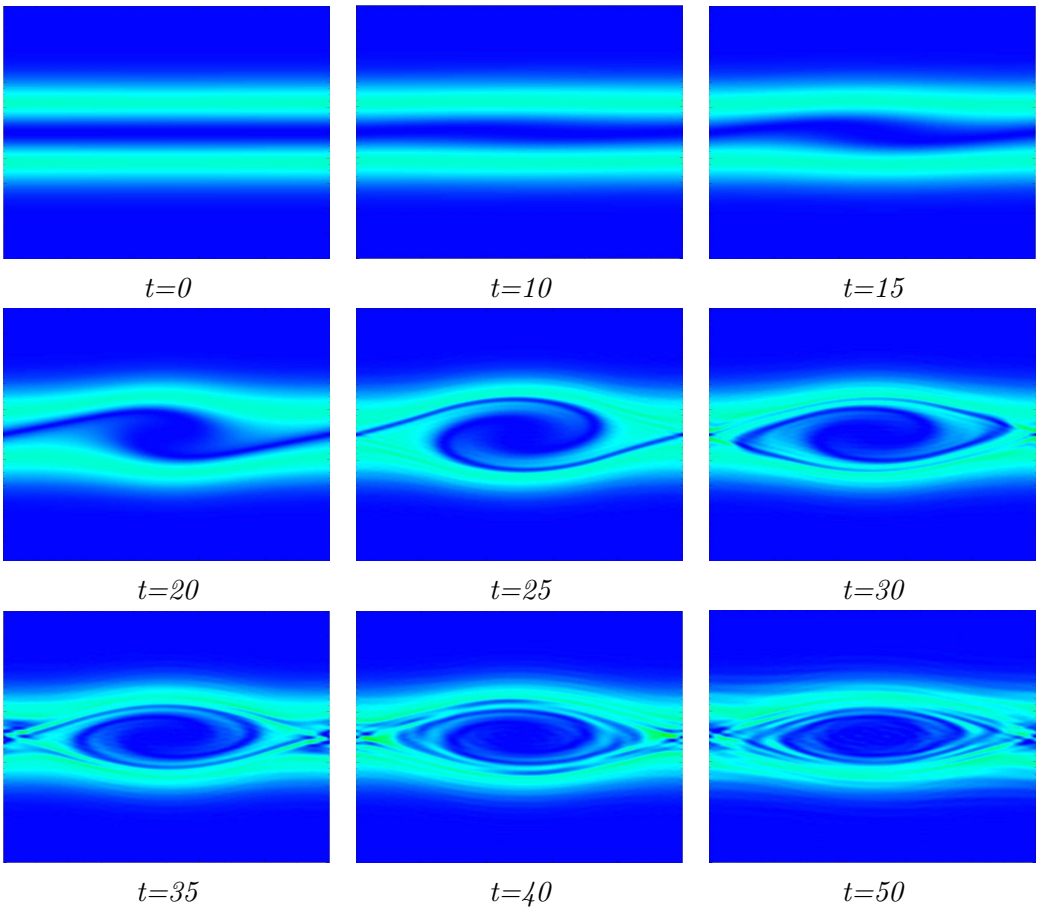


FIG. 5.9 – *Instabilité "two-stream". Evolution en temps de la fonction de distribution dans l'espace des phases* $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$. *Résultats obtenus avec la méthode HSCM. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$, $I = 80$ *et* $N = 80$. *L'espace est en abscisse et la vitesse en ordonnée.*

Même si les deux méthodes de résolution permettent de visualiser les phénomènes décrits ci-dessus, la méthode HSCM apparaît ici meilleure que LSCM et tout particulièrement à partir de $t \approx 20$ où la formation puis la rotation du vortex est clairement visible. La méthode LSCM quand à elle fait apparaître des structures parasites au milieu du vortex (cf à $t = 50$ et $t = 60$).

IV Comparaison des schémas d'advection

Le but de cette partie est de comparer les schémas d'advection présentés au chapitre précédent : le schéma *VL3* d'ordre trois, basé sur une méthode de Galerkin discontinu [84] et les deux schémas de différences finies "upwind" et Lax Wendroff. La méthode de discrétisation en vitesse employée est la méthode de collocation HSCM.

La figure 5.10 montre les résultats pour les cas tests de l'effet Landau linéaire et l'instabilité "two-stream" avec 60 points de collocation en vitesse et 100 points en espace.

Afin de voir le couplage entre la méthode de discrétisation spatiale et la discrétisation en vitesse, on réalise le cas test de l'effet Landau avec deux facteurs d'échelle différents : $\alpha = 1$ et $\alpha = \xi_N/6$. On peut observer, sur les courbes obtenues, la diffusion bien connue du schéma "upwind" qui est encore plus visible quand la discrétisation en vitesse n'est pas optimale ($\alpha = 1$). Le graphe réalisé avec $\alpha = \xi_N/6$ montre que le schéma *VL3* est moins précis que le schéma de Lax-Wendroff ; l'amortissement du champ électrique s'arrête vers $t = 30$.

Les courbes obtenues pour le cas test de l'instabilité "two-stream" confirment ces résultats. On peut voir en particulier que le début de la croissance de l'instabilité des trois premiers modes de Fourier est moins bien reproduit avec la méthode de Galerkin discontinu.

V Simulations en temps longs

Dans ce paragraphe, nous réalisons des simulations sur des temps longs afin de vérifier la robustesse des méthodes sur un nombre important d'itérations. Nous présentons les résultats pour deux cas tests étudiés précédemment, l'effet Landau non-linéaire et l'instabilité two-stream, prolongés ici jusqu'au temps $t = 300$.

Les paragraphes précédents ont montré, par la justesse et la précision de ses résultats, la supériorité de la méthode de collocation HSCM sur les méthodes LSCM et SGM.

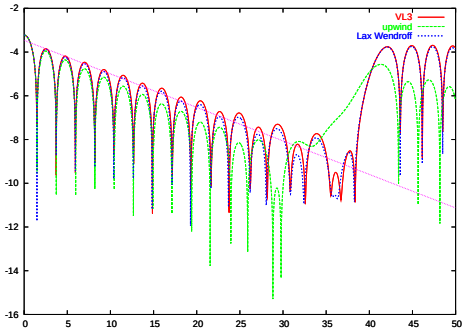
De plus, la méthode de collocation a l'avantage d'avoir des temps de calcul beaucoup plus petits que ceux de la méthode de Galerkin.

Comparaison des temps de calcul

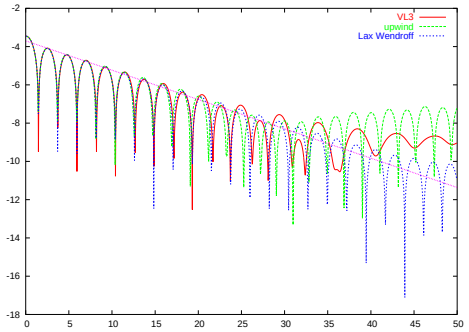
Les tableaux 5.5 rapportent les temps de calcul d'une itération des codes associés aux trois méthodes de discrétisation SGM, LSCM et HSCM couplées ou non à la méthode de subcycling présentée au chapitre précédent[2]. Dans chacun des cas, le pas de temps choisi,

[2]Une seule itération de la méthode de subcycling est réalisée.

Effet Landau linéaire

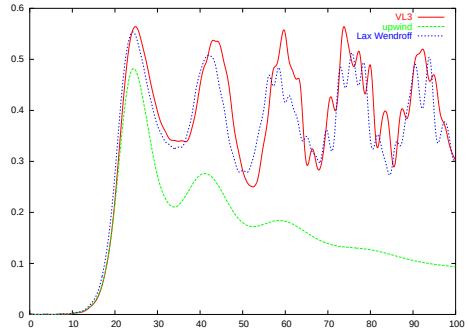


$\alpha = 1$

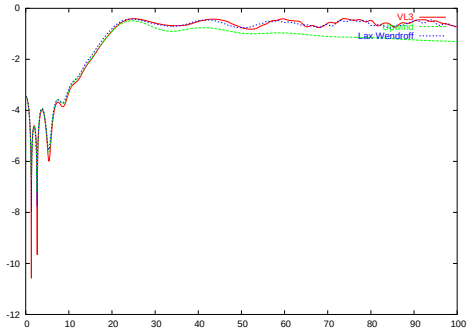


$\alpha = \xi_N/6$

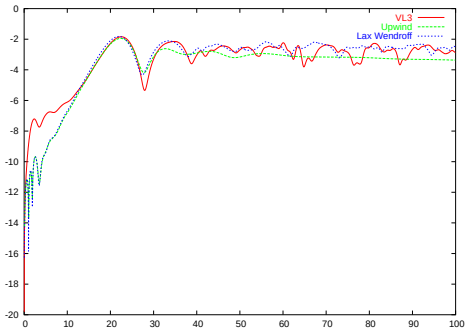
Instabilité "two stream" avec $\alpha = \xi_N/6$



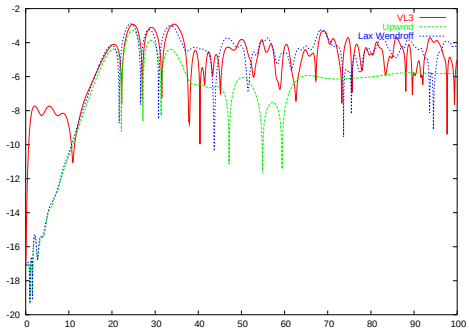
Energie électrique



Premier mode de Fourier de E



Deuxième mode de Fourier de E



Troisième mode de Fourier de E

FIG. 5.10 – *Comparaison de schémas d'advection. Les paramètres de la simulation sont N=60 et I=80.*

le plus grand pas de temps vérifiant la condition CFL, est précisé. Les calculs ont été réalisés pour le cas test de l'instabilité "two-stream" avec les paramètres suivants : $I = 80$ et $N = 80$.

Sans subcycling	SGM	LSCM	HSCM
Temps de calcul d'une itération	11s	0.07s	0.08s
Pas de temps Δt	0.0023	0.0065	0.0046

Avec subcycling	SGM	LSCM	HSCM
Temps de calcul d'une itération	-	0.08s	0.08s
Pas de temps Δt	-	0.013	0.0092

TAB. 5.5 – *Temps de calcul d'une itération avec ou sans subcycling et pas de temps optimal choisi, pour le cas test de l'instabilité "two-stream" avec I=80 et N=80.*

Les résultats montrent que la méthode de Galerkin est beaucoup moins performante que les méthodes de collocation : le calcul d'une itération est bien plus long tandis que le pas de temps est deux fois plus petit. La différence entre les pas de temps s'explique par le choix du splitting (cf paragraphe III.1-chapitre 4). En effet, la condition CFL s'applique au pas de temps Δt dans le cas de la méthode SGM et au demi pas de temps $\Delta t/2$ pour les méthodes de collocation. La différence importante entre les temps de calcul est essentiellement due aux changements de variables nécessaires dans la méthode de Galerkin car la matrice d'advection R n'est pas diagonale (cf paragraphe III.2-chapitre 4). Les temps de calcul obtenus quand on utilise la méthode de subcycling sont du même ordre de grandeur, pour les méthodes de collocation. Le gain apparaît au niveau des pas de temps. En effet ceux-ci pouvant être choisis deux fois plus grands (cf paragraphe VI-chapitre 4), les simulations sont deux fois plus rapides. Le subcycling n'a pas été couplé à la méthode SGM.

On a également vu au paragraphe IV, que la méthode *VL3* de discrétisation de l'équation d'advection semblait donner des résultats moins précis que le schéma de Lax-Wendroff.

Ainsi, afin d'obtenir des résultats satisfaisants, les simulations en temps longs sont réalisées avec la méthode de collocation HSCM couplée au schéma de discrétisation spatiale de Lax-Wendroff.

V.1 Instabilité two-stream en temps longs

Ce cas test est identique à celui présenté au paragraphe III. Les paramètres de la simulation sont les mêmes excepté le nombre de points en espace et le nombre de polynômes qui sont choisis dans un premier temps tels que $I = 80$ et $N = 80$ avec les facteurs d'échelle $\alpha = 1$ et $\alpha = \xi_N/6$, puis tels que $I = 250$, $N = 180$ et $\alpha = \xi_N/6$.

L'évolution de l'énergie électrique pour chacun des trois cas est présentée sur la figure 5.11. Les résultats obtenus avec un facteur d'échelle mal calibré ($\alpha = 1$), montrent à nouveau l'importance du choix de α pour obtenir des résultats satisfaisants. En effet avec $\alpha = 1$, la courbe de l'énergie électrique (figure 5.11 en haut à gauche) présente de forte oscillations d'amplitude croissante, ce qui n'est pas le résultat voulu. La même simulation avec un facteur d'échelle bien calibré (figure 5.11 en haut à droite) montre la bonne décroissance de l'énergie électrique mais seulement jusqu'à $200\omega_{pe}^{-1}$. Après cet instant, l'amplitude des oscillations augmente. Ainsi, les paramètres $N = 80$ et $I = 80$, ne permettent pas de réaliser des simulations assez précises sur des temps longs, pour des phénomènes tels que l'instabilité "two-stream". Lorsque la grille des points de la simulation est choisie plus dense ($N = 180$, $I = 250$) et que le facteur d'échelle est optimal ($\alpha = \xi_N/6$), on observe que l'énergie électrique est oscillante et que son amplitude décroît de 70% par rapport à son amplitude maximale de la même manière que sur les courbes des résultats obtenus par Pohn *et al* [99].

La figure 5.12 montre des coupes de la fonction de distribution dans l'espace des phases aux instants $t = 120$, $t = 200$ et $t = 280$. Comme prévu, le système semble approcher un équilibre BGK [10]-[85].

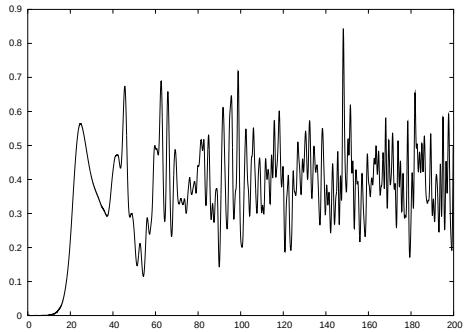
V.2 Amortissement Landau non-linéaire en temps longs

Dans ce cas test, on considère la distribution initiale (5.2) avec une perturbation d'amplitude $a = 0.01$. La taille de la boîte de simulation est $L_x = 2\pi/k$ où $k = 0.3$. Le facteur d'échelle choisi est $\alpha_{HSCM} = \xi_N/6$. On réalise les calculs sur deux grilles distinctes. La première possède 150 points de collocation et 100 points en espace et la seconde est telle que $N = 180$ et $I = 300$.

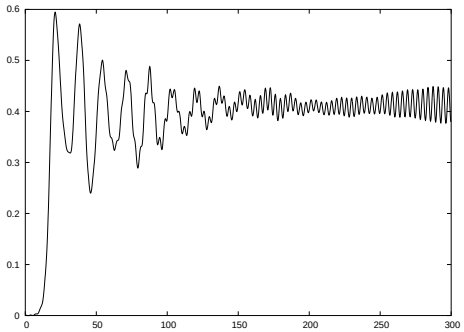
Nous comparons nos résultats avec ceux de Schumer-Holloway [107] et de Gagne-Shoucri [56]. La figure 5.13 montre l'évolution en temps de l'amplitude du premier mode de Fourier du champ électrique, en échelle logarithmique pour les deux grilles de l'espace des phases présentées plus haut. Le graphe obtenu avec $N = 150$ et $I = 100$ n'est pas satisfaisant et l'on peut observer la croissance d'une instabilité numérique. Ce résultat montre en particulier l'importance de la précision de la résolution spatiale. Dans le cas de la grille de l'espace des phases la plus dense ($N = 180$ et $I = 300$), la décroissance exponentielle de la phase linéaire, ainsi que l'amplitude des oscillations du champ sont reproduits en bon accord avec les prédictions théoriques (O'Neil [92]).

VI Tests de conservation

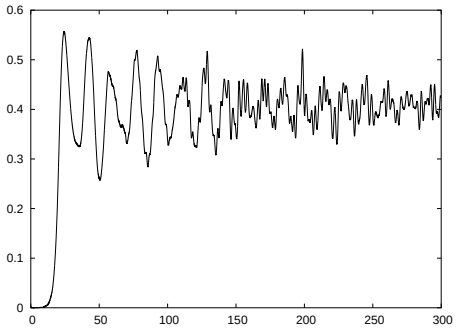
Nous présentons dans ce paragraphe, une étude réalisée pour tester, avec les méthodes de collocation LSCM et HSCM, la conservation au cours du temps des quantités sui-



$\alpha = 1,\ N = 80$ et $I = 80$

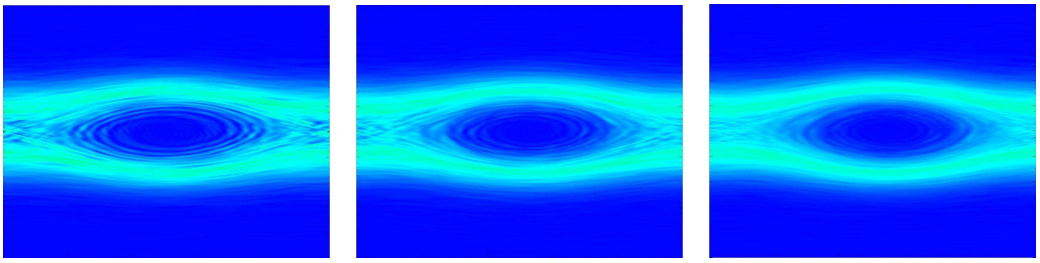


$\alpha = \xi_N/6,\ N = 80$ et $I = 80$



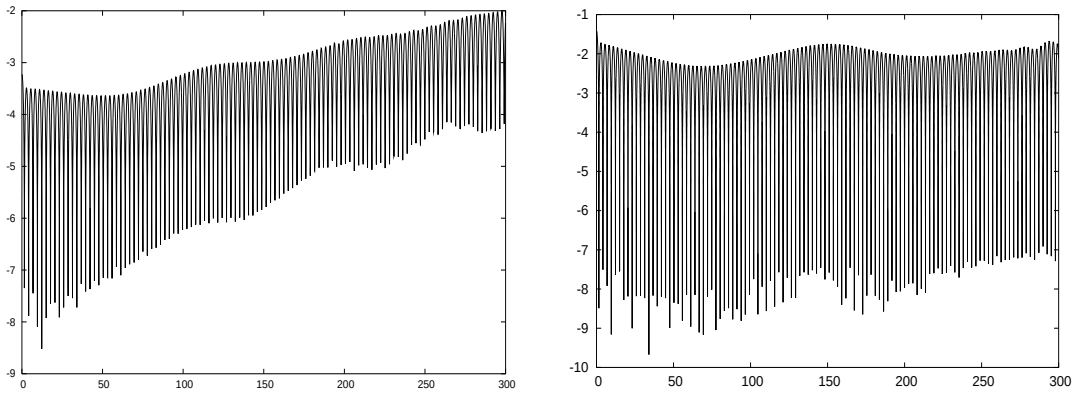
$\alpha = \xi_N/6,\ N = 180$ et $I = 250$

FIG. 5.11 – *Instabilité "two-stream" en temps longs. Evolution en temps de l'énergie électrique. Résultats obtenus avec la méthode HSCM. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$.



t=120 *t=200* *t=280*

FIG. 5.12 – *Instabilité "two-stream" en temps longs. Evolution en temps de la fonction de distribution dans l'espace des phases* $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$. *Résultats obtenus avec la méthode HSCM. Les paramètres de la simulation sont :* $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 180$ *et* $I = 250$. *L'espace est en abscisse et la vitesse en ordonnée.*



N=150, I=100 et $\alpha = \xi_N/6$ *N=180, I=600 et* $\alpha = \xi_N/6$

FIG. 5.13 – *Effet Landau non linéaire en temps longs. Evolution en temps du premier mode de Fourier du champ électrique. Résultats obtenus avec la méthode HSCM. Les paramètres de la simulation sont : a=0.01, k=0.3,* $L_x = 2\pi/k$.

vantes : la densité de particules $n_p(t)$, le moment total $\mathbf{P}(t)$, l'énergie totale $\mathcal{E}(t)$ définies en (2.30), ainsi que la norme L^2 de la fonction de distribution définie en (2.32). Les tests sont réalisés pour l'effet Landau non linéaire et l'instabilité "two-stream" avec les mêmes paramètres $N = 80$ et $I = 100$.

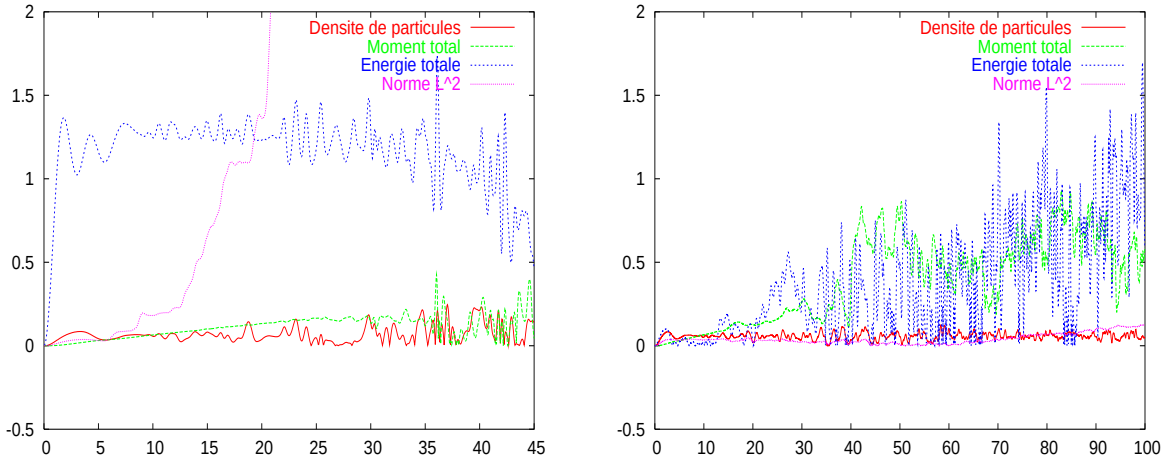
Les résultats rapportés dans la figure 5.14 montrent l'évolution au cours du temps des variations des quantités citées précédemment, par rapport aux quantités initiales :

$$\begin{aligned} \Delta_{\text{densité}}(t) &= n_p(t) - n_p(0), \\ \Delta_{\text{moment}}(t) &= \mathbf{P}(t) - \mathbf{P}(0), \\ \Delta_{\text{énergie}}(t) &= \mathcal{E}(t) - \mathcal{E}(0), \\ \Delta_{\text{norme}L^2}(t) &= \|f\|_2(t) - \|f\|_2(0). \end{aligned}$$

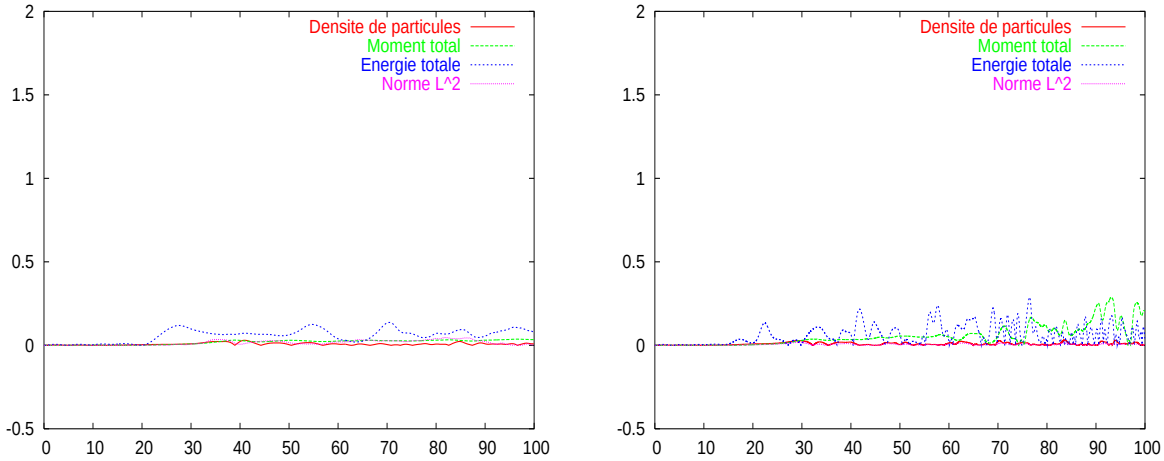
Les méthodes de collocation LSCM et HSCM conservent très bien les quantités

représentées dans le cas test de l'instabilité "two-stream". Dans la simulation de l'effet Landau non linéaire, la conservation de ces quantités semble plus difficile à obtenir numériquement. Ainsi, la méthode LSCM ne permet pas la conservation de la norme L^2. La simulation a été coupée à l'instant $t = 45\omega_{pe}^{-1}$ car la non-conservation de cette norme entraîne la divergence de la solution de la simulation. Les résultat obtenus avec la méthode HSCM montrent de fortes oscillations de la variation de l'énergie totale et du moment total. Malgré ces oscillations, ces quantités se conservent de manière raisonnable. La méthode HSCM a l'avantage de très bien conserver la norme L^2.

LSCM HSCM



Effet Landau non-linéaire - N=80 et I=100



Instabilité "two-stream" - N=80 et I=100

FIG. 5.14 – *Etude de conservation de la densité de particules, du moment total, de l'énergie totale et de la norme L^2 pour les cas tests de l'effet Landau non-linéaire et de l'instabilité "two-stream" avec les méthodes LSCM et HSCM.*

Troisième partie

Résolution numérique du système de Vlasov-Maxwell relativiste 1Dx-3Dv, parallélisation et résultats

Chapitre 6

Extension des méthodes au problème de Vlasov-Maxwell relativiste 1Dx-3Dv

Dans ce chapitre nous nous intéressons aux extensions possibles des méthodes présentées précédement et mises en œuvre en dimension deux de l'espace des phases (1Dx-1Dv), au problème complet : les équations relativistes 3Dx-3Dv de Vlasov-Maxwell. Le système adimensionné s'écrit,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \tag{6.2}$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{B} = -\mathbf{j}, \tag{6.3}$$

$$\nabla.\mathbf{E} = \rho - 1, \tag{6.4}$$

$$\nabla.\mathbf{B} = 0, \tag{6.5}$$

où $\rho(\mathbf{x}, t) = \int f \, d\mathbf{p}$ et $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{v} f \, d\mathbf{p}$ et où vitesse et impulsion sont reliées par les expressions :

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2}}, \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{1 + p^2}},$$

avec la notation $v = \|\mathbf{v}\|$, $p = \|\mathbf{p}\|$. L'adimensionnement est obtenu de la manière suivante : le temps caractéristique est l'inverse de la pulsation plasma ω_{pe}^{-1}, la longueur caractéristique est c/ω_{pe}, la vitesse caractéristique est la vitesse de la lumière c. Les composantes caractéristiques des champs électrique et magnétique sont respectivement : $m_e \omega_{pe} c/q_e$ et $m_e \omega_{pe}/q_e$.

Nous présentons, pour la discrétisation de l'équation (6.1), une extension de la méthode SGM, qui s'appuie sur une décomposition de la fonction de distribution sur des bases d'harmoniques sphériques et de polynômes de Laguerre. L'extension des méthodes

de collocation LSCM et HSCM est quasiment directe. La discrétisation des équations de Maxwell (6.2)-(6.5) est réalisée par une méthode FDTD (*finite difference time domain*). A partir de l'étude menée sur la discrétisation en dimension supérieure de l'équation de Vlasov relativiste et des résultats obtenus en dimension un (cf chapitre 5), une des trois méthodes de discrétisation en impulsion est choisie pour le développement d'un code cinétique 1Dx-3Dv. Le code de calcul, ainsi développé au CEA et appelé HELIOS, est présenté à la fin de ce chapitre.

I Méthode spectrale pour la semi-discrétisation en impulsion

I.1 Généralisation de la méthode SGM en dimensions supérieures en hypothèse non relativiste

En régime non relativiste, l'équation de Vlasov (6.1) se réécrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f + (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{v}} f = 0. \tag{6.6}$$

En notant $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_y)$, l'application de la méthode SGM en vitesse conduit à écrire la fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ sous la forme,

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{l=0}^{N} \sum_{m=0}^{N} \sum_{n=0}^{N} f_{lmn}(\mathbf{x}, t)\, \bar{H}_l(v_x) \bar{H}_m(v_y) \bar{H}_n(v_z). \tag{6.7}$$

Dans (6.7), on a choisi le même nombre N de fonctions de Hermite par direction de vitesse. En remplaçant dans (6.6) la fonction de distribution par son approximation spectrale (6.7), et en appliquant les formules de récurrence de la même manière qu'en dimension un de vitesse, on obtient un système d'équations aux dérivées partielles en espace et en temps de la forme :

$$\partial_t F(\mathbf{x}, t) + A_1 \nabla_{\mathbf{x}}.F(\mathbf{x}, t) + D_1 F(\mathbf{x}, t) + D_2 F(\mathbf{x}, t) + D_3 F(\mathbf{x}, t) = 0,$$

où D_1, D_2 et D_3 sont les matrices de dérivation en vitesse dans les trois directions. En régime relativiste, nous allons voir au paragraphe suivant que l'application de la méthode pose des difficultés supplémentaires.

I.2 Difficultés de la discrétisation spectrale du problème relativiste

En hypothèse de vitesses relativistes, formulée en impulsion, l'équation de Vlasov 1Dx-1Dv du problème de Vlasov-Poisson s'écrit :

$$\partial_t f(x, p_x, t) + \frac{p_x}{\gamma(p_x)} \partial_{\mathbf{x}} f(x, p_x, t) + E(x, t)\, \partial_{p_x} f(x, p_x, t) = 0, \tag{6.8}$$

où le facteur relativiste, en dimension un, est $\gamma(p_x) = \sqrt{1+p_x^2}$. Si on applique la méthode SGM pour la discrétisation en impulsion de (6.8), on peut remarquer que la présence du facteur d'échelle $\gamma(p)$, fonction non linéaire des $p_x,\ p_y$ et p_z, ne permet plus l'application des formules de récurrence. Le calcul du deuxième terme de l'équation (6.8) nécessite alors le calcul d'intégrales non triviales du type :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{H}_n(p_x)\bar{H}_m(p_x)\frac{p_x}{\sqrt{1+p_x^2}}\, e^{\alpha^2 p_x^2}\, dp_x. \tag{6.9}$$

En dimensions supérieures d'impulsion, ce calcul se complique car le facteur relativiste $\gamma(\mathbf{p}) = \sqrt{1+p_x^2+p_y^2+p_z^2}$, avec $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$, empêche la séparation des variables dans l'intégrale.

Pour résoudre ce problème, Shebalin [108] propose de travailler en coordonnées sphériques en vitesses,

$$\mathbf{v} = v\ \sin\theta\ \cos\phi\,\hat{\mathbf{x}} + v\sin\theta\sin\phi\,\hat{\mathbf{y}} + v\ \sin\theta\ \cos\theta\,\hat{\mathbf{z}}, \tag{6.10}$$

où l'on a noté $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ et $\hat{\mathbf{z}}$ les vecteurs unités du repère cartésien orthonormal de vitesses. La méthode employée dans [108] est une méthode de Galerkin qui consiste à utiliser des bases de polynômes de Jacobi en radial et d'harmoniques sphériques en (θ, ϕ),

$$\varphi_{nm}(\theta,\phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}\, P_n^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}, \tag{6.11}$$

où P_n^m sont les fonctions de Legendre. L'équation que Shebalin cherche à approcher est une formulation en vitesse de l'équation de Vlasov qui s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} &\partial_t G + \mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} G - \sqrt{1-v^2} \\ &\quad .\left\{(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}).\nabla_{\mathbf{v}} G - \mathbf{E}.\mathbf{v}\left[v\,\partial_v G + 2n(1-v^2)\,G\right]\right\} = 0, \end{aligned} \tag{6.12}$$

où $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ est la fonction définie par :

$$f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = \begin{cases} (1-v^2)^{5/2}\, G(\mathbf{x},\mathbf{v},t), & v^2 \le 1, \\ 0, & v^2 > 1. \end{cases} \tag{6.13}$$

La fonction G est introduite de manière à simplifier l'expression de l'équation à résoudre ainsi que les calculs des densités de charge et de courant.

Reprenant les idées introduites par Shebalin, nous proposons une nouvelle méthode de Galerkin pour la résolution du problème complet (6.1)-(6.5). Cette méthode est présentée au paragraphe suivant.

I.3 Résolution spectrale à l'aide d'harmoniques sphériques

On introduit des polynômes de Laguerre généralisés. A l'ordre deux, notés $L_n^{(2)}(p)$, ils sont définis par,

$$\frac{d^2}{dp^2}L_{n+2}(p) = (-1)^2 L_n^{(2)}(p),\ p \ge 0, \tag{6.14}$$

où les $L_n(p)$ sont les polynômes de Laguerre. On rappelle que ces polynômes sont définis par,

$$L_n(p) = \frac{e^p}{n!}\frac{d^n}{p^n}\left(p^n e^{-p}\right). \tag{6.15}$$

Les fonctions de Laguerre,

$$\psi_m(p) \;=\; e^{-\alpha p}\, L_m^2(\alpha p),\ p \geq 0, \tag{6.16}$$

sont choisies comme un "équivalent" des fonctions de Hermite sur $[0, \infty[$.
A partir des coordonnées sphériques en impulsion,

$$\mathbf{p} = p\,\sin\theta\,\cos\phi\,\hat{\mathbf{x}} + p\sin\theta\sin\phi\,\hat{\mathbf{y}} + p\,\sin\theta\,\cos\theta\,\hat{\mathbf{z}}, \tag{6.17}$$

la méthode consiste à discrétiser l'équation de Vlasov formulée en impulsion,

$$\partial_t f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) + \frac{\mathbf{p}}{\gamma(\mathbf{p})}.\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) + \mathbf{E}(\mathbf{x},t)\,.\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = 0, \tag{6.18}$$

à l'aide d'une méthode de Galerkin qui s'appuie sur une décomposition, de la fonction de distribution, en harmoniques sphériques (cf la définition (A.9) en annexe) en (θ,φ) et en fonctions de Laguerre (6.16) en radial :

$$f(\mathbf{x},\mathbf{p},t) \approx f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t) \;=\; \sum_{n=0}^{N}\sum_{lm} f_{nlm}(\mathbf{x},t)\psi_n(p)\,\varphi_{lm}(\theta,\varphi). \tag{6.19}$$

Nous avons choisi de travailler à partir de la formulation en impulsion de l'équation de Vlasov (6.18) afin d'éviter les termes supplémentaires existant dans la formulation en vitesse utilisée par Shebalin (6.12). Le facteur d'échelle α, présent dans les fonctions de base (6.16), joue le même rôle que dans les méthodes spectrales présentées pour la résolution du problème non relativiste monodimensionnel ; il permet l'optimisation du rapport,

$$\frac{\text{précision de l'approximation}}{\text{coût algorithmique}}. \tag{6.20}$$

Cette optimisation est conditionnée par le choix d'un facteur d'échelle, adapté aux profils des solutions des simulations numériques (étalement des fonctions de distribution, localisation du maximum...).

Les détails de la méthode ainsi que son application à la discrétisation en impulsion de l'équation de Vlasov relativiste tridimensionnelle en impulsion sont présentés dans l'annexe A.

II Méthode de collocation pseudo-spectrale pour la semi-discrétisation en impulsion

II.1 Méthodes de collocation et problème relativiste

Dans le cas d'une méthode de collocation, l'intervention du facteur relativiste $\gamma(\mathbf{p})$ dans l'équation de Vlasov ne pose pas de difficultés supplémentaires, les formules de

récurrence n'étant pas utilisées pour le calcul du second membre $\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ de l'équation de Vlasov (6.1). En dimension un, seule la matrice de convection change ; elle contient sur sa diagonale des éléments dépendant du facteur relativiste,

$$\frac{\xi_k}{\gamma(\xi_k)} = \frac{\xi_k}{\sqrt{1+\xi_k^2}},$$

pour $k = 0...N$.

Nous présentons les expressions des fonctions d'interpolation $f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ obtenues avec les méthodes HSCM et LSCM en trois dimensions d'impulsion. Ces méthodes ont été présentées en dimension un au chapitre 3. En notant $\boldsymbol{\xi}_{klm} \equiv (\xi_k, \xi_l, \xi_m)$, les points de l'espace tridimensionnel des impulsions, les points de collocation sont les $\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha$. Les valeurs de la fonction de distribution en ces points sont notées f_{klm}.

Méthode LSCM en dimension trois d'impulsion

La méthode LSCM, en trois dimensions d'impulsion, consiste à approcher la fonction de distribution $f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ par son interpolée $f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$, aux points de collocation ξ_{klm}/α. La fonction d'interpolation $f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ est construite de la façon suivante :

$$f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N}\sum_{m=0}^{N} f_{klm} e^{|\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{klm}}|^2} L_k(\alpha p_x)\, L_l(\alpha p_y)\, L_m(\alpha p_z)\, e^{\alpha^2 p^2}. \tag{6.21}$$

Méthode HSCM en dimension trois d'impulsion

En dimension trois de l'espace des impulsions, la fonction d'interpolation de la méthode HSCM s'écrit :

$$f^N(\mathbf{x},\mathbf{p},t) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N}\sum_{m=0}^{N} a_{klm}(\mathbf{x},t)\, \bar{H}_k(p_x)\, \bar{H}_l(p_y)\, \bar{H}_m(p_z)\, e^{-|\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{klm}}|^2/2}, \tag{6.22}$$

avec

$$a_{klm}(\mathbf{x},t) = \sum_{k'=0}^{N}\sum_{l'=0}^{N}\sum_{m'=0}^{N} f_{k'l'm'} \frac{1}{C_{k'}}\frac{1}{C_{l'}}\frac{1}{C_{m'}}\, \bar{H}_k\left(\frac{\xi_{k'}}{\alpha}\right)\, \bar{H}_l\left(\frac{\xi_{l'}}{\alpha}\right)\, \bar{H}_m\left(\frac{\xi_{m'}}{\alpha}\right). \tag{6.23}$$

On rappelle que les C_k sont définis (cf Chapitre 3 - paragraphe III.3) par :

$$C_k = \sum_{j=0}^{N}\left[\bar{H}_j\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right)\right]^2.$$

Les premiers moments de la fonction de distribution, pour les méthodes de collocation LSCM et HSCM, sont calculés par quadrature de Gauss-Hermite avec facteur d'échelle. En dimension trois, cette quadrature est définie par,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} g(p_x,p_y,p_z)\, dp_x dp_y dp_z \approx \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N}\sum_{m=0}^{N} \frac{1}{C_k}\frac{1}{C_l}\frac{1}{C_m} g\left(\frac{\xi_k}{\alpha},\frac{\xi_l}{\alpha},\frac{\xi_m}{\alpha}\right).$$

II.2 Application aux équations de Vlasov-Maxwell 3Dx-3Dv

Chacune des méthodes de collocation présentée au paragraphe II.1 permet de discrétiser l'équation de Vlasov relativiste 3Dx-3Dv en un système de $(N+1)^3$ équations aux dérivées partielles :

$$\begin{aligned}
\partial_t g_{klm} &+ \frac{\xi_k}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\partial_x g_{klm} + \frac{\xi_l}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\partial_y g_{klm} + \frac{\xi_m}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\partial_z g_{klm} \\
&+ \left(E_x + \frac{\xi_l B_z - \xi_m B_y}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\right)(\partial_{p_x}^N f)|_{\mathbf{p}=(\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha)} \\
&+ \left(E_y + \frac{\xi_m B_x - \xi_k B_z}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\right)(\partial_{p_y}^N f)|_{\mathbf{p}=(\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha)} \\
&+ \left(E_z + \frac{\xi_k B_y - \xi_l B_x}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\right)(\partial_{p_z}^N f)|_{\mathbf{p}=(\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha)} = 0,
\end{aligned}$$

où l'on a noté B_x, B_y, B_z, E_x, E_y et E_z les composantes des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$. Les valeurs g_{klm} représentent les cœfficients f_{klm} quand la méthode employée est la méthode LSCM et les cœfficients a_{klm}, définis en (6.23), pour la méthode HSCM. Les dérivées en p_x de la fonction d'interpolation sont données, pour la méthode LSCM, par :

$$\begin{aligned}
\partial_{p_x}^N f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)|_{\mathbf{p}=(\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha)} &= \sum_{k'l'm'} f_{k'm'l'}\left(\alpha L'_{k'}(\xi_k) - 2\alpha\xi_k(\xi_k)\right) \\
&\qquad .L_{l'}(\xi_l)L_{m'}(\xi_m)e^{|\boldsymbol{\xi}_{k'l'm'}|^2-|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2},
\end{aligned}$$

et pour la méthode HSCM par,

$$\partial_{p_x}^N f(\mathbf{x},\mathbf{p},t)|_{\mathbf{p}=(\boldsymbol{\xi}_{klm}/\alpha)} = \sum_{k'l'm'} a_{k'l'm'}\bar{H}'_{k'}\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right)\bar{H}_{l'}\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right)\bar{H}_{m'}\left(\frac{\xi_m}{\alpha}\right).$$

Les autres dérivées partielles en impulsion se déduisent des formules ci-dessus par permutation circulaire sur les indices $(x,\ y,\ z)$, $(k,\ l,\ m)$, (k',l',m') et (h,i,j).

Le système matriciel s'écrit de manière générique :

$$\begin{aligned}
&\partial_t G + A_1\partial_x G + A_2\partial_y G + A_3\partial_z G \\
&+B_1 D_1 G + B_2 D_2 G + B_3 D_3 G = 0,
\end{aligned} \tag{6.24}$$

où le vecteur G contient les cœfficients g_{klm}. Pour $i \in \{1,2,3\}$, les matrices de convections A_i, de taille $(N+1)^3 \times (N+1)^3$ sont diagonales, d'éléments diagonaux de la forme :

$$A_1 = \mathrm{diag}\left(\frac{\xi_k}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\right)_{k,l,m=1\ldots(N+1)}.$$

Les matrices B_i sont également diagonales et contiennent des éléments du type,

$$B_1 = \mathrm{diag}\left(E_x + \frac{\xi_l B_z - \xi_m B_y}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\xi}_{klm}|^2}}\right)_{k,l,m=1\ldots(N+1)}.$$

Ces matrices doivent être calculées à chaque itération en raison de la présence des composantes des champs (E_x, B_y et B_z pour la matrice B_1). Les matrices D_i sont creuses ; ses éléments non-nuls, au nombre de $(N+1)^4$ sur $(N+1)^3 \times (N+1)^3$ éléments au total, sont l'ensemble des éléments de la matrice de dérivation spectrale D du problème monodimensionnel semi-discretisé en vitesse (4.16). Dans ce chapitre, on notera cette matrice $D_{1\mathrm{D}}$. Ses éléments sont ordonnés de façon distincte dans les trois matrices D_i. Leur emplacement dans la matrice dépend de la dérivation partielle qu'elle représente.

La méthode nécessite donc le stockage de seulement $3(N+1)^3$ éléments pour les matrices A_i et $(N+1)^4$ éléments pour les matrices D_i. Les éléments des matrices B_i sont mis à jour à chaque itération et multipliés par les éléments de la matrice D_i.

III Discrétisations spatiale et temporelle de l'équation de Vlasov

A partir de la semi-discrétisation en impulsion, la discrétisation complète (impulsion-espace-temps) de l'équation de Vlasov est obtenue de la même manière qu'en dimension un (1Dx-1Dv). Une semi-discrétisation en temps par une méthode à pas fractionnaire conduit à la résolution successive de systèmes d'équations aux dérivées partielles pour chaque direction spatiale $X \in \{x, y, z\}$,

$$\partial_t F + \partial_X F = 0, \tag{6.25}$$

et d'équations différentielles

$$\partial_t F + D_{3\mathrm{D}} F = 0, \tag{6.26}$$

où $D_{3\mathrm{D}}$ est une matrice d'échange spectral, composée des éléments de la matrice de dérivation spectrale $D_{1\mathrm{D}}$ du problème monodimensionnel.

Les équations de type (6.25) sont résolues numériquement à l'aide du schéma au second ordre de Lax-Wendroff, cette méthode conduisant à des résultats satisfaisants en dimension un (cf Chapitre 5). Une méthode d'intégration de Runge-Kutta d'ordre quatre est utilisée pour la résolution des équations de la forme (6.26).

Généralisation de la méthode à pas fractionnaire en temps d'ordre deux de Cheng et Knorr

Schmitz et Grauer [106] étudient l'extension du schéma de splitting d'ordre deux de Cheng et Knorr [27] pour l'équation de Vlasov non relativiste en dimensions supérieures. En notant $\mathbf{x} = (x, y, z)$ et $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, en dimensions trois (3Dx-3Dv), leur schéma s'écrit,

$$f(\Delta t) \approx T_{\mathbf{x}}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) T_{\mathbf{v}}(\Delta t)\, T_{\mathbf{x}}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) f^0, \tag{6.27}$$

où f^0 représente la condition initiale. Il s'agit de la formule de splitting de Strang dans l'ordre espace-impulsion-espace. Les opérateurs $T_{\mathbf{x}}$ et $T_{\mathbf{v}}$ désignent respectivement les étapes d'intégration en temps dans l'espace réel et dans l'espace des vitesses. L'opérateur $T_{\mathbf{x}}$ dépend essentiellement du terme

$$\mathbf{v}.\nabla_{\mathbf{x}} = v_x \partial_x + v_y \partial_y + v_z \partial_z.$$

Les trois dimensions d'espace sont donc indépendantes entre elles et on peut ainsi décomposer la caractéristique spatiale à nouveau en trois caractéristiques dans chaque direction d'espace :

$$T_{\mathbf{x}} = T_x \; T_y \; T_z. \tag{6.28}$$

En vitesse, l'expression

$$\begin{aligned}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).\nabla_v &= (E_x + v_y B_z - v_z B_y)\,\partial_{v_x} + (E_y + v_z B_x - v_x B_z)\,\partial_{v_y} \\ &\quad +(E_z + v_x B_y - v_y B_x)\,\partial_{v_z},\end{aligned}$$

montre que les directions de vitesse ne sont pas indépendantes entre elles. Afin d'obtenir l'ordre deux en temps, il est alors nécessaire de formuler l'étape d'intégration en temps, dans l'espace des vitesses, de façon centrée. On obtient l'ordre deux en temps en écrivant par exemple l'égalité suivante :

$$\begin{aligned}T_{\mathbf{v}}(\Delta t) &= T_{v_x}\left(\frac{\Delta t}{4}\right) T_{v_y}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) T_{v_x}\left(\frac{\Delta t}{4}\right) T_{v_z}(\Delta t) \\ &\quad T_{v_x}\left(\frac{\Delta t}{4}\right) T_{v_y}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) T_{v_x}\left(\frac{\Delta t}{4}\right).\end{aligned}$$

Une fois le vecteur F déterminé, les seconds membres des équations de Maxwell, ρ et j, sont calculés par quadrature de Gauss-Hermite. Les équations de Maxwell peuvent alors être résolues et pour cela une méthode FDTD (finite difference time domaine) est utilisée.

Conditions aux bords de la boîte de simulation

Dans le cadre de ce travail, les conditions aux bords du domaine spatial sont choisies périodiques. Le calcul des flux dans les ceintures radiatives nécessite cependant des conditions aux bords réfléchissantes. Le traitement de ces conditions représente une perspective du travail et sera discuté en conclusion.

IV Algorithme de résolution de l'équation de Vlasov tridimensionnelle sur une itération en temps

L'ensemble des étapes de résolution de l'équation de Vlasov tridimensionnelle (3Dx-3Dv) est résumé dans l'algorithme présenté à la page suivante.

De manière générale, on notera, dans les algorithmes :

- $\mathsf{T}_1[\mathsf{N}_b]$ le tableau T_1 monodimensionnel de N_b réels, où N_b est un entier,
- $\mathsf{T}_1[\mathsf{i}]$ le i$^{\text{ème}}$ élément du tableau T_1, où i est un indice entier,
- $\mathsf{T}_2[\mathsf{N}_{b1}, \mathsf{N}_{b2}]$ le tableau T_2 bidimensionnel de taille $N_{b1} \times N_{b2}$ et d'éléments réels,
- $\mathsf{T}_2[\mathsf{i,j}]$ l'élément (i,j) du tableau T_2 où i et j sont des indices entiers,
- $\mathsf{T}_2[\mathsf{i}\,;\,:]$ la i$^{\text{ème}}$ ligne du tableau T_2,
- $\mathsf{T}_2[\,:\mathsf{,j}]$ la j$^{\text{ième}}$ colonne du tableau T_2,
- $\mathsf{R}_1(\mathsf{a,b})$ la routine R_1 dont les attributs sont les éléments a et b,
- $\mathsf{a} \leftarrow \mathsf{R}_1(\mathsf{a,b})$ l'instruction remplaçant la variable a par le résulat de la routine R_1.

On introduit en particulier les notations suivantes :

- I le nombre de points en espace,
- N+1 le nombre de points de collocation,
- E_x[I], E_y[I] et E_z[I] les tableaux des composantes de champ aux points de la grille spatiale,
- B_x[I], B_y[I] et B_z[I] les tableaux des composantes de champ aux centres des mailles,
- F[I^3,(N+1)^3] le tableau des cœfficients g_{klm} (cf paragraphe II.2),
- F_i[(N+1)^3] le tableau des éléments de la i$^{\text{ème}}$ ligne du tableau F pour $i = 1, ..., I^3$,
- F_n[I^3] le tableau des éléments de la n$^{\text{ième}}$ colonne du tableau F pour $n = 1, ..., (N+1)^3$,

- LW la routine d'advection par le schéma de Lax-Wendroff,
- $\mathsf{RK4}_1$, $\mathsf{RK4}_2$ et $\mathsf{RK4}_3$ les routines de résolution des étapes d'échange spectrale dans les trois directions d'impulsion, s'appuyant sur le schéma de Runge-Kutta d'ordre quatre,
- Δt et Δx les pas en temps et pas en espace,
- v_x[I], v_y[I] et v_z[I] les tableaux des vitesses d'advection dans les trois directions spatiales,
- $\mathsf{D}_{1\mathrm{D}}$[N+1,N+1] le tableau contenant les éléments de la matrice de dérivation spectrale du problème monodimensionnel.

Données : E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z, Δt, Δx, I, N, v_x, v_y, v_z

1. **pour** n=1, $(N+1)^3$ **faire** *//Boucle sur les colonnes de* F

2. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_x[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

3. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_y[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

4. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_z[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

4. F[:,n] $\leftarrow F_n$

5. **fin pour**

6. **pour** i=1, I^3 **faire** *//Boucle sur les lignes de* F

7. $F_i \leftarrow RK4_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$

8. $F_i \leftarrow RK4_2(F_i, \Delta t/2, D_{1D}, E_y[i], B_x[i], B_z[i], v_z, v_x)$

9. $F_i \leftarrow RK4_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$

10. $F_i \leftarrow RK4_3(F_i, \Delta t, \quad D_{1D}, E_z[i], B_y[i], B_x[i], v_x, v_y)$

11. $F_i \leftarrow RK4_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$

12. $F_i \leftarrow RK4_2(F_i, \Delta t/2, D_{1D}, E_y[i], B_z[i], B_y[i], v_z, v_x)$

13. $F_i \leftarrow RK4_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$

14. F[i, :] $\leftarrow F_i$

15. **fin pour**

16. **pour** n=1, $(N+1)^3$ **faire** *//Boucle sur les colonnes de* F

17. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_z[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

18. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_y[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

19. $F_n \leftarrow$ LW (F_n, v_x[n], I, Δx, $\Delta t/2$)

20. F[:,n] $\leftarrow F_n$

21. **fin pour**

V Discrétisation des équations de Maxwell

V.1 Equations de Maxwell et réduction 2D

Les champs électrique $\mathbf{E}(\mathbf{x},t)$ et magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{x},t)$ présents dans l'expression de la force de Lorentz $q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})$, qui intervient dans l'équation de Vlasov, sont solutions des équations de Maxwell. Sous forme adimensionnée, celles-ci s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla\times\mathbf{E} = 0, \tag{6.29}$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla\times\mathbf{B} = -\mathbf{j}, \tag{6.30}$$

$$\nabla.\mathbf{E} = \rho - 1, \tag{6.31}$$

$$\nabla.\mathbf{B} = 0, \tag{6.32}$$

où les densités de charge ρ et de courant $\mathbf{j}$ sont les premiers moments de la fonction de distribution f, solution de l'équation de Vlasov. Ces densités vérifient l'équation de conservation de la charge,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla.\mathbf{j} = 0. \tag{6.33}$$

En dimension deux d'espace, si $\mathbf{x}\in S$, où S est une surface fermée, les équations (6.29) (loi de Faraday) et (6.30) (loi d'Ampère) expriment respectivement la circulation du champ $\mathbf{E}$ le long d'une courbe fermée en fonction du flux du champ $\mathbf{B}$ à travers la surface S, et la circulation de $\mathbf{B}$ le long d'une courbe fermée en fonction du flux de $\mathbf{E}$ à travers S et du courant. Les relations de Gauss (6.31) et (6.32) pour les champs électrique et magnétique, expriment les flux de $\mathbf{E}$ et de $\mathbf{B}$ à travers S (cf [47]).

Si la structure s'étend jusqu'à l'infini dans la direction z, l'onde incidente est uniforme dans cette direction. Les dérivées partielles en z s'annulant, on obtient des équations de Maxwell simplifiées, que l'on regroupe selon deux modes distincts : le mode noté TM_z (*transverse magnetic*) et le mode noté TE_z (*transverse electric*).

Le mode TM_z regroupe les équations ne prenant en compte que les composantes de champs B_x, B_y et E_z :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}B_x &= -\frac{\partial}{\partial y}E_z,\\
\frac{\partial}{\partial t}B_y &= \frac{\partial}{\partial x}E_z,\\
\frac{\partial}{\partial t}E_z &= \frac{\partial}{\partial x}B_y - \frac{\partial}{\partial y}B_x - j_z.
\end{aligned}$$

Le mode TE_z est composé des équations ne prenant en compte que les composantes de

champs E_x, E_y et B_z :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}E_x &= \frac{\partial}{\partial y}B_z - j_x, \\
\frac{\partial}{\partial t}E_y &= -\frac{\partial}{\partial x}B_z - j_y, \\
\frac{\partial}{\partial t}B_z &= \frac{\partial}{\partial y}E_x - \frac{\partial}{\partial x}E_y.
\end{aligned}$$

N'ayant aucune composante de champs commune, ces deux modes peuvent exister simultanément sans interactions mutuelles.

V.2 Méthodes de résolution des équations de Maxwell

Les méthodes de discrétisation des équations de Maxwell les plus populaires sont les méthodes de type FDTD (*finite difference time domain*) [121]. La méthode pionnière est celle proposée par Yee [134]. Ces méthodes possèdent de nombreux avantages. Elle sont efficaces et très précises sur des maillages réguliers cartésiens. Elles conservent un équivalent discret de l'énergie électromagnétique et sont explicites. Leur inconvénient majeur est d'être moins efficaces sur des maillages déformés et sur des géométries réalistes (non cartésiennes). De plus, ces méthodes ne permettant pas le raffinement de maillage local, génèrent des calculs inutilement coûteux sur des maillages raffinés de l'ensemble du domaine, dans les cas où la simulation doit traiter localement des petits détails. Le coût des calculs inutiles est particulièrement important en trois dimensions d'espace.

D'autres méthodes plus récentes, des méthodes de volumes finis ([68]-[101]-[95]-[135]), d'éléments finis ([7]-[30]), ainsi que les méthodes de Galerkin discontinues ([117]-[31]-[96]-[25]), cherchent à supplanter les méthodes FDTD. Ces méthodes tentent de préserver leurs propriétés importantes tout en fonctionnant sur des géométries complexes. Fochesato et Bouche [53] donnent une évaluation de plusieurs de ces méthodes de discrétisation. La méthode de volumes finis de Hermeline par exemple [68] permet des résoudre les équations sur des domaines à géométries complexes. Le maillage est cependant contraint d'être un maillage de Delaunay-Voronoï. La méthode des éléments finis de Lagrange d'Assous *et al.* [7] a beaucoup de qualités et semble bien adaptée à des études complexes. L'implémentation d'une telle méthode est cependant complexe de même que sa parallélisation. Les méthodes de Galerkin discontinues [117]-[31]-[96]-[25] semblent être les méthodes les plus flexibles. Leur caractère local est notamment un avantage car il permet une mise en œuvre facile, une parallélisation efficace avec la possibilité d'inclure des procédures de raffinement de maillage.

La simulation de la dynamique du système est contrainte par le pas de temps Δt. En effet, afin que les ondes électromagnétiques se déplacent dans le domaine, le pas de temps doit être choisi de façon à ce que les ondes électromagnétiques les plus rapides, qui sont celles qui se propagent dans le vide, soient bien résolues sur la grille numérique :

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \tag{6.34}$$

Une manière d'éviter le critère sur le pas de temps qu'impose la dynamique du système (6.34) est d'utiliser une approximation de Darwin des équations de Maxwell. Cette approximation est largement utilisée dans les simulations PIC [16]. Schmitz et Grauer [106] couplent, pour la première fois, cette approximation à l'équation de Vlasov. Cependant dans cette approximation, les modes purement électromagnétiques sont négligés. Une autre alternative est d'utiliser un schéma en temps implicite comme Ricci *et al.* [103].

De manière analogue au continu, pour résoudre numériquement les équations de Maxwell, on a besoin de résoudre les équations discrétisées d'Ampère et de Faraday, les équations discrètes des relations de Gauss étant automatiquement vérifiées si les opérateurs discrets div_h et rot_h vérifient l'équation de conservation de la charge discrète, la contrainte de divergence discrète et la propriété suivante :

$$\mathrm{div}_h \ \mathrm{rot}_h = 0. \tag{6.35}$$

Si l'équation de conservation de la charge n'est pas satisfaite au niveau discret, les solutions numériques, solutions des équations d'Ampère et de Faraday, ne sont plus solutions des équations de Maxwell (cf Barthelmé [8]).

Dans le cadre de la simulation de la dynamique des ceintures radiatives, il est possible de travailler sur des maillages réguliers cartésiens. La facilité de son implémentation et son efficacité nous incite à choisir la méthode FDTD pour résoudre les équations de Maxwell.

V.3 Méthode FDTD et schéma de Yee

La méthode FDTD (Finite Difference Time Domain) est une technique populaire de discrétisation en électromagnétisme [121]. Fondée sur l'algorithme de Yee [134], elle résout les équations de Maxwell au sens des différences finies centrées sur des grilles décalées dans le domaine temporel. Dans cette méthode, l'algorithme de calcul des champs a l'avantage d'être simple à mettre en œuvre et précis à l'ordre deux. Le principal inconvénient, sur des maillages cartésiens, vient du fait que la stabilité de la méthode dépend d'une condition CFL.

Les grilles de la méthode FDTD peuvent être structurées de façon à ce que les relations de Gauss soient explicites. Le choix des positions des champs sur la grille est alors stratégique. Les champs sont calculés en des points entrelacés à la fois de l'espace et du temps. Comme illustré en dimension trois sur la figure 6.1, l'algorithme de Yee centre les composantes des champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ tel que chaque composante du champ $\mathbf{E}$ soit entourée par quatre composantes circulaires du champ $\mathbf{B}$; de même chaque composante du champ $\mathbf{B}$ est entourée par quatre composantes circulaires du champ $\mathbf{E}$.

L'algorithme de Yee peut être parallélisé efficacement sur des ordinateurs haute performance [136].

De manière générique, les équations monodimensionnelles et adimensionnées qu'il

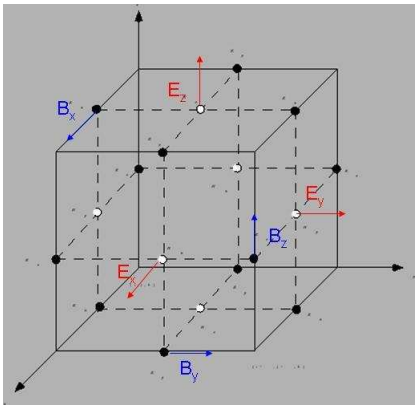


FIG. 6.1 – Positionnement des composantes des champs électrique et magnétique sur le cube unité dans $\mathbb{R}^3$ pour la méthode FDTD.

faut résoudre s'écrivent,

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial v}{\partial x} = b, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} + \dfrac{\partial u}{\partial x} = 0, \end{cases} \tag{6.36}$$

où le second membre b est une donnée du problème. Sur un maillage régulier, le schéma proposé par Yee est le suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \dfrac{v_{i+1/2}^{n+1/2} - v_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} &= b, \\ \dfrac{v_{i+1/2}^{n+3/2} - v_{i+1/2}^{n+1/2}}{\Delta t} + \dfrac{u_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}}{\Delta x} &= 0. \end{cases} \tag{6.37}$$

Il est explicite, d'ordre deux en temps et en espace, stable sous la condition CFL

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \tag{6.38}$$

et non dissipatif. En effet, la conservation exacte de l'énergie discrète,

$$\mathcal{E}^n = \Delta x \sum_i \left([u_i^n]^2 + v_{i+1/2}^{n-1/2} v_{i+1/2}^{n+1/2} \right),$$

empêche l'introduction de diffusion numérique dans le schéma. Sous la condition (6.38), l'énergie $\mathcal{E}^n$ est définie positive, ce qui assure la stabilité du schéma.

Le schéma FDTD est cependant dispersif dès que le nombre de courant est plus petit que un. En effet, une onde plane, solution numérique du schéma de Yee, oscille en temps à la pulsation ω_{app}, donnée en dimension un par la relation de dispersion suivante ([97]) :

$$\frac{\omega_{app}}{\omega_{ex}} = 1 + \frac{k^2 \Delta x^2}{24}(v^2 - 1) + O(\Delta x^4) \text{ quand } \Delta x \to 0, \tag{6.39}$$

où k est le nombre d'onde de l'onde plane solution exacte, de pulsation $\omega_{ex} = kc$. En dimension un, cette difficulté est levée lorsqu'on prend une CFL à la limite de la stabilité

(CFL=1), le schéma (6.39) devenant alors exact.

Le schéma de Yee a un avantage important : les opérateurs discrets satisfont la propriété (6.35). L'équation de conservation de la charge discrète s'écrit,

$$\frac{\rho_i^{n+1}-\rho_i^n}{\Delta t}+\frac{(j_x)_{i+1/2}^{n+1/2}-(j_x)_{i-1/2}^{n+1/2}}{\Delta x}=0, \tag{6.40}$$

et la contrainte de divergence discrète est donnée par,

$$\frac{(E_x)_{i+1/2}^{n}-(E_x)_{i-1/2}^{n}}{\Delta x}=\rho_i^n. \tag{6.41}$$

VI Le code cinétique 1Dx-3Dv HELIOS

Nous avons développé un code cinétique 1Dx-3Dv, le code HELIOS[1], permettant de décrire sur une dimension d'espace x et trois dimensions d'impulsion (p_x, p_y, p_z) ou de vitesse (v_x, v_y, v_z), les interactions entre les particules chargées et des ondes électromagnétiques de polarisation quelconque (E_y, E_z, B_y, B_z) et des ondes électrostatiques (E_x). Le code résout le système des équations de Vlasov-Maxwell relativistes adimensionnées 1Dx-3Dv (6.1)-(6.5).

La méthode de discrétisation en impulsion retenue est la méthode de collocation HSCM. En effet, cette méthode allie précision et efficacité (cf les résultats en dimension un au chapitre 5) et a l'avantage de s'étendre sans difficultés au problème relativiste tridimensionnel en impulsion. Les schémas de discrétisation en temps et en espace employés dans le code sont les schémas présentés au paragraphe III et les équations de Maxwell sont résolues numériquement par la méthode FDTD décrite au paragraphe V. On rappelle que les conditions aux bords de la boîte de simulation sont périodiques.

Le code peut traiter plusieurs espèces de particules : différentes espèces évoluant dans le domaine de calcul, leurs distributions sont solutions de l'équation de Vlasov (les électrons dans nos simulations), et des particules assurant la neutralité du système (les ions dans notre cas).

Le code est implémenté en C++ et structuré de façon générique de la manière suivante.

Principe du code HELIOS

• **Paramètres d'entrée :**

Les paramètres des méthodes numériques employées dans le code sont :
◇ le nombre de points de la grille spatiale I,
◇ le nombre de points de collocation par direction d'impulsion $N+1$.

Les paramètres du problème physique sont :
◇ le nombre d'espèce de particules évoluant dans le plasma,
◇ les caractéristiques de la distribution initiale pour chaque espèce de particule :

[1] **H**ermite sp**E**ctral co**L**location method for the solut**I**on of the Vlas**O**v-Maxwell **S**ystem.

- la vitesse thermique parallèle des distributions initiales de chaque espèce,
- un facteur d'anisotropie de température dans le cas d'un plasma anisotrope,
- une impulsion de dérive dans le cas d'une distribution de type faisceau, non centrée en zéro,
- la valeur d'un champ statique dans le cas d'un plasma magnétisé.

Les paramètres d'initialisation du code Vlasov sont :
◇ l'amplitude b_0 de la perturbation introduite sur les champs,
◇ les modes k_i perturbés, pour $i = 1, ..., N_m$, où N_m est le nombre de modes perturbés.

• **Initialisation des calculs :**
A l'initialisation, sont calculés :
◇ les cœfficients spectraux f_{klm} associés à la condition initiale pour chaque espèce,
◇ les zéros du polynôme de Hermite de degré $N+1$, notés ξ_k avec $k = 0, ..., N$,
◇ la taille L_x de la boîte spatiale, telle que le domaine contienne quelques longueurs d'ondes du mode dominant,
◇ la composante de champ perturbée, par exemple la composante B_y du champ magnétique :

$$B_y = b_0 \sum_{i=1}^{N_m} \cos(k_i x), \tag{6.42}$$

◇ les éléments nécessaires à la résolution spectrale : les poids et la matrice de dérivation spectrale $D_{1\mathrm{D}}$ du problème monodimensionnel,
◇ le pas de temps, de manière à ce qu'il vérifie les conditions de stabilité à la fois de la résolution de la partie advection (schéma de Lax-Wendroff) et de la résolution des équations de Maxwell (schéma de Yee),

$$\Delta t = \Delta x \, \min\left\{1, \, \frac{\alpha}{\xi_N}\right\},$$

◇ le facteur d'échelle, en fonction de la condition initiale.

Remarque VI.1 *Le domaine des impulsions* $[-K, K]^3$ *est choisi tel que :*

$$f^0(x, p_x, p_y, p_z) > 10^{-10}, \quad \forall (p_x, p_y, p_z) \in [-K, K]^3, \, \forall x \in [0, L_x],$$

et le facteur d'échelle est donné par,

$$\alpha = \frac{\xi_N}{K}.$$

• **Boucle en temps :**
La boucle en temps est composée de trois principales étapes :
◇ la résolution de l'équation de Vlasov discrète (cf algorithme page 128) pour chacune des espèces de particules évoluant dans la boîte de simulation,
◇ le calcul des premiers moments de la fonction de distribution par quadrature de Gauss-Hermite,
◇ la résolution des équations de Maxwell par une méthode FDTD.

Chapitre 7

Optimisation et parallélisme

La réalisation de calculs déterministes réalistes pour l'étude des ceintures de Van Allen nécessite à la fois des boîtes de simulation de grande taille, avec des pas d'espace assez petits (quelques longueurs de Debye), mais aussi un nombre important d'itérations en temps nécessaire au développement des phénomènes que l'on veut observer. Compte tenu de la puissance de calcul des machines massivement parallèles du CEA, il est apparu naturel de chercher à exploiter les possibilités offertes par les outils du calcul parallèle. Nous verrons dans une première partie de ce chapitre comment les algorithmes des méthodes numériques employées ont été parallélisés et quels sont les gains en performance (*speed-up*) obtenus par la parallélisation du code HELIOS. Dans une deuxième partie, nous détaillerons l'important travail d'optimisation de code réalisé dans HELIOS pour réduire à nouveau les temps de calcul. L'optimisation est particulièrement adaptée au super-calculateur TERA 10 du CEA. Nous évoquerons les difficultés de stockage des gros volumes de données et les étapes de passage d'un code d'étude à un code prototype de production.

I Parallélisation de la méthode de collocation

La résolution directe ou approchée de très grands systèmes linéaires $Ax = b$ est la brique algorithmique de base pour les applications scientifiques du calcul intensif. C'est souvent l'étape la plus consommatrice aussi bien en temps de calcul qu'en espace mémoire. La résolution performante de ces systèmes passe par la conception et l'utilisation d'algorithmes parallèles. Parmi les différentes techniques de parallélisation, les méthodes de décomposition de domaine sont largement utilisées.

Afin d'obtenir rapidement une réduction des temps de calcul du code HELIOS pour réaliser des calculs 1Dx-3Dv en des temps raisonnables, une méthode par décomposition de domaine a été utilisée. On fait le choix de découper le domaine 1Dx-3Dv selon les impulsions, d'une part parce que le nombre de degrés de liberté en impulsion est en général bien plus grand que celui en espace ($(N+1)^3 >> I$), ce qui permet d'utiliser un nombre de processeurs plus important. D'autre part ce choix minimise les communications entre les processeurs. En effet, un découpage en espace aurait généré un assez grand nombre de communications car le schéma de Lax-Wendroff nécessite, pour le calcul au nœud i, la connaissance des valeurs aux nœuds voisins $i-1$ et $i+1$.

Comme l'indique la figure 7.1, pour un nombre N_p de processeurs, cette décomposition revient à découper le tableau F de taille $(N+1)^3 \times I$, contenant les inconnues du problème (cf algorithme de résolution de l'équation de Vlasov page 128), en N_p sous tableaux F^{loc} de tailles $(N+1)^3/N_p \times I$.

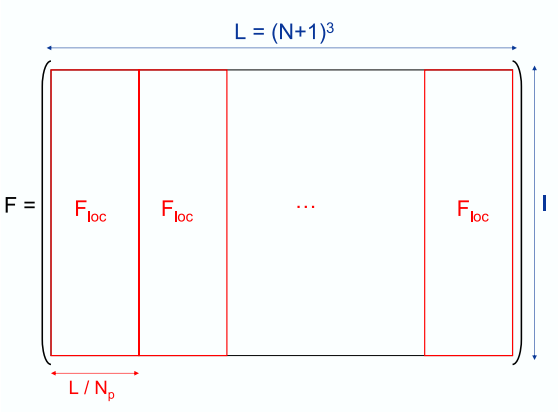


FIG. 7.1 – *Découpage sur N_p processeurs du tableau F des inconnues du problème.*

La parallélisation du code HELIOS a été réalisée à l'aide de la librairie MPI (*Message Passing Interface*) [87]. Les notations des algorithmes qui suivent sont celles introduites au chapitre 6 (page 127). De plus on introduit la notation $L \equiv (N+1)^3$.

L'algorithme parallèle de résolution de l'équation de Vlasov est alors le suivant [1] :

- **Algorithme parallèle de résolution de l'équation de Vlasov**

Données : E_x[I], E_y[I], E_z[I], B_x[I], B_y[I], B_z[I], Δt, Δx, I, N, N_p,
v_x[L], v_y[L], v_z[L], D_{1D}[N+1,N+1], F^{loc}[I,L], F_i^{loc}[L], F_n^{loc}[I]

1. **pour** n=1, L/N_p **faire** *//Boucle sur les colonnes de* F^{loc}
2. $F_n^{loc} \leftarrow$ LW (F_n^{loc}, v_x[n], I, Δx, Δt)
3. F^{loc}[:,n] $\leftarrow F_n^{loc}$
4. **fin pour**
5. **pour** i=1, I^3 **faire** *//Boucle sur les lignes de* F^{loc}
6. $F_i^{loc} \leftarrow$ RK4-parallele$_1$(F_i^{loc}, Δt, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)
7. $F_i^{loc} \leftarrow$ RK4-parallele$_2$(F_i^{loc}, Δt, D_{1D}, E_y[i], B_x[i], B_z[i], v_z, v_x)
8. $F_i^{loc} \leftarrow$ RK4-parallele$_3$(F_i^{loc}, Δt, D_{1D}, E_z[i], B_y[i], B_x[i], v_x, v_y)

[1] Pour simplifier l'écriture, on a écrit un splitting d'ordre un à quatre étapes.

9. $F^{loc}[i, :] \leftarrow F_i^{loc}$

10. **fin pour**

7. **retour** F^{loc}

Dans cet algorithme, les routines $RK4\text{-}parallele_1$, $RK4\text{-}parallele_2$ et $RK4\text{-}parallele_3$ sont des routines spécifiques à la méthode parallélisée.

Afin d'expliciter la parallélisation des routines RK4, on écrit l'algorithme séquentiel de la routine RKA_1, construite de la même façon que $RK4_2$ et $RK4_3$. Dans cet algorithme, les quatre étapes de la méthode à pas fractionnaire consistent à remplir quatre tableaux, notés P_1, P_2, P_3 et P_4, par les produits matrices-vecteurs $B_1 D_1 P_i$, pour $i = 1, ..., 4$ (cf formule (6.24)). Ces produits sont calculés dans la routine D_1. Avec la notation Ex_i, By_i et Bz_i correspondant respectivement au i^{ème} élément des tableaux E_x, B_y et B_z, l'algorithme séquentiel de RKA_1 est le suivant :

- **Algorithme séquentiel de la routine $RK4_1$**

Données : Ex_i, By_i, Bz_i, Δt, N, $v_y[L]$, $v_z[L]$, $D_{1D}[N+1,N+1]$, F[I,L]

1. $P_1[L]$, $P_2[L]$, $P_3[L]$, $P_4[L]$ *//Déclaration de tableaux*

2. $P_1 \leftarrow D_1(F, N, Ex_i, Bz_i, By_i, v_z, v_y, D_{1D})$

3. $P_2 \leftarrow P_1 + \Delta t/2 \quad D_1(P_1, N, Ex_i, Bz_i, By_i, v_z, v_y, D_{1D})$

4. $P_3 \leftarrow P_1 + \Delta t/2 \quad D_1(P_2, N, Ex_i, Bz_i, By_i, v_z, v_y, D_{1D})$

5. $P_4 \leftarrow P_1 + \Delta t \quad D_1(P_3, N, Ex_i, Bz_i, By_i, v_z, v_y, D_{1D})$

6. $F \leftarrow F + \Delta t\ (\ P_1/6 + P_2/3 + P_3/3 + P_4/6)$

7. **retour** F

La parallélisation de cette routine est donnée par l'algorithme suivant et est illustrée par le schéma 7.2 :

- **Algorithme parallèle de la routine $RK4_1$**

Données : Ex_i, By_i, Bz_i, Δt, N, N_p, v_y, v_z, $D_{1D}[N+1,N+1]$, $rang_{proc}$, $F^{loc}[I,L/N_p]$

1. $P_1[L]$, $P_2[L]$, $P_3[L]$, $P_4[L]$, Tmp[L] *//Tableaux globaux*

2. $P_1^{loc}[L/N_p]$, $P_2^{loc}[L/N_p]$, $P_3^{loc}[L/N_p]$, $P_4^{loc}[L/N_p]$ *//Tableaux locaux*

3. $P_1 \leftarrow D_1(F^{loc}, N, Ex_i, Bz_i, By_i, v_z, v_y, D_{1D})$

4. **MPI-Allreduce**(P_1) *//complétion du tableau*

5. $P_1^{loc} \leftarrow$ sous-tableau(P_1, $rang_{proc}+1$, $rang_{proc}+L/N_p+1$)

6. $\mathsf{Tmp} \leftarrow \mathsf{D}_1(\mathsf{P}_1^{loc}, \mathsf{N}, \mathsf{Ex}_i, \mathsf{Bz}_i, \mathsf{By}_i, \mathsf{v}_z, \mathsf{v}_y, \mathsf{D}_{1\mathrm{D}})$
7. **MPI-Allreduce**(Tmp)
8. $\mathsf{P}_2 \leftarrow \mathsf{P}_1 + \Delta\mathsf{t}/2\ \mathsf{Tmp}$
9. $\mathsf{P}_2^{loc} \leftarrow$ sous-tableau(P_2, rang_{proc}+1, rang_{proc}+L/N_p+1)
10. $\mathsf{Tmp} \leftarrow \mathsf{D}_1(\mathsf{P}_2^{loc}, \mathsf{N}, \mathsf{Ex}_i, \mathsf{Bz}_i, \mathsf{By}_i, \mathsf{v}_z, \mathsf{v}_y, \mathsf{D}_{1\mathrm{D}})$
11. **MPI-Allreduce**(Tmp)
12. $\mathsf{P}_3 \leftarrow \mathsf{P}_1 + \Delta\mathsf{t}/2\ \mathsf{Tmp}$
13. $\mathsf{P}_3^{loc} \leftarrow$ sous-tableau(P_3, rang_{proc}+1, rang_{proc}+L/N_p+1)
14. $\mathsf{Tmp} \leftarrow \mathsf{D}_1(\mathsf{P}_3^{loc}, \mathsf{N}, \mathsf{Ex}_i, \mathsf{Bz}_i, \mathsf{By}_i, \mathsf{v}_z, \mathsf{v}_y, \mathsf{D}_{1\mathrm{D}})$
15. **MPI-Allreduce**(Tmp)
16. $\mathsf{P}_4 \leftarrow \mathsf{P}_1 + \Delta\mathsf{t}\ \mathsf{Tmp}$
17. $\mathsf{P}_4^{loc} \leftarrow$ sous-tableau(P_4, rang_{proc}+1, rang_{proc}+L/N_p+1)
18. $\mathsf{F}^{loc} \leftarrow \mathsf{F}^{loc} + \Delta\mathsf{t}\ (\ \mathsf{P}_1^{loc}/6 + \mathsf{P}_2^{loc}/3 + \mathsf{P}_3^{loc}/3 + \mathsf{P}_4^{loc}/6)$
19. **retour** F^{loc}

Le produit matrices-vecteur réalisé dans la routine D_1 sur chaque processeur est incomplet à la sortie de la routine car le processeur ne dispose pas localement de tous les éléments nécessaires à ce calcul. Il faut donc réaliser des communications entre les processeurs pour compléter les tableaux P_1, P_2, P_3 et P_4. La fonction MPI utilisée pour ces communications est la fonction MPI-Allreduce. Cette instruction somme sur chaque processeurs les éléments des tableaux solutions de la routine D_1, les tableaux P_i pour i=1,...,4. Ainsi, à la fin de l'instruction, chaque processeur possède le tableau sommé. Les tableaux P_1^{loc}, P_2^{loc}, P_3^{loc} et P_4^{loc} correspondent, sur chaque processeur, à des sous-tableaux de taille L/N_p, constitués des éléments des tableaux P_i, pour i=1,...,4, compris entre $\mathsf{rang}_{proc}+1$ et $\mathsf{rang}_{proc}+L/N_p+1$, où rang_{proc} est le rang du processeur qui exécute l'instruction.

I.1 Performance de la parallélisation *(speed-up)*

Le *speed-up* (noté s) d'un code parallélisé est le rapport entre le temps passé à réaliser les calculs en séquentiel T_{seq} et le temps passé en parallèle T_{paral} [75],

$$s = \frac{T_{\mathrm{seq}}}{T_{paral}}. \tag{7.1}$$

D'après la loi d'Amdahl [1], pour un problème parallèle donné, le *speed-up* maximum théorique s_{max} vérifie la formule suivante :

$$s_{max} \leq \frac{1}{f_{seq} + \frac{1-f_{seq}}{N_p}} \leq \frac{1}{f_{seq}}, \tag{7.2}$$

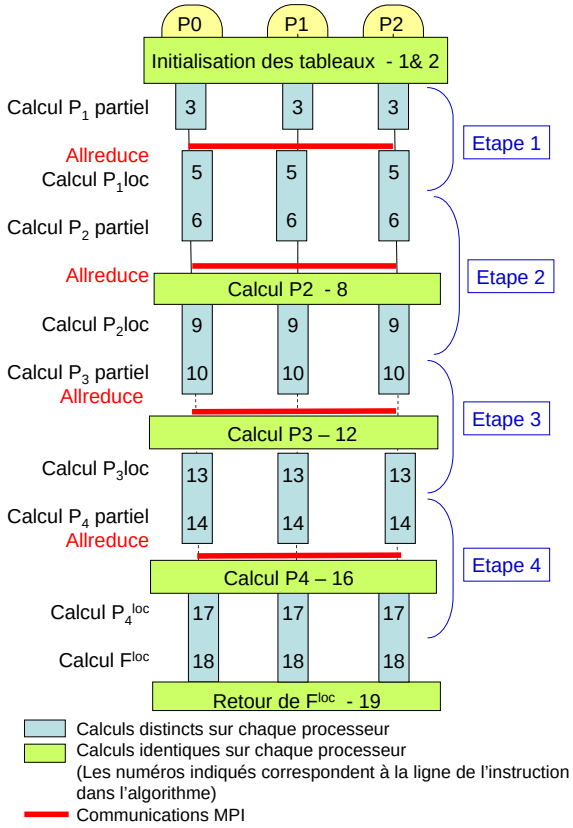


FIG. 7.2 – *Exécution de la routine parallèle* RK4-parallele$_1$ *sur trois processeurs.*

où f_{seq} est fraction de programme qui s'exécute en séquentiel (non parallélisée). Le temps d'exécution séquentielle T_{seq} est la somme,

$$T_{seq} = T_{f_{seq}} + T_{f_{paral}},$$

où Tf_{paral} et $T_{f_{seq}}$ sont respectivement les temps d'exécution des fractions parallélisée et non parallélisée du programme. Le temps d'exécution parallèle théorique optimal $T_{paral-opt}$ est donné par

$$T_{paral-opt} = T_{f_{seq}} + \frac{T_{f_{paral}}}{N_p}.$$

La figure 7.3 montre le *speed-up* du code HELIOS parallélisé pour deux simulations en fonction du nombre de processeurs utilisés. Les paramètres sont $N+1 = 40$ et $I = 80$ pour la première simulation, et $N+1 = 100$ et $I = 100$ pour la seconde. Les simulations nécessitent donc respectivement les calculs de 5.12 10^6 et 10^8 variables par itération. Dans le cas de la simulation la moins coûteuse (courbe bleue), le *speed-up* optimal, obtenu avec 40 processeurs, est de 6.03. Pour la deuxième simulation (courbe rouge), les *speed-up* obtenus sont meilleurs : de 17.2 pour 100 processeurs. Ainsi, la parallélisation des calculs est plus efficace pour des volumes de calcul importants pour lesquels le temps d'exécution en séquentiel est très grand : environ 9.10^3 secondes par itération pour la

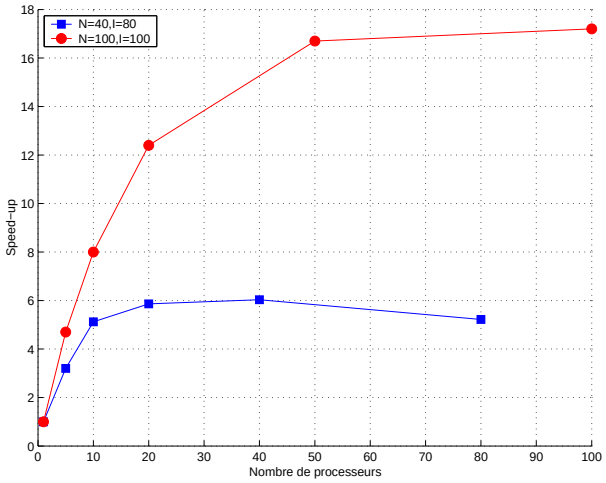


FIG. 7.3 – *Speed-up de la parallélisation du code HELIOS.*

simulation dont les paramètres sont $N = 100$ et $I = 100$. La parallélisation permet de réaliser les mêmes calculs en 530 secondes sur 100 processeurs. On peut espérer que le *speed-up* soit encore plus élevé sur un plus grand nombre de variables.

Même si la parallélisation a permis une réduction importante du temps de calcul de l'exécution du code HELIOS, ces temps sont encore trop longs pour des calculs réalistes de la dynamique des ceintures de Van Allen. En effet, nous avons considéré un cas nécessitant au minimum 40 points de collocation par direction d'impulsion et 1000 points en espace, compte tenu des longueurs d'ondes des modes se développant dans la simulation et du critère sur le pas d'espace,

$$\Delta x \approx \beta \lambda_d,$$

où $\beta < 4$ et λ_d est la longueur de Debye. Pour deux espèces de particules évoluant dans la boîte de simulation, il est nécessaire de calculer deux routines Vlasov par itération. Le temps de calcul pour une itération est alors d'environ 410 secondes. Ainsi, si l'on doit exécuter de l'ordre de 20000 itérations, ce qui représente un bon ordre de grandeur pour une simulation réaliste, le calcul est obtenu après 100 jours d'exécution en continu en machine, ce qui est très long à réaliser en pratique en ajoutant les temps d'attente (cf paragraphe suivant). Ainsi, afin de réduire à nouveau les temps de calcul, un travail d'optimisation de code a alors été réalisé sur HELIOS.

II Travail d'optimisation du code HELIOS sur le supercalculateur TERA 10

Le travail d'optimisation du code HELIOS et le passage du code d'étude à un code de production ont été réalisés en collaboration avec Jacques Bernard Lekien du Département Sciences de la Simulation et de l'Information (DSSI) du CEA de Bruyères-Le-Châtel.

II.1 Le supercalculateur TERA 10

Afin de subvenir aux besoins grandissants de moyens de calcul efficaces permettant d'améliorer les modèles développés au CEA, le centre de Bruyères Le Châtel s'est doté d'une grande puissance de calcul. En 2006, le supercalculateur le plus puissant d'Europe, TERA 10 est opérationnel sur le site. Il est constitué de 9984 processeurs et sa puissance de calcul atteint les 60 teraflops, ce qui signifie que la machine est capable de réaliser plus de 60 000 milliards d'opérations par seconde. Conçue par BULL, la machine TERA 10 forme une grappe (*cluster*) de 624 nœuds de 16 processeurs chacun ; parmi eux, 547 possèdent 48 giga-octets de mémoire et 55 en possèdent 128 giga-octets.

II.2 Etude de performance du code *(profiling)*

Dans une première version du code HELIOS, la librairie C++ *Newmat10*, disponible sur internet [90], a été utilisée. Cette librairie contient des objets C++ de type matrice, vecteur ligne, vecteur colonne, matrice identité, matrice bande... Elle permet les opérations courantes entre les matrices et les vecteurs, par exemple les sommes, les multiplications, les transpositions, les matrices inverses, les concaténations, les décompositions de Cholesky, les FFT... L'emploi d'une telle librarie permet une très bonne lisibilité du code, mais on peut se demander s'il est vraiment bien adapté au calcul haute performance.

Une analyse du coût des différentes fonctions (*profiling*) du code parallélisé, au cours d'une itération, a mis en évidence le fait que la librarie employée était inadaptée à des tableaux de grande taille et donc en particulier à des problèmes de dimension supérieure à deux.

```
Flat profile:

 %     cumulative  self
time    seconds   seconds   name
28.39     45.94    45.94     GeneralMatrix::GetStore()
15.51     71.03    25.09     Matrix::operator()(int, int)
6.96      82.29    11.26     D1F_parallelise_opt(Matrix, int, int, int, double, d
ouble, double, ColumnVector, ColumnVector, double*, double*) (routines_parallele
s_me.cpp:477 @ 40000000000627f1)
6.50      92.81    10.52     ColumnVector::operator()(int)
3.34      98.22     5.40     D3F_parallelise_opt(Matrix, int, int, int, double, d
ouble, double, ColumnVector, ColumnVector, double*, double*) (routines_parallele
s_me.cpp:534 @ 4000000000006b111)
2.89     102.89     4.67     D2F_parallelise_opt(Matrix, int, int, int, double, d
ouble, double, ColumnVector, ColumnVector, double*, double*) (routines_parallele
s_me.cpp:505 @ 4000000000066cb1)
```

FIG. 7.4 – *Etude de coûts, en temps CPU, des routines du code HELIOS (profile) sur une itération, avec le logiciel "gprof". Les paramètres de la simulation sont : N+1 =40 et I=100.*

La figure 7.4 montre un exemple de fichier d'analyse de *profile* du code avec les paramètres de simulation $N + 1 = 40$ et $I = 100$. Seules les premières lignes du fichier, correspondant aux routines les plus coûteuses en temps CPU, sont rapportées. On constate que plus de 60% du temps CPU est passé pour le stockage des éléments des objets matrices et vecteurs et pour l'accès en mémoire de ces éléments via l'opérateur surchargé "( )" (accesseur). Cette analyse montre également que les routines D_1, D_2

et D_3 sont coûteuses en temps CPU. On a appelé D_2 et D_3 les routines utilisées respectivement dans $\mathsf{RK4\text{-}parallele}_2$ et $\mathsf{RK4\text{-}parallele}_3$ et qui sont similaires à la routine D_1 dans $\mathsf{RK4\text{-}parallele}_1$. On pouvait s'attendre à ce que ces routines soient coûteuses en temps CPU, car elles contiennent un nombre important de boucles pour le calcul des éléments du vecteur défini par B_1D_1F : $(N+1)^4$ boucles en séquentiel et $(N+1)^4/N_p^3$ en parallèle. De plus, chacune de ces routines est appelée quatre fois dans la routine RK4-parallele à laquelle elle est associée ; il y a donc en tout douze boucles de taille $(N+1)^4/N_p^3$ à calculer à chaque itération.

La première étape d'optimisation du code HELIOS a donc consisté à remplacer les objets de la librarie *Newmat10* par de simples tableaux au standard ANSI C.

II.3 Optimisation des boucles

Lorsque le code contient plusieurs boucles imbriquées, lors de parcours de tableaux tridimensionnels par exemple, le compilateur préfère vectoriser la boucle de façon à ce que la distance à parcourir en mémoire pour accéder aux données, soit minimum (recherche du *stride* minimum). Un compilateur performant choisira de vectoriser la boucle interne, pour laquelle le *stride* vaut un (les éléments recherchés sont côte-à-côte en mémoire).

Trois des quatre boucles imbriquées, présentes dans les routines D_1, D_2 et D_3, sont de taille identique $(N+1)/N_p$ et la dernière est de taille $(N+1)$. Il est donc optimal d'intervertir les boucles telles que la boucle interne soit la boucle la plus longue, de taille $(N+1)$.

Des distances importantes à parcourir en mémoire peuvent générer des problèmes de *cache* ; les accès en mémoire des éléments stockés ralentissent fortement les calculs. Dans le cas des routines de type D_1, appelées en tout douze fois par itération, les "sauts" en mémoire (*stride*) peuvent aller jusqu'à $[(N+1)/N_p]^3$ éléments.

Afin d'améliorer la performance de ces boucles, on a utilisé une directive séquentielle propre au compilateur C++ de la machine TERA 10. La directive `#pragma ivdep`, placée avant la boucle, améliore la vectorisation si la boucle est indépendante de l'ordre dans laquelle elle est exécutée. Le travail a alors consisté à réécrire les quatre boucles imbriquées en seulement deux boucles, dont l'une, de taille $[(N+1)/N_p]^3$, peut être exécutée dans n'importe quel ordre. La directive `#pragma ivdep` est alors utilisée pour cette boucle.

L'algorithme suivant illustre l'optimisation faite sur les boucles. La variable rang_{proc} désigne le rang du processeur sur lequel la routine est exécutée et la routine division-entiere permet, pour un entier k compris entre 1 et $(N+1)^3$, de récupérer les indices (l,m,n) tels que,

$$k = (N+1)^2(l-1) + (N+1)(m-1) + n.$$

- **Algorithme de la routine D_1 optimisée**

Données : Ex_i, By_i, Bz_i, N, v_y[L], v_z[L], F^{loc}[I,L/N_p], rang_{proc}

1. Produit[L] // *Déclaration de la solution*
2. **#pragma ivdep**

3. **pour** compteur=1,L/N_p **faire**
4. k ← $rang_{proc}$ L/N_p + compteur + 1
5. (l,m,n) ← division-entiere(k,N)
6. **pour** i=1,N+1 **faire**
7. j=$(N+1)^2$(l-1)+(N+1)(j-1)+n
8. Produit[j] ← Produit[j]+D_{1D}[i,m]. F^{loc}[compteur]
.(-Ex_i-Bz_i.v_y[j] + By_i.v_z[j])
9. **fin pour**
10. **fin pour**
11. **retour** Produit

Retirer les incrémentations d'indices du contenu d'une boucle permet généralement au calcul de ce contenu de ne pas dépendre de l'ordre dans lequel il est exécuté. Ainsi, la première boucle de l'algorithme, précédemment écrite sur l'indice k, comme suit :

$$\textbf{pour } k = rang_{proc}\ L/N_p + 1,\ (rang_{proc}+1)\ L/N_p$$

contenait l'incrémentation de la variable compteur et a donc été modifiée par une boucle sur compteur (ligne 3 de l'algorithme).

II.4 Parallélisation dans une seule direction d'impulsion

On a observé que l'efficacité de la parallélisation était réduite par les optimisations réalisées sur le code HELIOS. En particulier, le coût des communications entre les processeurs sont devenus pénalisants. En effet les calculs, devenant beaucoup plus efficaces, sont ralentis par les communications quand le nombre de processeurs augmente. En effet, la loi de d'Amdahl (7.2) est optimiste, elle ne tient pas compte du travail dû à la parallélisation. En effet, une opération collective (instruction MPI) a pour coût $T_{\text{op-paral}}$:

$$T_{\text{op-paral}} = \log_2(N_p)(T_{\text{com}} + T_{\text{cal-op}}) + T_{\text{lat}}, \tag{7.3}$$

où

- T_{com} est le temps d'un envoi vers un processeurs,
- $T_{\text{cal-op}}$ est la temps de calcul de l'opération collective,
- T_{lat} est le temps de latence avant une communication (synchronisation des processeurs).

Ainsi, un code peut être plus performant avec une fraction de programme parallélisé moins importante,

Le nombre optimal de processeurs, pour une simulation de paramètres $I = 80$ et $N + 1 = 40$, qui était par exemple de 40 dans le cas non optimisé (cf figure 7.3), a été réduit à 5 processeurs pour le code optimisé.

Ainsi, de manière à réduire les coûts des communications et augmenter le nombre optimal de processeurs à utiliser, la technique de parallélisation a été revue et la fraction de programme parallélisé a été réduite. Si on parallélise dans une seule direction d'impulsion, on dipose localement des éléments correspondants aux deux autres directions et l'on peut ainsi éviter de nombreuses communications entre les processeurs. Paralléliser dans une direction d'impulsion revient à choisir un nombre de processeurs inférieur à $(N+1)$. Ainsi, pour deux des trois routines D_1, D_2 et D_3, les produits matrices-vecteur réalisés sont complets à la fin de la routine et la communication MPI-Allreduce devient inutile. / On a construit le tableau F des inconnues, de la manière suivante,

$$\mathsf{F[(k\text{-}1)(N+1)^2+(l\text{-}1)(N+1)+\ m,i]},$$

avec les indices k, l et m variant entre 1 et $(N+1)$ et correspondant respectivement aux directions p_x, p_y et p_z. Ainsi avec un nombre de processeurs inférieur ou égal à $(N+1)$, les directions p_y et p_z sont privilégiées : les tableaux P_i des routines $\mathsf{RK4\text{-}parallele}_2$ et $\mathsf{RK4\text{-}parallele}_3$ peuvent être sommés localement sur chaque processeur. Les communications MPI deviennent inutiles dans ces routines. Le nombre de communications diminue alors grandement en passant de 12 à seulement 4 par itération[2].

II.5 Passage à un code de production

Dans le but de réaliser un calcul réaliste des ceintures de radiation, le code HELIOS est passé d'un code d'étude à un code de production, ce qui signifie qu'il a été adapté au centre de calcul du CEA, de manière à pouvoir réaliser des calculs coûteux et rester longtemps en machine.

Stockage hiérarchique et partagé (SHERPA)

Sur le centre de Bruyères-Le-Châtel, l'augmentation du volume de données scientifiques (jusqu'à 1To pour un cas) et des besoins de débits (environs 100Mo/s par fichier), a nécessité la séparation des fonctionnalités de calculateur et de serveur de fichiers (projet SHERPA : Stockage HiERarchique et PArtagé). La nouvelle architecture du centre de calcul (depuis 1997) permet la migration et la sauvegarde des fichiers présents sur les calculateurs et en particulier sur le super-calculateur TERA 10 depuis 2006 (cf figure 7.5).

Afin de disposer des meilleures performances de lectures/écritures de fichiers, il existe sur le supercalculateur un système de *cache*. Ce *cache* est constitué d'un espace disque local aux calculateurs et d'une interface logicielle permettant de maintenir la cohérence entre ce *cache* et le serveur de stockage HPSS (High Performance Storage System). Toutes les lectures/écritures de fichiers sont donc faites localement au calculateur, puis les fichiers sont copiés sur le serveur de stockage. Celui-ci gère des disques et des bandes capables de maintenir un très gros volume de données. Pour des raisons de performance, les lectures/écritures des fichiers ne peuvent se faire directement sur le serveur de stockage en raison d'un temps de latence, fonction de la disponibilité des bandes, qui s'ajoute au temps d'écriture.

[2]si l'on considère un splitting d'ordre un en temps

Le système de fichiers, local au calculateur, est nommé `/cache-prot` (cache des protections - cf paragraphe suivant). Il y en a un par calculateur, ou serveur connecté au serveur de stockage. Le système de fichiers HPSS du serveur de stockage est nommé `/prot` (protections). Il est unique sur le centre de calcul.

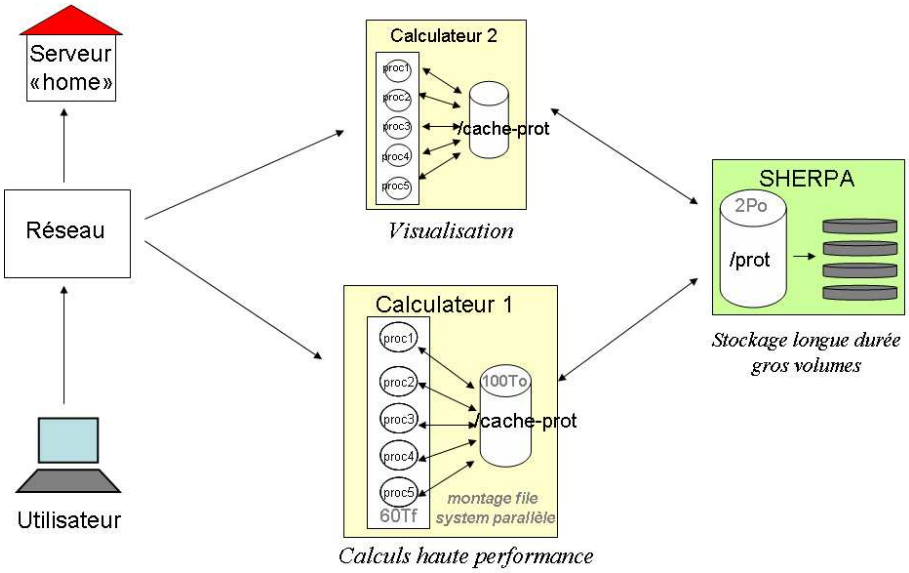


FIG. 7.5 – *Schéma simplifié de l'architecture du centre de calcul de Bruyères-le-Châtel.*

Gestion des protections-reprises

Compte tenu du grand nombre continu d'utilisateurs du super-calculateur, le passage des calculs en machine sont gérés par un serveur qui définit un ordre de passage en fonction des priorités des calculs. Ces priorités sont définies par un certain nombre de critères : le nombre de processeurs demandés, la disponibilité des processeurs, la durée de calcul demandée par l'utilisateur... Les passages en machine ne durent pas plus de huit heures. Ainsi, pour les calculs qui ne sont pas terminés à la fin d'un passage en machine, il est nécessaire de mettre en place un système de *protections-reprises* des calculs. Ce système consiste à ajouter dans le code de calcul une "protection" permettant de bien sauvegarder toutes les données nécessaires à un passage supplémentaire en machine et une "reprise" qui permet la relecture des données stockées et le redémarage des calculs à l'endroit où ils se sont arrêtés. Une fois ce système mis en place, l'utilisateur peut demander le nombre de passages qu'il désire ; ainsi, tant que ce nombre n'est pas atteint, à la fin d'un passage, le calcul est remis automatiquement dans la file d'attente de la machine pour un passage supplémentaire.

Les fichiers de reprises doivent être sauvegardés sur le `/prot` afin de ne pas être perdus. Il est nécessaire de coupler le système de "protections-reprises" aux instructions de communications entre le serveur de calcul et le serveur de stockage. Les fichiers de reprise sont écrits sur le /cache-prot, copiés sur le `/prot`, puis relus sur le `/cache-prot`.

III Résultats : gains en performance obtenus avec le code parallèle optimisé

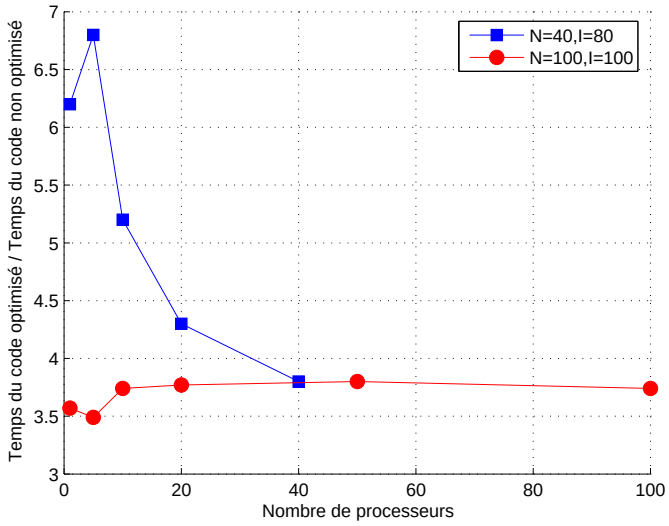
La figure 7.6 montre les performances du code optimisé : la réduction du temps de calcul et le *speed-up* obtenu.

Sur le premier graphe (a), on peut observer que l'optimisation a permis, en moyenne, la réduction d'un facteur 3.7 du temps d'exécution du calcul à 10^8 degrés de liberté par pas de temps (courbe rouge). Pour des calculs plus petits, à 5.12 10^6 degrés de liberté par pas de temps (courbe bleue), le taux de réduction du temps de calcul est plus important : de 6.2 en séquentiel, 6.8 sur 5 processeurs, ou encore 5.2 sur 10 processeurs. En effet, les nombreuses boucles du code de calcul ont été vectorisées de façon optimale par le compilateur grâce aux instructions de type `#pragma ivdep`. Le code est alors très efficace pour un petit nombre de processeurs quand la charge de calculs est relativement faible. Dans ce cas, l'augmentation du nombre de processeurs réduit l'efficacité du code : la charge de calculs par processeur est trop faible et les communications, qui sont de plus en plus nombreuses quand le nombre de processeurs augmente, ralentissent les calculs.

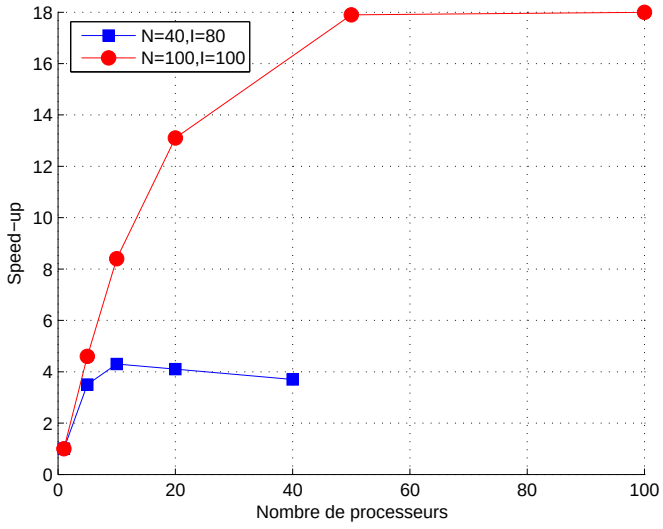
La grande efficacité du code optimisé pour des calculs relativement petits est également illustrée sur le graphe (b) de la figure 7.6. On peut voir en effet que les *speed-up* obtenus avec le nouveau code sont plus petits qu'avant l'optimisation pour $N = 40$ et $I = 80$ (courbe bleue) : le meilleur *speed-up* est de 3.7 au lieu de 6 dans le cas non optimisé (cf figure 7.3). Ceci est dû au fait que le temps séquentiel est beaucoup plus petit qu'avec le code non-optimisé : 16.5 secondes au lieu de 105 secondes. On remarque que ce temps séquentiel de 16.5 secondes correspond au même ordre de grandeur que le temps de calcul obtenu avec le code non-optimisé sur 40 processeurs (17.4 secondes). Dans le cas d'un calcul plus coûteux, $N = 100$ et $I = 100$ (courbe rouge), les *speed-up* sont meilleurs que ceux obtenus précédement avec le code non-optimisé : la valeur optimale, obtenue avec 100 processeurs, est de 18 au lieu de 17.2 avant l'optimisation.

Une nouvelle analyse de *profile* du code HELIOS optimisé (cf figure 7.7) montre qu'une grande partie du temps CPU (environ 45% dans le cas $N = 40$, $I = 100$) est passé dans la routine $\mathsf{RKA\text{-}parallele}_1$. En effet, cette routine est la seule contenant des communications MPI. De plus, d'après l'ordre dans lequel le tableau solution F est rangé, la routine D_1, appelée quatre fois dans $\mathsf{RKA\text{-}parallele}_1$, ne permet pas une bonne vectorisation et nécessite des "sauts en mémoire" (*stride*) de taille $[(N+1)/N_p]^3$.

Les réductions importantes des temps de calcul, apportées par le code HELIOS optimisé, ont permis de réaliser des calculs physiques d'instabilités Weibel et whistlers à une et deux espèces d'électrons. Ces calculs sont présentés au chapitre suivant.

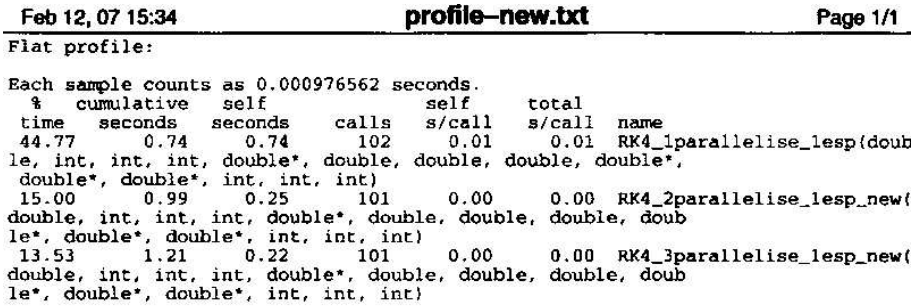


(*a*)



(*b*)

FIG. 7.6 – *Taux de réduction des temps de calcul grâce au travail d'optimisation réalisé sur le code HELIOS et speed-up du code optimisé.*



```
Feb 12, 07 15:34                profile-new.txt                Page 1/1
Flat profile:

Each sample counts as 0.000976562 seconds.
  %   cumulative   self              self     total
 time   seconds   seconds    calls   s/call   s/call  name
 44.77      0.74     0.74      102     0.01     0.01  RK4_1parallelise_1esp(doub
le, int, int, int, double*, double, double, double*,
 double*, double*, int, int, int)
 15.00      0.99     0.25      101     0.00     0.00  RK4_2parallelise_1esp_new(
double, int, int, int, double*, double, double, double, doub
le*, double*, double*, int, int, int)
 13.53      1.21     0.22      101     0.00     0.00  RK4_3parallelise_1esp_new(
double, int, int, int, double*, double, double, double, doub
le*, double*, double*, int, int, int)
```

FIG. 7.7 – *Etude de coûts, en temps CPU, des routines du code HELIOS optimisé (profile) sur une itération, avec le logiciel "gprof". Les paramètres de la simulation sont :N+1 =40, I=100 et* $N_p = 20$.

Chapitre 8

Résultats 1Dx-3Dv

Dans ce chapitre, nous présentons les calculs de validation du code HELIOS 1Dx-3Dv. Nous cherchons à reproduire le développement linéaire et la saturation non-linéaire des ondes pour des instabilités de type Weibel dans le cas de plasmas sans champ magnétique statique et pour des instabilités de type whistler dans le cas de plasmas anisotropes. Dans un premier temps, ces calculs sont réalisés pour des plasmas ne contenant qu'une espèce d'électrons non-relativistes. Puis nous étudions une instabilité Weibel dans un plasma à deux espèces d'électrons relativistes. Enfin nous réalisons un premier calcul d'instabilité whistler dans les ceintures de Van Allen, au niveau de l'orbite géostationnaire. Les simulations sont réalisées avec le code HELIOS parallélisé et optimisé. Nous comparons les valeurs de taux de croissance obtenues numériquement, avec les valeurs prédites par la théorie linéaire. Une partie des résultats est également comparée à des résultats PIC, obtenus avec le code CALDER développé au Département de Physique Théorique et Appliquée du CEA [82]. Ces résultats ont été fournis par Laurent Grémillet[1]. On rappelle que dans la version actuelle du code, les conditions aux bords du domaine spatial sont périodiques.

I Cas tests classiques avec une espèce d'électrons

Dans ces premiers cas tests, le plasma est non-relativiste et ne contient qu'une seule espèce d'électrons. Les ions sont considérés comme immobiles et assurent la neutralité électrique globale du système.

I.1 Instabilité de type Weibel

Les instabilités de type Weibel se développent dans des plasmas ne comprenant pas de champ magnétique statique.

Dans ce cas test l'instabilité est générée par la présence de deux faisceaux d'électrons se propageant dans des directions opposées. On choisit une distribution initiale maxwellienne dans la direction de propagation v_x et dans la direction v_y, et une distribution "double faisceau" dans la direction v_z :

[1]Département de Physique Théorique et Appliquée, CEA Bruyères-Le-Châtel

$$f^0(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{v_{th}^3 \pi^{3/2}} e^{-(v_x^2+v_y^2)/v_{th}^2} \left[\frac{1}{2} e^{-(v_z-v_0)^2/v_{th}^2} + \frac{1}{2} e^{-(v_z+v_0)^2/v_{th}^2} \right], \tag{8.1}$$

avec une vitesse thermique $v_{th} = 0.0447$ et une vitesse de dérive $v_0 = 0.2$.

La figure 8.1 montre que la méthode HSCM permet une bonne reconstruction de la condition initiale (8.1) avec un "petit" nombre de points de collocation : $N = 20$.

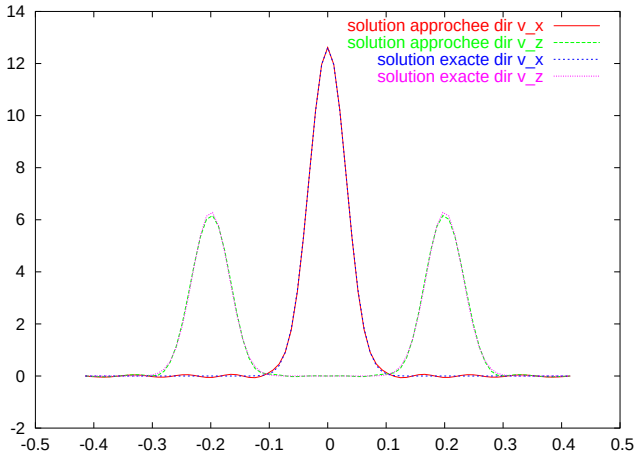


FIG. 8.1 – *Fonction d'interpolation de la condition initiale, obtenue avec la méthode HSCM, pour l'instabilité Weibel de paramètres* $v_{th} = 0.0447$ *et* $v_0 = 0.2$*, avec 20 points de collocation.*

Il n'y a pas de champ électrique initialement dans la boîte et l'on introduit une perturbation d'amplitude $b_0 = 10^{-3}$ uniquement sur la composante B_y du champ magnétique :

$$B_y = b_0 \sin(kx), \tag{8.2}$$

avec $k = 1$. Les résultats de la résolution de la relation de dispersion linéaire (figure 8.2) montrent que le mode $k = 1$ conduit au développement d'une instabilité purement croissante ($\omega_r = 0$) conformément à la théorie [34].

La boîte spatiale, de taille L_x, est déterminée de manière à ce qu'elle contienne deux longueurs d'onde du mode choisi : $L_x = 4\pi$. Les résultats sont obtenus avec 40 points de collocation par direction de vitesse et 80 points en espace.

Sur la figure 8.3, on trace l'évolution en temps des énergies cinétique, magnétique et électrique en échelle logarithmique. Conformément à la théorie, lors du régime linéaire ($t < 50\omega_{pe}^{-1}$), l'énergie magnétique croît de façon exponentielle avec un taux $\gamma = 0.138$. La saturation non linéaire intervient à $t = 50\omega_{pe}^{-1}$. Les résultats obtenus sont précis avec peu de points de collocation et sont comparables à ceux de Mangeney *et al.* [86] et de Califano *et al.* [24].

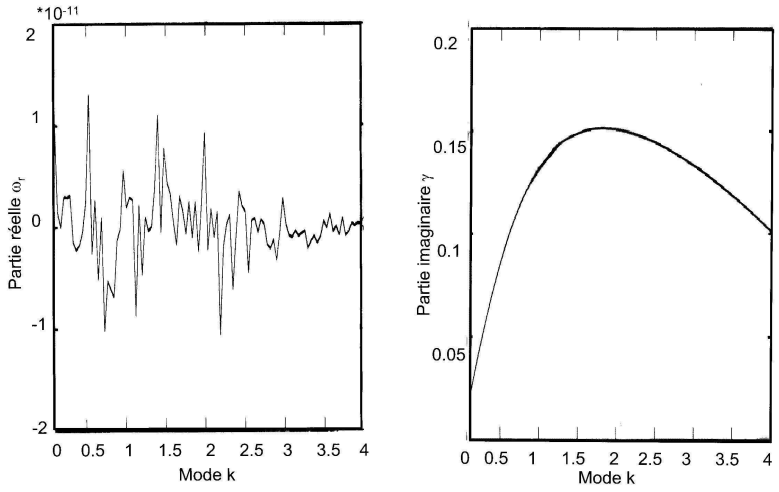


FIG. 8.2 – *Résolution de la relation de dispersion pour l'instabilité Weibel telle que* $v_0 = 0.2$ *et* $v_{th}^2 = 0.002$.

I.2 Instabilités de type whistler

Présentation des cas tests

Nous étudions dans cette partie le développement d'instabilités dans des plasmas initialement magnétisés. On ajoute alors un champ magnétique uniforme et constant le long de l'axe de simulation ($B_x \equiv B_0$). Les instabilités de mode whistler se développent à partir d'une population d'électrons hors équilibre, dans un plasma immergé dans un champ magnétique uniforme.

Dans ces cas tests, le plasma est constitué d'une espèce électronique anisotrope et d'un fond neutralisant d'ions immobiles. L'excitation des ondes électromagnétiques est générée par l'anisotropie de température des électrons,

$$a = \frac{T_\perp}{T_\parallel} > 1.$$

La distribution initiale des électrons est donnée par :

$$f^0(v_x, v_y, v_z) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} a v_{T_\parallel}^3} \exp\left(-\frac{v_x^2}{v_{th}^2}\right) \exp\left(-\frac{v_y^2 + v_z^2}{a v_{th}^2}\right), \tag{8.3}$$

où v_{th} est la vitesse thermique dans la direction parallèle. Avec cette distribution, les ondes électrostatiques longitudinales ne sont pas excitées. Le champ magnétostatique est $B_0 = 0.5$. On réalise des simulations avec différentes valeurs d'anisotropie a. Le domaine spatial est de dimension :

$$L_x = \frac{2\pi N_{dom}}{k_{dom}},$$

où k_{dom} est le mode dominant de l'instabilité, que l'on détermine à partir des résultats fournis par la théorie linéaire et N_{dom} est le nombre de longueurs d'onde du mode

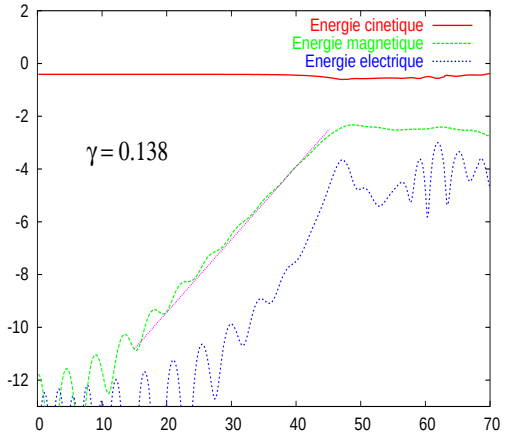


FIG. 8.3 – *Evolution en temps des énergies cinétique, magnétique et électrique au cours d'une instabilité Weibel, en échelle logarithmique. Les paramètres de la simulation sont :* $I = 80$, $N = 40$, $L_x = 4\pi$, $b_0 = 10^{-3}$, $v_{th} = 0.0447$ *et* $v_0 = 0.2$.

dominant. Chacune des simulations présentées dans ce paragraphe est initialisée avec une perturbation de champ prenant en compte un nombre N_m de modes k_i se développant dans la boîte de simulation. La composante B_y du champ magnétique est alors de la forme,

$$B_y = b_0 \sum_{i=1}^{N_m} \cos(k_i x).$$

Les modes k_i, au nombre de trois ou quatre dans nos simulations, sont choisis à partir des résultats numériques de la relation de dispersion de chaque simulation. La perturbation sur le champ magnétique est prise d'amplitude $b_0 = 10^{-3}$.

Cas d'une anisotropie de température a=4

Dans ce cas test, on réalise une simulation d'instabilité whistler dans un plasma d'anisotropie $a = 4$. Ce même calcul a été réalisé par Ossakow *et al.* [94] au moyen d'un code PIC. On prend la vitesse thermique parallèle $v_{th} = 0.31$.

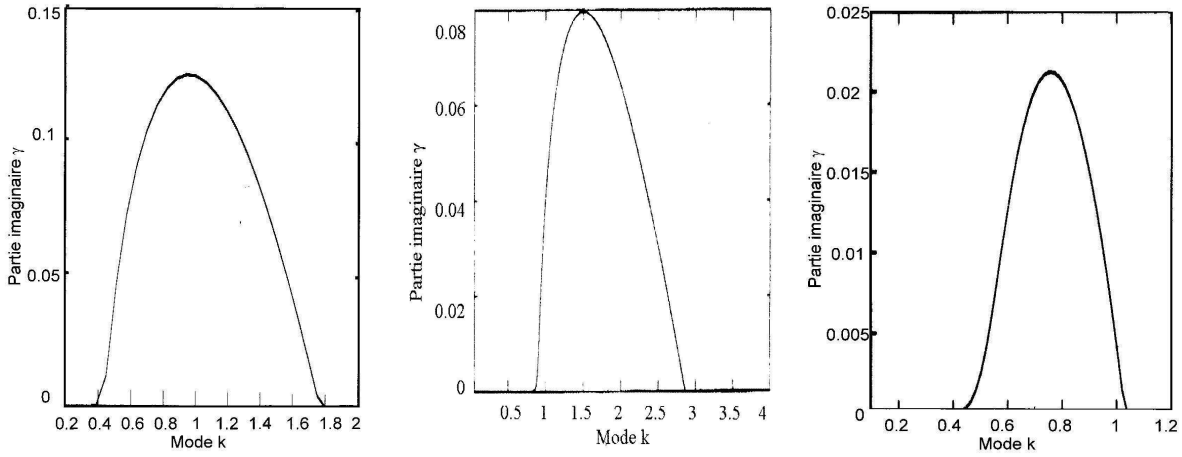
L'analyse linéaire nous fournit les caractéristiques, fréquence ω_r et taux de croissance γ, des modes se développant dans la boîte de simulation. D'après la résolution numérique de la relation de dispersion (figure 8.4), on choisit de perturber initialement les trois modes $k_1 = 0.5$, $k_2 = 1$ et $k_3 = 1.5$. Dans cette simulation, le mode dominant est $k_{dom} = k_2 = 1$.

Remarque I.1 *Contrairement aux codes PIC, les codes Vlasov permettent d'introduire, dans la simulation, les modes voulus et ainsi de rester maître des conditions initiales.*

La figure 8.4(a) donne le taux de croissance du mode dominant k_2 de l'instabilité :

$$\gamma = 0.125. \tag{8.4}$$

Les résultats, figures 8.5 et 8.6, sont obtenus avec 40 points de collocation par direction



(*a*) $a = 4,\ v_{th} = 0.31$ (*b*) $a = 9,\ v_{th} = 0.08$ (*c*) $a = 2,\ v_{th} = 0.31$

FIG. 8.4 – *Résultats de résolutions numériques de relations de dispersion pour des instabilités whistlers dans différents plasmas anisotropes.*

de vitesse et 80 points en espace. La figure 8.5(a) présente la variation au cours du temps de l'énergie des champs, l'énergie électrique sommée à l'énergie magnétique,

$$E_{champs}(t) - E_{champs}(t = 0),$$

de l'énergie cinétique,

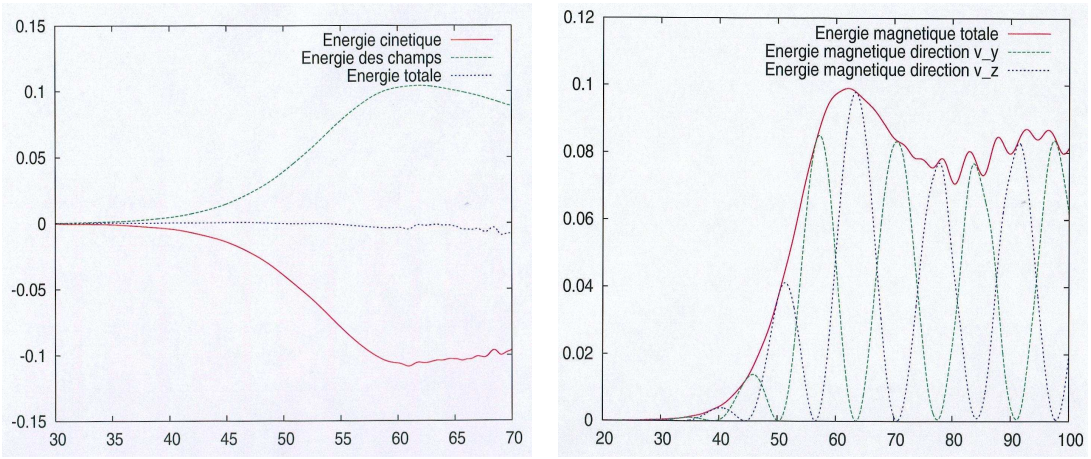
$$E_{cin}(t) - E_{cin}(t = 0),$$

et de l'énergie totale,

$$E_{tot}(t) - E_{tot}(t = 0).$$

Ces énergies sont intégrées sur la boîte de simulation. Nous observons sur la figure 8.5(a), que l'énergie des champs croît aux dépens de l'énergie cinétique et de manière à ce que l'énergie totale du système soit conservée. La figure 8.5(b) montre l'évolution en temps des énergies magnétiques transverses, ainsi que leur somme $(B_y^2 + B_z^2)/8\pi$. On peut voir sur cette figure que ces composantes transverses sont pratiquement en opposition de phase. Cela confirme la présence dans la simulation de modes whistlers polarisés circulairement. La figure 8.6 montre une comparaison des résultats obtenus avec le code HELIOS et des résultats PIC d'Ossakow *et al.* [94]. Les courbes 8.6(a) représentent les composantes transverses de l'énergie magnétique sur un intervalle de temps de $30\omega_{pe}^{-1}$, en échelle logarithmique. On peut observer sur ces courbes, de façon précise, que l'opposition de phase des énergies magnétiques transverses est aussi bien reproduite par le code PIC que par le code déterministe. Les figures 8.6(b) comparent l'énergie magnétique au cours du temps, en échelle logarithmique. On peut remarquer que la saturation apparaît à des instants différents dans les deux simulations : à $60\omega_{pe}^{-1}$ avec le code HELIOS et à $40\omega_{pe}^{-1}$ avec le code PIC d'Ossakow *et al.* En effet, l'instant de saturation dépend de l'initialisation des champs dans le code : de l'amplitude b_0 de la perturbation en déterministe et de niveau de bruit en PIC. Nous vérifions, dans le cas de notre simulation, que l'instabilité des ondes magnétiques a le bon taux de croissance : $\gamma = 0.117$. Ce

taux est un peu inférieur à la valeur théorique du mode dominant car plusieurs modes sont présents dans la simulation. Ainsi, la comparaison d'une simulation déterministe (HELIOS) avec une simulation PIC (Ossakow *et al* [94]), présentée à la figure 8.6, montre le bon accord entre les deux approches. La validité des résultats est confirmée par la valeur de taux de croissance prédite par la théorie linéaire : $\gamma_{th} = 0.125$.



(*a*) (*b*)

FIG. 8.5 – *Variation au cours du temps des énergies des champs, cinétique et totale (a) et des énergies magnétiques transverses (b) pour une instabilité whistler telle que* $a = 4$, $v_{th} = 0.31$, $I = 80$, $N = 40$, $N_p = 40$, $L_x = 4\pi$, $\Delta t = 0.029$ *et* $b_0 = 10^{-3}$.

Les résultats jusqu'à $100\omega_{pe}^{-1}$ont été obtenus en 3481 itérations en temps du code HELIOS, ce qui correspond à $4h15$ de calculs sur 40 processeurs ($N_p = 40$) de la machine TERA 10.

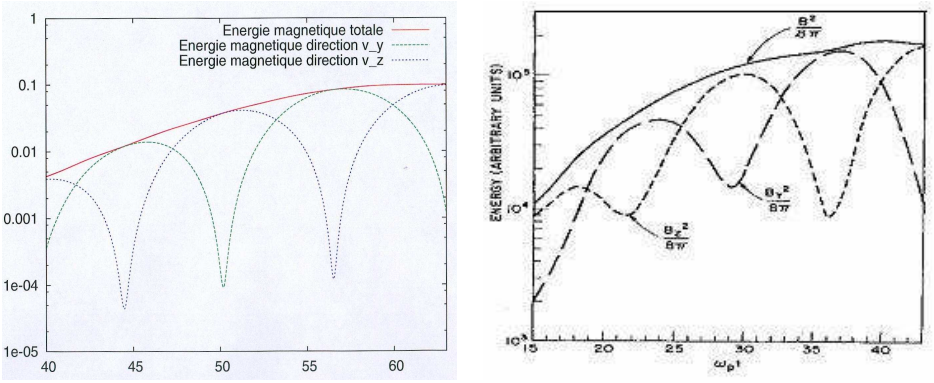
Dans ces simulations, le choix du facteur d'échelle est réalisé en fonction du facteur d'anisotropie de la condition initiale. En effet celui-ci est calibré à partir de la forme de la maxwellienne dans une des directions transverses, cette maxwellienne étant plus étalée. Par conséquent, plus le facteur d'anisotropie est grand, moins il y a de points de collocation utiles pour la reconstruction de la fonction de distribution dans la direction parallèle. Pour illustrer cet effet, nous présentons au paragraphe suivant un cas d'instabilité whistler dans un plasma fortement anisotrope ($a = 9$).

Cas d'une forte anisotropie de température a=9

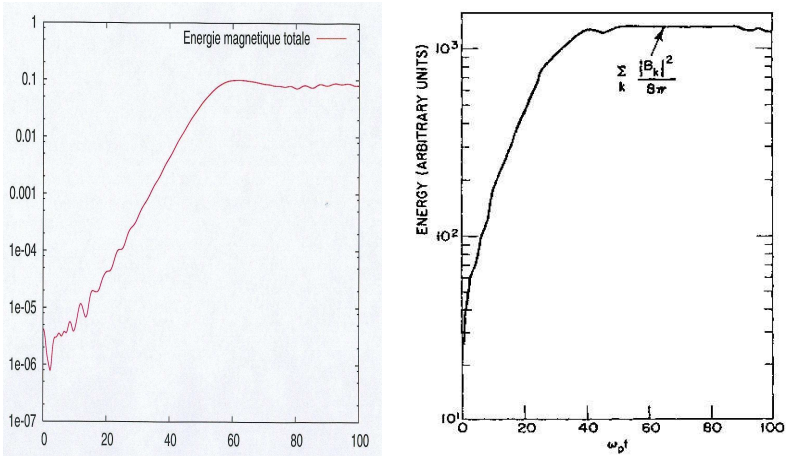
La figure 8.7 montre que la reconstruction de la condition intiale, obtenue avec la méthode HSCM dans le cas d'une forte anisotropie de température ($a = 9$), est assez précise avec un "petit" nombre de points de collocation $N = 40$.

La figure 8.8 présente les résultats d'une simulation d'instabilité whistler dans le cas d'une anisotropie de température $a = 9$. Les paramètres de cette simulation sont : $v_{th} = 0.088$, $N = 40$, $I = 80$, $k_{dom} = 1.5$, $N_{dom} = 3$. Quatre modes sont perturbés initialement : $k_1 = 1$, $k_2 = 1.5 \equiv k_{dom}$, $k_3 = 2$ et $k_4 = 2.5$. De la même manière que précédemment (avec $a = 4$), les résultats montrent la variation de l'énergie des champs,

HELIOS Cas (i) d'Ossakow *et al* (PIC)



(a) Evolution en temps des énergies magnétiques transverses en échelle logarithmique



(b) Evolution en temps de l'énergie magnétique en échelle logarithmique

FIG. 8.6 – *Comparaison entre les résultats obtenus avec le code HELIOS et ceux d'Ossakow et al [94] dans le cas d'une simulation d'instabilité whistler telle que* $a = 4$, $v_{th} = 0.31$, $I = 80$, $N = 40$, $N_p = 40$, $L_x = 4\pi$, $\Delta t = 0.029$ *et* $b_0 = 10^{-3}$.

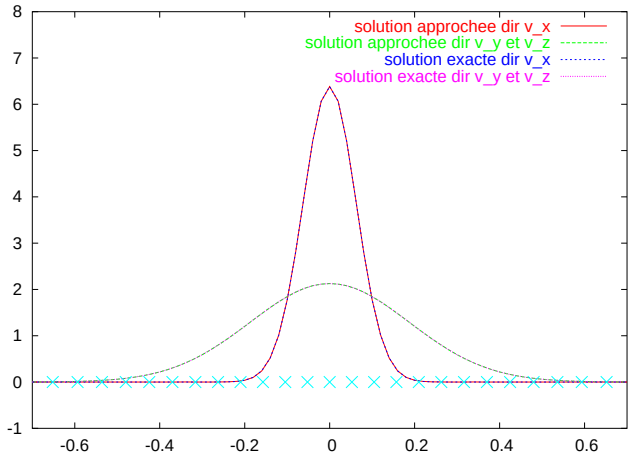


FIG. 8.7 – *Fonction d'interpolation de la condition initiale, obtenue avec la méthode HSCM pour l'instabilité whistler avec une anisotropie* $a = 9$*, 40 points de collocation et* $v_{th} = 0.088$*.*

de l'énergie cinétique et la conservation de l'énergie totale (figure 8.8(a)). La figure 8.8(b) montre la croissance exponentielle de l'énergie magnétique à un taux $\gamma = 0.067$ comparable à la valeur théorique : $\gamma_{th} = 0.08$ (cf figure 8.4(b)). Les composantes transverses B_y et B_z du champ magnétique sont en opposition de phase (figure 8.8(c)).

Les résultats de cette simulation présentent des oscillations, en particulier pendant la phase de croissance linéaire de l'instabilité. Ces oscillations sont plus importantes que dans la simulation avec l'anisotropie $a = 4$. On peut expliquer ce résultat par le fait que l'interpolation de la distribution dans la direction v_x est moins précise car le nombre de points de collocation bien positionnés est fortement réduit par la grande valeur du facteur d'anisotropie ($a = 9$). De plus, on a réalisé cette simulation avec le même nombre de points de collocation que précédemment (N=40).

Cette simulation a atteint l'instant $t = 140\omega_{pe}^{-1}$ en 2117 itérations en temps, après environ $2h35$ de calcul avec 40 processeurs sur TERA 10.

Cas d'une instabilité à faible anisotropie $a = 2$

Nous avons réalisé une simulation d'instabilité whistler dans un plasma faiblement anisotrope : $a = 2$. Les paramètres de cette simulation sont : $v_{th} = 0.31$, $N = 45$, $I = 240$, $k_{dom} = 0.8$, $N_{dom} = 4$ et les modes perturbés sont les suivants : $k_1 = 0.6$, $k_2 = 0.8 \equiv k_{dom}$ et $k_3 = 1$.

Les résultats, rapportés à la figure 8.9, sont comparables à ceux obtenus précédemment. L'énergie totale se conserve bien (figure 8.9(a)) et l'énergie magnétique croît exponentiellement avec $\gamma \approx 0.018$ (figure 8.9(b)). Ce taux de croissance est proche de la valeur théorique $\gamma_{th} = 0.02$ (cf figure 8.4(c)). On peut cependant remarquer la présence d'oscillations au cours du temps. En particulier, on peut observer sur la figure 8.9(c) que l'opposition de phase des composantes transverses du champ magnétique n'est pas très bien reproduite.

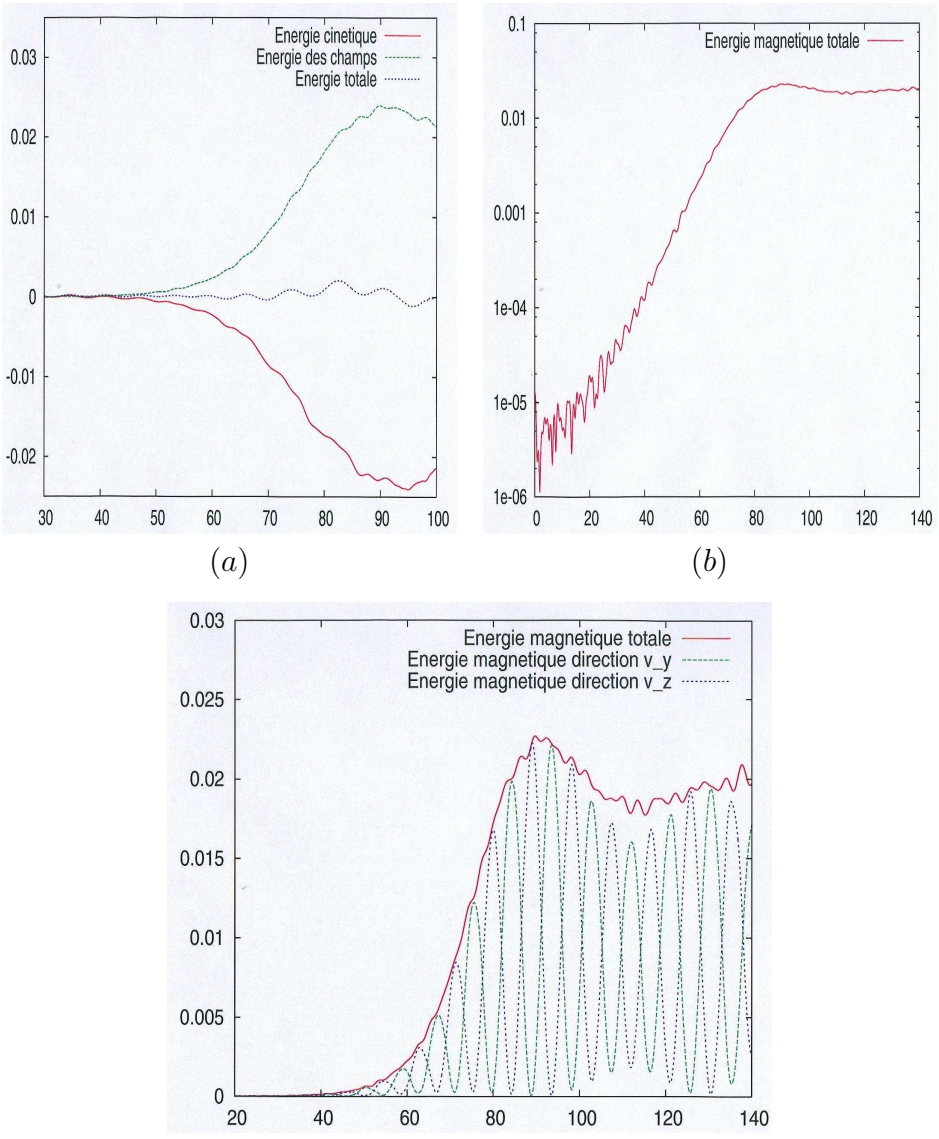
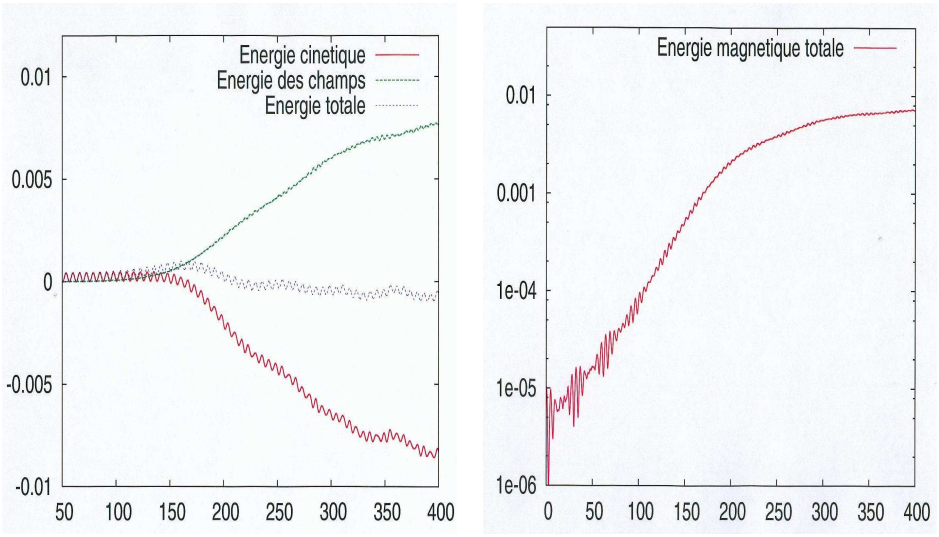
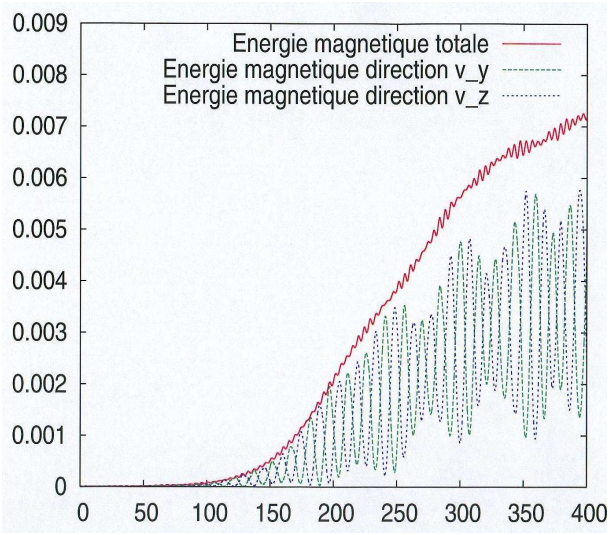


FIG. 8.8 – *Variation au cours du temps des énergies des champs, cinétique et totale (a), évolution en temps de l'énergie magnétique en échelle logarithmique (b) et des composantes transverses du champ magnétique (c) pour une instabilité whistler avec* $a = 9$, $v_{th} = 0.088$, $N = 40$, $I = 80$, $N_p = 40$, $L_x = 4\pi$, $\Delta t = 0.066$ *et* $b_0 = 10^{-3}$.



(*a*) (*b*)



(*c*)

FIG. 8.9 – *Variation au cours du temps des énergies des champs, cinétique et totale (a), évolution en temps de l'énergie magnétique en échelle logarithmique (b) et des composantes transverses du champ magnétique (c) pour une instabilité whistler avec* $a = 2$, $v_{th} = 0.31$, $N = 45$, $I = 240$, $N_p = 45$, $L_x = 10\pi$, $\Delta t = 0.0335$ *et* $b_0 = 10^{-3}$.

Cette simulation a été réalisée sur TERA 10 avec 45 processeurs en $68h$ de calcul et après 10450 itérations en temps (jusqu'à $350\omega_{pe}^{-1}$).

D'après Sydora *et al* [119], pour des plasmas faiblement anisotropes ($a \leq 4$), pour lesquels le taux de croissance des modes excités diminue, un code PIC restitue difficilement la croissance linéaire et la phase de saturation des ondes whistlers. Ainsi pour une anisotropie $a = 2$ et une vitesse thermique $v_{th} = 0.088$, le taux de croissance de l'instabilité est très faible, $\gamma = 8\ 10^{-6}$, et les résultats obtenus avec un code PIC sont dominés par le bruit et donc peu exploitables [119]. Un tel calcul est long à obtenir car dans ce cas d'instabilité à très faible taux de croissance, l'instant de saturation est grand. Ce calcul, qui permettrait de montrer l'apport d'un code déterministe, n'a malheureusement pas été réalisé dans ce travail par manque de temps.

L'ensemble des résultats présentés dans ce paragraphe montre que le code HELIOS permet de reproduire la croissance exponentielle et la saturation d'instabilités whistlers dans des plasmas anisotropes, quel que soit le facteur d'anisotropie. Les taux de croissance sont comparables aux valeurs théoriques et l'on peut obtenir de bonnes valeurs des énergies des ondes à la saturation. Ces calculs ont été réalisés avec un petit nombre de points de collocation ($N \leq 45$). Les résultats ont ainsi pu être obtenus en des temps raisonnables, avec le code HELIOS parallélisé et optimisé (cf chapitre 7). Pour traiter l'évolution de particules dans des plasmas fortement anisotropes ($a > 10$), il est tout de même nécessaire d'utiliser un plus grand nombre de points de collocation ($N \geq 50$) afin d'obtenir des résultats précis.

II Cas tests relativistes à deux espèces d'électrons

II.1 Instabilité Weibel

Dans cette simulation, le plasma est non magnétisé et constitué de deux populations d'électrons relativistes et d'une espèce ionique immobile. Les distributions des espèces électroniques, notées e_1 et e_2, sont décrites par des fonctions de Maxwell-Jüttner non centrées en zéro :

$$f_{e_i}(x, \mathbf{p}, t = 0) = \frac{\mu_{e_i}}{4\pi\gamma_{e_i}^2 K_2(\mu_{e_i}/\gamma_{e_i})} e^{-\mu_{e_i}(\gamma(\mathbf{p}) - \beta_{e_i} p_y)}, \tag{8.5}$$

où γ est le facteur relativiste et K_2 une fonction de Bessel de deuxième espèce. Le plasma a les caractéristiques suivantes : $\gamma_{e_1} = 4$, $T_{e_1} = 20KeV$ et $T_{e_2} = 10KeV$ et le rapport des densités des espèces électroniques est donné par $\nu = n_{e_1}/n_{e_2} = 0.8$. On déduit les autres paramètres des égalités suivantes :

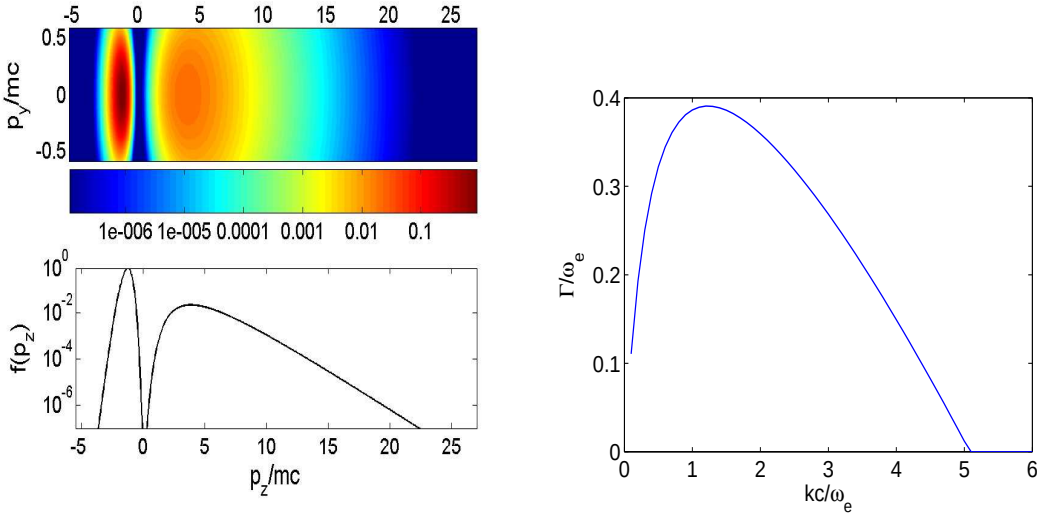
$$\beta_{e_1} = \sqrt{1 - 1/\gamma_{e_1}^2},\ \beta_{e_2} = -\nu\beta_{e_1} \text{ et } \mu_{e_i} = 511/T_{e_i} \text{ avec } i = 1, 2.$$

La condition initiale de la simulation,

$$\nu f_{e_1}(x, \mathbf{p}, t = 0) + f_{e_2}(x, \mathbf{p}, t = 0),$$

est représentée sur la figure 8.10(a).

Dans ce contexte et pour les fonctions de distribution de la forme (8.5), on sait résoudre la relation de dispersion dans le cadre la théorie linéaire [23]. La partie imaginaire de la pulsation des ondes est donnée, en fonction du mode k, à la figure 8.10(b).



(a) Condition initiale

(b) Partie imaginaire de la solution de la relation de dispersion (théorie linéaire)

FIG. 8.10 – *Instabilité Weibel à deux espèces d'électrons relativistes avec* $n_{e_1}/n_{e_2} = 0.8$, $\gamma_{e_1} = 4$, $T_{e_1} = 20KeV$ *et* $T_{e_2} = 10KeV$.

On choisit de perturber la composante B_z du champ magnétique. L'amplitude de la perturbation est $b_0 = 10^{-3}$. Un seul mode est excité, c'est le mode dominant $k_{dom} = 1.27$, obtenu par la théorie linéaire (cf figure 8.10(b)). Les profils des distributions initiales de cette simulation nous contraignent à utiliser un nombre important de points de collocation. En effet ces fonctions ne sont pas centrées en zéro et seule la moitié des points de collocation est utile. On prend alors $N = 100$. Le nombre de points en espace est $I = 100$ et le nombre de processeurs $N_p = 100$.

Les résultats de la simulation sont rapportés à la figure 8.11 et comparés avec des résultats obtenus avec un code PIC, le code CALDER [82]. La simulation PIC a été réalisée avec 10000 particules par maille, en 45 minutes sur 32 processeurs. On peut observer sur la figure 8.11(a) l'évolution au cours du temps des composantes suivant x et y de l'énergie électrique et suivant z de l'énergie magnétique, en échelle logarithmique. Ces énergies sont normalisées par rapport à l'énergie cinétique initiale. L'instabilité croît avec un taux de 0.39 comparable à la valeur obtenue avec la théorie linéaire (cf figure 8.10). Si on compare les résultats des deux simulations, on constate que l'instabilité obtenue avec le code PIC a un taux de croissance plus faible que celle obtenue avec le code HELIOS : $\gamma = 0.355$. Ceci est dû à la présence de plusieurs modes dans la boîte de simulation. Les valeurs des énergies à la saturation, obtenues avec les deux simulations, sont comparables : l'énergie magnétique dans la direction p_z est de 0.1 et les énergies

électriques dans les directions p_x et p_y sont de 0.01. Les oscillations que l'on peut voir au début de la simulation réalisée avec notre code déterministe représentent la phase d'initialisation des calculs.

La figure 8.11(b) montre l'évolution au cours du temps des rapports

$$\sqrt{\frac{\langle E_x^2\rangle}{\langle E_y^2\rangle}} \text{ et } \sqrt{\frac{\langle E_x^2\rangle}{\langle B_z^2\rangle}}, \tag{8.6}$$

obtenus avec le code HELIOS, où l'on a noté $\langle . \rangle$ la moyenne spatiale des énergies. La théorie linéaire prévoit que ces rapports restent constants au cours de la phase de croissance linéaire et valent respectivement 0.9 et 0.3 avec les paramètres de simulations choisis ici [23]. On retrouve approximativement ces valeurs entre $12\omega_{pe}^{-1}$ et $22\omega_{pe}^{-1}$. La courbes équivalentes obtenues avec le code PIC CALDER, ne sont pas présentées ici. En effet, l'énergie électrique dans la direction p_x n'ayant pas le bon taux de croissance (cf figure 8.11(a)), les résultats ne permettent pas d'observer la constance des rapports (8.6) au cours de la phase linéaire.

La simulation réalisée avec le code HELIOS a été arrêtée juste après la saturation en raison de l'apparition d'une instabilité numérique. Cette instabilité pourrait s'expliquer par une mauvaise reproduction, par la méthode de collocation, des fortes variations de la fonction de distribution pendant la phase non linéaire. En effet, après la saturation, la fonction de distribution évolue rapidement et en particulier, s'élargit fortement dans la direction p_x. Ainsi le positionnement des points de collocation ne conviendrait plus. Nous prévoyons d'améliorer cette simulation en modifiant le facteur d'échelle ou encore en augmentant le nombre de points de collocation. Nous présenterons dans les perspectives de cette étude (page 169) une méthode qui permettrait d'obtenir des résultats satisfaisants sans augmenter de façon trop importante le nombre de points de collocation.

II.2 Instabilité whistler et ceintures de Van Allen

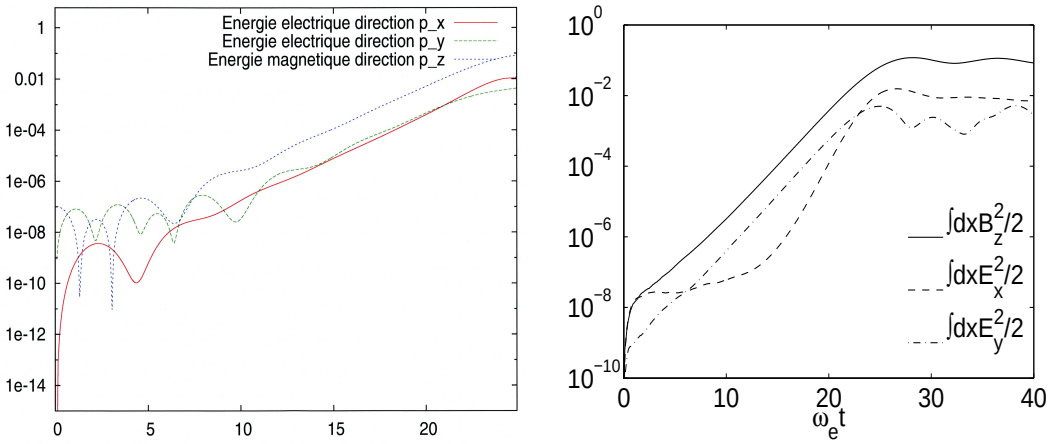
Un premier calcul d'instabilité whistler dans le plasma magnétosphérique a été réalisé. Ce calcul est construit de la même manière que celui réalisé par Omura et Summers [91]. Les caractéristiques du plasma sont celles du plasma magnétosphérique dans le plan équatorial pour l'orbite géostationnaire. Le système étudié se compose d'ions et d'électrons froids et d'une population d'électrons chauds, les électrons énergétiques relativistes injectés. Le système est magnétisé par un champ extérieur uniforme, qui représente le champ terrestre B_0. La distribution d'électrons énergétiques injectés est anisotrope et les ions sont immobiles.

On note n_h et n_c les densités respectives des espèces chaudes et froides, f_h et f_c leurs distributions normalisées et $\nu = n_h/n_c$ le rapport de densité des électrons énergétiques et des électrons froids. La distribution f_{tot} des électrons présents dans le plasma est ainsi donnée par,

$$f_{tot} = f_c + \nu f_h.$$

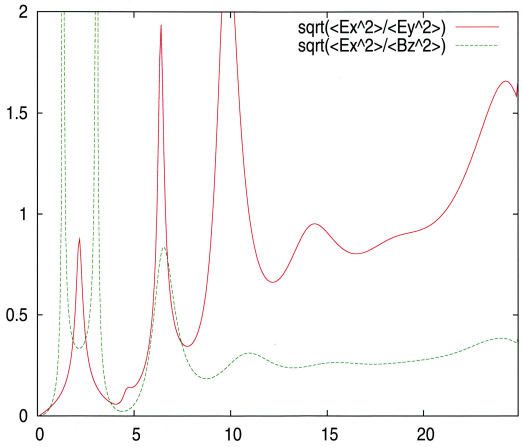
La distribution initiale des électrons chauds injectés est de la forme :

$$f_h^0(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{\pi^{3/2}\, a v_{th_h}^3}\; e^{-p_x^2/v_{th_h}^2}\; e^{-(p_y^2+p_z^2)/(a v_{th_h}^2)}, \tag{8.7}$$



HELIOS CALDER (PIC)

(a) Evolution en temps des énergies électriques dans les directions p_x et p_y et de l'énergie magnétique dans la direction p_z. Ces énergies sont normalisées par rapport à l'énergie cinétique à l'instant initial.



(b) Evolution en temps des rapports $\sqrt{\langle E_x^2\rangle/\langle E_y^2\rangle}$ et $\sqrt{\langle E_x^2\rangle/\langle B_z^2\rangle}$.

FIG. 8.11 – *Simulation d'une instabilité Weibel à deux espèces d'électrons relativistes. Les paramètres de la simulation sont* $I = 100$, $N = 100$, $N_p = 100$, $b_0 = 10^{-3}$, $L_B = 6\pi/k_{dom}$, $k_{dom} = 1.27$, $n_{e_1}/n_{e_2} = 0.8$, $\gamma_{e_1} = 4$, $T_{e_1} = 20KeV$ *et* $T_{e_2} = 10KeV$.

avec l'anisotropie de température $a = 10$ et la vitesse thermique dans la direction parallèle $v_{th_h} = 0.6$. Le plasma froid ambiant est maxwellien :

$$f_c^0(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{\pi^{3/2}\, v_{th_c}^3} \;\; e^{-p_x^2/v_{th_c}^2}\; e^{-p_y^2/v_{th_c}^2}\; e^{-p_z^2/v_{th_c}^2}, \tag{8.8}$$

avec la vitesse thermique $v_{th_c} = 0.05$.

Le champ magnétostatique est donné par le rapport entre la fréquence plasma et la fréquence cyclotron[2] $\omega_{pe}/\omega_{ce} = 1$, représentatif du plasma magnétosphérique sur la ligne de champ correspondant à l'orbite géostationnaire à l'équateur. Le rapport de densité est $\nu = 0.025$.

On dimensionne la boîte de simulation de manière à ce que les modes whistlers dominants, déstabilisés par les électrons chauds, soient correctement décrits dans la phase linéaire. Pour cela, le pas d'espace doit être choisi de l'ordre de la longueur de Debye :

$$\Delta x \sim \lambda_D. \tag{8.9}$$

La résolution de la relation de dispersion obtenue par la théorie linéaire [132] fournit la valeur des modes les plus instables (cf figure 8.12). Dans la simulation réalisée avec le code HELIOS, le mode perturbé est le mode dominant $k_{dom} = 0.6$. La perturbation est choisie d'amplitude $b_0 = 10^{-4}$ et la boîte de calcul est de taille $L_x = 4\pi/k_{dom}$. Elle contient donc deux longueurs d'onde du mode dominant. On prend 40 points de

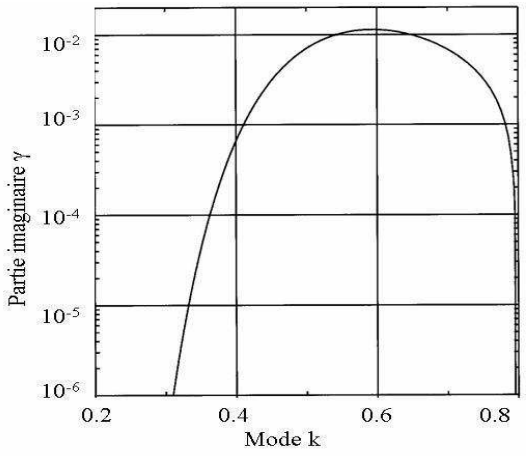


FIG. 8.12 – *Résolution de la relation de dispersion des modes whistlers. Taux de croissance $Im(\omega) \equiv \gamma$ en fonction des modes k. Les paramètres de l'instabilité sont $\nu = 0.025$, $a = 10$, $v_{th_h} = 0.6$.*

collocation et 400 points en espace. Avec ces paramètres, la condition (8.9) est vérifiée mais le calcul est coûteux et nécessite la mise à jour de $2.56\ 10^7$ variables à chaque itération.

Le calcul, réalisé avec le code HELIOS et présenté aux figures 8.13 et 8.14, atteint $1200\omega_{pe}^{-1}$ en 25000 itérations. Il a nécessité $340h$ de calcul sur 40 processeurs. Une

[2]cf adimensionnement des équations de Vlasov Maxwell au chapitre 6.

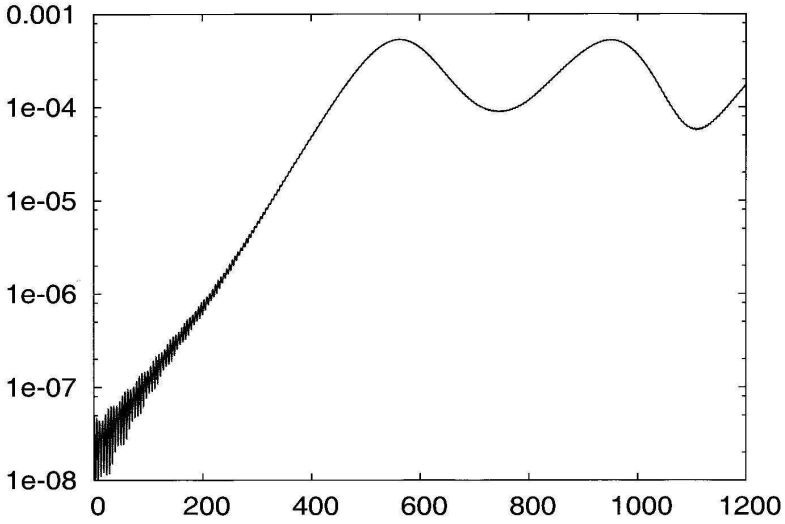
simulation PIC a été réalisée avec le code CALDER dans les mêmes conditions de calcul : dimension du domaine spatial, nombre de mailles, distributions initiales... Le nombre de particules par maille est choisi égal à 10000. La simulation PIC a atteint, après la saturation, une énergie magnétique comparable à celle obtenue avec le code HELIOS après $33h$ de calcul sur 8 processeurs (cf figure 8.13).

Les courbes de la figure 8.13 présentent la croissance exponentielle de l'énergie des champs dans le cas déterministe (a) et dans le cas stochastique (b). Pour les deux simulations on obtient des taux de croissance comparables à la valeur théorique $\gamma_{th} = 1.1\ 10^{-2}$ (cf figure 8.12) :

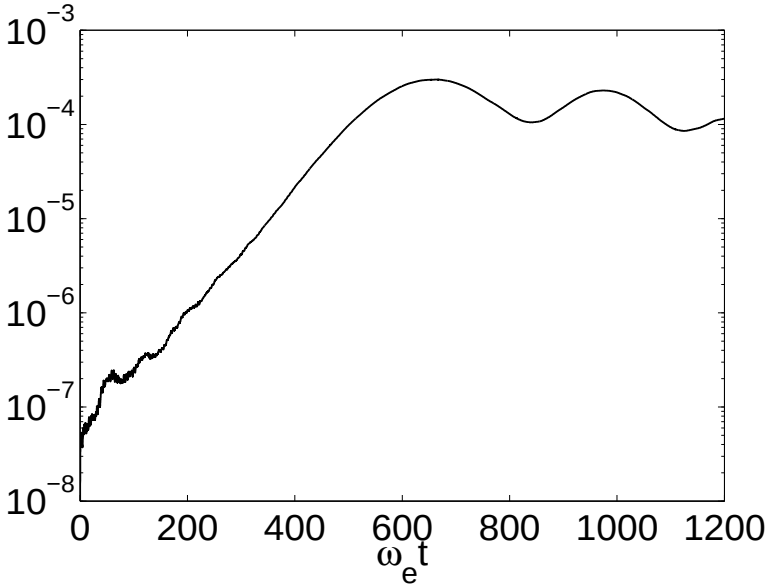
$$\gamma_{HELIOS} \approx 10^{-2} \text{ et } \gamma_{CALDER} \approx 8\ 10^{-3}.$$

La figure 8.14 rapporte des résultats complémentaires obtenus avec le code HELIOS. La courbe 8.14(a) représente l'évolution en temps des énergies magnétiques transverses et met en évidence la présence dans le plasma de modes instables polarisés ciculairement : les modes whistlers. Les résultats présentés sur la courbe 8.14(b) montrent la variation des énergies au cours du temps. On observe que l'énergie totale se conserve convenablement au cours du calcul.

Ces premiers résultats, d'une précision très satisfaisante, sont prometteurs. Le code HELIOS permet a priori de simuler précisément la croissance linéaire et la saturation non linéaire d'instabilités whistlers générées par des distributions anisotropes d'électrons relativistes dans les ceintures de Van Allen. Des simulations plus réalistes sont envisagées prenant en compte l'injection des électrons énergétiques, la réflexion des ondes au bord du domaine spatial ainsi que le phénomène de perte de particules (cône de perte cf chapitre I). Ce travail sera précisé en perspective (cf page II.2).

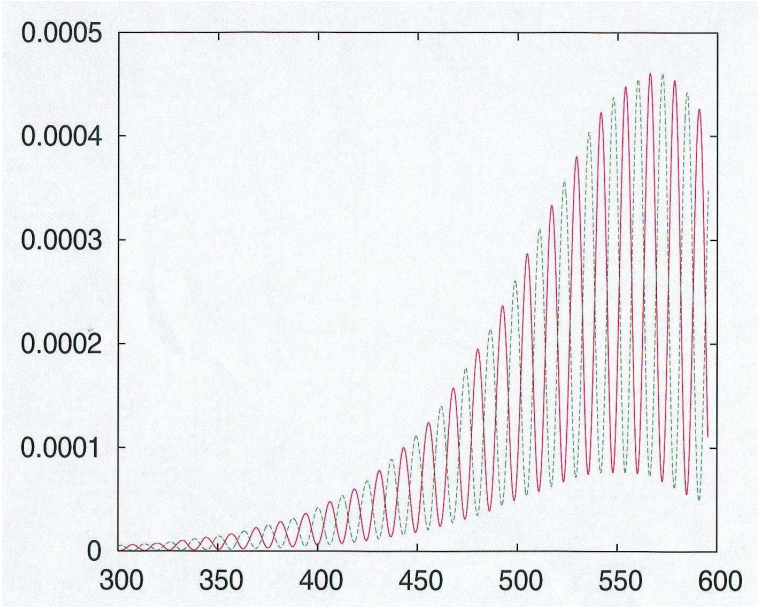


(a) Calcul déterministe (HELIOS)

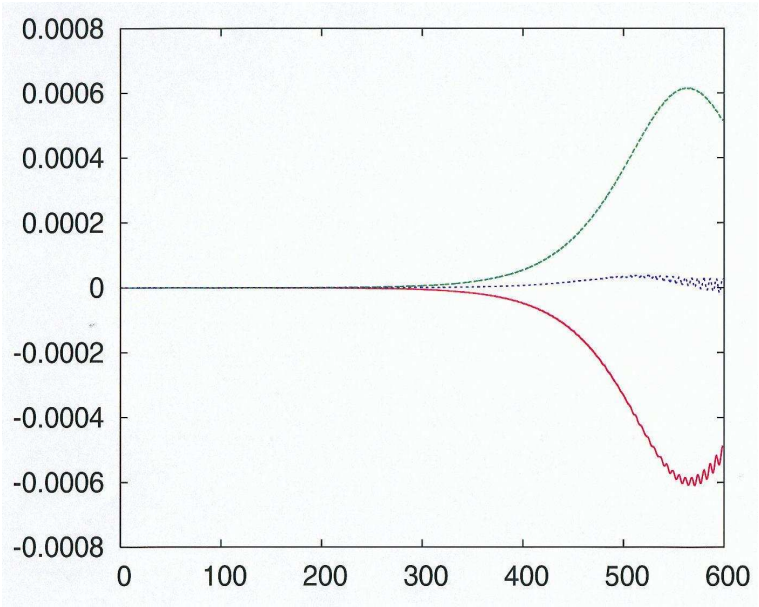


(b) Calcul PIC (CALDER)

FIG. 8.13 – *Energie magnétique au cours du temps en échelle logarithmique dans le cas d'un calcul d'instabilité whistler au niveau de l'orbite géostationnaire. Comparaison entre une simulation PIC (b) et une simulation réalisée avec le code HELIOS (a) dont les paramètres sont* $I = 400$, $N = 40$, $N_p = 40$, $B_0 = 1$, $b_0 = 10^{-4}$, $L_B = 4\pi/k_{dom}$, $k_{dom} = 0.6$, $\nu = 0.025$, $a = 10$, $v_{th_h} = 0.6$, $\Delta t = 0.049$ *et* $v_{th_c} = 0.05$.



(a)



(b)

FIG. 8.14 – *Energies magnétiques transverses au cours du temps (a) et variation de l'énergie des champs (courbe verte), de l'énergie cinétique (courbe rouge) et de l'énergie totale (courbe bleue) au cours du temps (b), dans le cas d'un calcul d'instabilité whistler au niveau de l'orbite géostationnaire. La simulation, réalisée avec le code HELIOS, a pour paramètres :* $I = 400$, $N = 40$, $N_p = 40$, $B_0 = 1$, $b_0 = 10^{-4}$, $L_B = 4\pi/k_{dom}$, $k_{dom} = 0.6$, $\nu = 0.025$, $a = 10$, $v_{th_h} = 0.6$, $\Delta t = 0.049$ *et* $v_{th_c} = 0.05$.

Conclusion et perspectives

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la simulation numérique des interactions entre les électrons de haute énergie et des ondes électromagnétiques dans les ceintures de Van Allen. Ces phénomènes peuvent être modélisés par le système non-linéaire des équations couplées de Vlasov-Maxwell relativistes. Des études antérieures ont montré les limites d'une résolution de ces équations par les méthodes stochastiques de type PIC. Ces méthodes, intrinsèquement bruitées ne permettent pas de calculer le développement d'ondes excitées par des instabilités à faible taux de croissance et leur rétroaction non-linéaire sur la population électronique. Nous avons alors proposé trois nouvelles méthodes déterministes de résolution des équations relativistes de Vlasov-Maxwell. Ces méthodes s'appuient sur une discrétisation spectrale en vitesse (ou en impulsion dans le cas relativiste) construite de manière à obtenir des solutions précises et en particulier des solutions structurées dans l'espace des phases.

Une première méthode, SGM (*Spectral Galerkin Method*), est de type Galerkin et utilise des fonctions de base de Hermite dépendant d'un facteur d'échelle. Les deux autres méthodes, LSCM (*Lagrange Spectral Collocation Method*) et HSCM (*Hermite Spectral Collocation Method*), sont des méthodes de collocation. Les points de collocation dépendent d'un facteur d'échelle et sont ainsi positionnés de manière à bien interpoler des distributions non bornées en vitesse et en particulier des faisceaux maxwelliens. Dans ces trois approches, la présence du facteur d'échelle permet une grande précision de la résolution avec un petit nombre de degrés de liberté. La semi-discrétisation en temps est réalisée à l'aide d'une méthode à pas fractionnaire d'ordre deux (*splitting*). Plusieurs méthodes de discrétisation spatiale ont été testées : une méthode de Galerkin discontinue (VL3) et les schémas numériques d'advection bien connus *upwind* et de Lax-Wendroff. Afin d'accélérer les temps d'exécution des algorithmes, une méthode de *subcycling* est proposée. Elle permet de relaxer la contrainte sur le pas de temps exprimée par la condition CFL du schéma d'advection. Pour cela on définit différentes classes de vitesses avec des pas temps adaptés.

Les trois méthodes proposées ont d'abord été appliquées au système de Vlasov-Poisson monodimensionnel et validées à partir de cas tests académiques, à la fois sur des temps courts et sur des temps longs. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats de référence obtenus par la théorie linéaire. La comparaison des méthodes entre elles a montré la supériorité de HSCM. Celle-ci reproduit mieux que les deux autres méthodes le développement de fines structures dans les solutions telles que la filamentation dans l'espace des phases. De plus, comme LSCM, elle a l'avantage d'être efficace, son temps d'exécution étant bien plus petit que celui de la méthode de Galerkin SGM. Enfin, elle conserve correctement le moment total, l'énergie totale, la densité des

particules, ainsi que les normes L^1 et L^2, tandis que LSCM est instable sur des temps longs car elle ne conserve pas correctement les normes L^1 et L^2.

Nous avons généralisé les méthodes spectrales au problème tridimensionnel et relativiste de Vlasov-Maxwell. La présence du facteur d'échelle dans les équations ne permet pas de généraliser la méthode spectrale SGM directement. On a exploré la voie d'une formulation en coordonnées sphériques et on a proposé d'utiliser une base constituée de polynômes de Laguerre et d'harmoniques sphériques. Malgré les simplifications apportées par le choix des harmoniques sphériques, les calculs restent complexes. Les méthodes de collocation se généralisent au problème complet sans modifications majeures. Nous avons utilisé une méthode FDTD pour résoudre les équations de Maxwell. Simple à mettre en œuvre, elle est reconnue pour apporter des résultats très satisfaisants sur des maillages réguliers.

Le code déterministe HELIOS a été développé pour résoudre numériquement les équations de Vlasov-Maxwell relativistes sur une dimension d'espace et trois dimensions d'impulsion. Les méthodes implantées sont la méthode HSCM généralisée pour la discrétisation en impulsion, le schéma de Lax-Wendroff en espace, une méthode à pas fractionnaire d'ordre deux en temps et le schéma de Yee pour les équations de Maxwell. Les premiers moments de la fonction de distribution sont calculés par quadrature de Gauss-Hermite avec facteur d'échelle. Le code permet de traiter différentes espèces d'électrons dans la boîte de simulation.

Afin de réduire les temps de calcul, une méthode de parallélisation des algorithmes est proposée et une optimisation de code a été réalisée. Cette optimisation est particulièrement bien adaptée au super-calculateur TERA 10 du CEA. L'optimisation de code a permis la réduction du temps de calcul d'environ un facteur 3.7 pour des simulations avec un grand nombre de degrés de liberté (10^8) et pour un nombre de processeurs compris entre 10 et 100. Les *speed-up* supplémentaires obtenus par la parallélisation peuvent être de 18 pour ces mêmes simulations sur 50 ou bien 100 processeurs. Ainsi, ce travail a divisé par presque 64 le temps de calcul d'un cas à 10^8 degrés de liberté par pas de temps (avec 50 processeurs), le gain de temps obtenu avec l'optimisation sur le code séquentiel étant de 3.55. Dans le cas d'un calcul à 5.12 10^6 variables, le temps de calcul est réduit de 27 (avec 10 processeurs). Ce gain moins important est du au fait que les *speed-up* obtenus dans ce cas sont plus faibles (au maximum de 3.7 sur 10 processeurs). En effet, la charge de calcul par processeur n'étant pas très grande, les communications entre les processeurs ralentissent les calculs.

Le code a été validé à partir de tests d'instabilités Weibel et whistlers dans des plasmas contenant une espèce d'électrons non-relativistes. Nous avons montré que le code HELIOS restitue bien les phénomènes liés à l'excitation des ondes, les modes de type Weibel dans le cas d'un plasma sans champ magnétique statique et les ondes whistlers dans le cas d'un plasma magnétisé anisotrope. En particulier nous avons obtenu des résultats d'instabilités à faible taux de croissance dans le cas d'une petite anisotropie de température ($a = 2$). Des instabilités Weibel à deux espèces d'électrons relativistes ont également été étudiées. Ces simulations ont permis de tester la méthode pour des profils non maxwelliens en impulsion et non centrés en zéro. Un premier calcul a reproduit la phase de croissance linéaire de l'instabilité avec le bon taux de croissance. Enfin nous avons réalisé une première simulation proche d'un calcul de ceintures de Van

Allen. Dans un plasma faiblement anisotrope constitué de trois espèces de particules, une espèce électronique relativiste, une espèce électronique classique et une espèce ionique, nous avons obtenu la saturation d'une instabilité whistler. Ce calcul très coûteux ($40^3 \times 1000$ variables à calculer à chaque itération) et très long (6500 itérations en temps jusqu'à la saturation pour notre cas test) n'aurait pas pu être obtenu sans la parallélisation et l'optimisation réalisées sur le code HELIOS.

Nous présentons les perspectives de ce travail dans le cadre de l'étude des ceintures radiatives terrestres. Nous suggérons également des voies d'amélioration des méthodes présentées, afin d'envisager des problèmes dans lesquels les solutions sont fortement décentrées par rapport à l'origine de la grille des vitesses ou bien évoluent rapidement au cours du temps. Une autre technique de parallélisation est proposée afin de réduire davantage les temps de calcul, ce qui permettrait de travailler sur des boîtes de grande taille et ainsi de prendre en compte un nombre important de modes. Une ouverture est suggérée sur des méthodes de type *sparse grid* qui pourraient permettre de travailler sur des domaines spatiaux à deux voire trois dimensions.

Calcul de la dynamique des ceintures de Van Allen

Afin de pouvoir simuler de manière "réaliste" la dynamique des populations d'électrons énergétiques dans les ceintures de radiation sur des temps courts (de l'ordre de dix minutes suivant l'injection des particules), il est nécessaire d'adapter le code HELIOS à une boîte spatiale avec des conditions aux bords ouvertes. Ces conditions permettraient de calculer les valeurs des flux saturés, obtenus par exemple pour l'injection d'un double faisceau d'électrons sur l'orbite géostationnaire.

Les conditions aux limites ouvertes prennent en compte la réflexion des particules, la réflexion partielle des ondes aux bords du domaine spatial de simulation et la présence du cône de perte dans l'espace des vitesses. On propose de modéliser les conditions aux limites "ouvertes" de la manière suivante :
- Les ondes électromagnétiques se réfléchissent partiellement aux extrémités du domaine spatial de simulation. Ce phénomène sera modélisé par une condition simple aux deux bords de la boîte de calcul, qui permet d'obtenir en incidence normale le cœfficient de réflexion voulu sur les amplitudes des champs.
- Les particules énergétiques non dépiégées se réfléchissent aux bords du domaine spatial si leurs vitesses ne sont pas dans la partie de l'espace des phases correspondant au cône de perte. Cela revient, dans l'étape d'advection, à considérer des flux frontières particuliers : un flux entrant égal au flux sortant réinjecté avec la vitesse opposée.
- Pour les vitesses se situant dans le cône de perte, le flux entrant est nul (particules perdues dans l'atmosphère).

Reconstructions spectrales de fonctions de distribution non centrées en zéro

Les méthodes spectrales présentées dans ce travail ne sont pas optimales pour la reconstruction de fonctions de distribution non centrées en zéro. En effet, pour les

méthodes de collocation par exemple, les points de collocation sont plus ou moins étalés grâce la présence du facteur d'échelle mais ils restent centrés sur l'origine. Ainsi, en complément du facteur d'échelle, il est possible d'ajouter un facteur de translation qui permettrait de réduire le nombre points de collocation nécessaire. Par exemple dans le cas de fonctions de distribution définies sur l'intervalle $[0, \infty[$ ou $]-\infty, 0]$, cela permettrait de diviser par deux le nombre de degrés de liberté.

Reconstructions spectrales de fonctions de distribution évoluant de façon significative au cours du temps

Un autre facteur limitant des méthodes présentées est le cas où les fonctions de distribution évoluent très vite et de façon significative au cours de la simulation. En effet, dans ce cas, le calibrage initial du facteur d'échelle devient rapidement inadapté à la solution déformée. Si l'on peut prévoir les évolutions de la fonction de distribution, une idée serait de faire évoluer le facteur d'échelle au cours de la simulation [83]. Cependant à chaque changement de facteur d'échelle, il est nécessaire de reconstruire la fonction de distribution, ce qui est coûteux. Cette méthode est donc intéressante seulement si l'on recalibre le facteur d'échelle peu de fois au cours de la simulation. Le facteur d'échelle ne permet donc pas encore de réaliser des simulations d'évolution très rapide de fonctions de distribution dans l'espace des phases avec un petit nombre de degrés de liberté.

Autre technique de parallélisation

Le code HELIOS parallélisé a permis l'obtention de simulations en des temps raisonnables. Ces temps sont cependant comparables aux temps de calcul de codes PIC non parallèles et sont encore grands devant les temps de calculs obtenus avec un code PIC parallélisé (par exemple le code CALDER du CEA).

Toutefois, la performance du code peut encore être améliorée. La technique de parallélisation employée, une décomposition de l'espace tridimensionnel des vitesses s'est avérée peut performante avec un grand nombre de processeurs ce qui n'a pas permis de tirer partie de la performance du calculateur TERA 10. Afin d'augmenter les performances, la parallélisation a été réduite à une décomposition du domaine dans une seule direction de vitesse. Cependant cette approche limite à l'utilisation d'un petit nombre de processeurs, celui-ci étant nécessairement inférieur au nombre de points de collocation. Une autre technique de parallélisation semble alors plus intéressante à mettre en œuvre : une parallélisation par décomposition de domaine en espace avec recouvrement. Cette méthode pourrait réduire fortement les temps de calcul et permettrait l'utilisation d'un nombre plus important de processeurs. Un recouvrement de domaines de plusieurs mailles nécessiterait l'envoi entre processeurs d'un nombre un peu plus important de données mais réduirait fortement le nombre de communications. Cette technique permettrait a priori l'utilisation d'un grande nombre de processeurs en particulier quand le nombre de points du maillage spatial est important.

Réduction supplémentaire

Malgré l'utilisation de bases bien adaptées dans l'espace des impulsions, le nombre global de degrés de liberté reste important pour un calcul 1Dx-3Dp. Pour atteindre des calculs réalistes 2Dx-3Dp ou 3Dx-3Dp, il est nécessaire de trouver une voie de réduction supplémentaire de la complexité algorithmique. Une possibilité serait d'utiliser des algorithmes de type *Sparse Grid* ([138], [139]) qui permettraient de considérer un nombre de points de collocation ou de quadrature numérique de l'ordre de $N(\log N)^{d-1}$ plutôt que la tensorisation N^d dans l'espace des impulsions.

Annexes

Annexe A

Méthode spectrale de discrétisation en impulsion de l'équation de Vlasov 1Dx-3Dv

I Bases de polynômes de Laguerre associés L_n^k et bases d'harmoniques sphériques

I.1 Polynômes de Laguerre associés

Les polynômes de Laguerre, définis par,

$$L_n(p) = \frac{e^p}{n!}\frac{d^n}{p^n}\left(p^n e^{-p}\right), \tag{A.1}$$

vérifient les formules de récurrence

$$\begin{aligned}(n+1)L_{n+1}(p) &= (2n+1-p)L_n(p) - nL_{n-1}(p),\\ pL_n'(p) &= nL_n(p) - nL_{n-1}(p),\end{aligned}$$

avec les deux premiers polynômes $L_0 = 1$ et $L_1 = 1-p$. Ils forment une famille orthogonale sur $[0,\infty[$,

$$\int_0^{+\infty} e^{-p} L_m(p) L_n(p)\, dp = \delta_{nm}. \tag{A.2}$$

A partir des polynômes de Laguerre, on fabrique les polynômes de Laguerre associés L_n^k, fréquemment utilisés en mécanique quantique ([32]). Ils sont définis, pour n et k entiers, par,

$$L_n^k(p) = (-1)^k \frac{d^k}{dp^k}\left(L_{n+k}(p)\right), \tag{A.3}$$

$$= e^p \frac{p^{-k}}{n!}\frac{d^n}{dp^n}\left(e^{-p}p^{n+k}\right). \tag{A.4}$$

Il existe des fonctions L_n^k à paramètres non entiers appellées fonctions hypergéométriques.

Les polynômes de Laguerre associés L_n^k vérifient les relations d'orthogonalité :

$$\int_0^{+\infty} e^{-p}\, p^k L_n^k(p) L_m^k(p)\, dp = \frac{(n+k)!}{n!}\delta_{nm},$$

et les formules de récurrence :

$$\begin{aligned} L_n^k(p) &= L_n^{k+1}(p) - L_{n-1}^{k+1}(p), \\ L_n^k(p) &= \frac{2n+k-1-p}{n} L_{n-1}^k(p) - \frac{n+k-1}{n} L_{n-2}^k(p), \\ p\frac{d}{dp} L_n^k(p) &= nL_n^k(p) - (n+k)L_{n-1}^k(p). \end{aligned}$$

Construction d'une base bi-orthogonale

La formule d'orthogonalité

$$\int_0^{\infty} e^{-p} L_n^k(p)\, L_m^k(p) p^k\, dp = \frac{(n+k)!}{n!}\delta_{nm}, \tag{A.5}$$

nous permet de construire facilement une base bi-orthogonale. Considérant la famille $(\phi_n)_n$ définie par $\phi_n(p) = L_n^k(p)$ et la famille $(\psi_m)_m$ définie par

$$\psi_m(p) = e^{-p} L_m^k(p), \tag{A.6}$$

la formule d'orthogonalité (A.5) peut encore se réécrire

$$(\phi_n, \psi_m)_\omega = \frac{(n+k)!}{n!}\delta_{nm}, \tag{A.7}$$

où $(.,.)_\omega$ désigne le produit scalaire dans $L^2_\omega(p)(]0,\infty[)$ avec $\omega(p) = p^k$. Pour f dans cet espace, on a la formule de décomposition

$$f = \sum_n \frac{(f, \phi_n)_\omega}{(\psi_n, \phi_n)_\omega}\psi_n. \tag{A.8}$$

I.2 Harmoniques sphériques

Définition

On appelle *harmoniques sphériques* [3] les fonctions φ_{nm} définies par :

$$\varphi_{nm}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}\frac{(n-m)!}{(n+m)!}}\, P_n^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}, \tag{A.9}$$

où les P_n^m sont les polynômes de Legendre, et les angles θ et ϕ sont tels que : $\theta \in [0,\pi]$ et $\phi \in [0, 2\pi]$.

Ces fonctions représentent la partie angulaire des solutions de l'équation de Laplace en coordonnées sphériques et vérifient les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \varphi_{nm}(\theta,\phi)\bar{\varphi}_{n'm'}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\phi\, d\theta, \tag{A.10}$$

où $\bar{\varphi}_{nm}$ est le complexe conjugué de φ_{nm}.

Coordonnées sphériques et notations

Dans ce qui suit, on travaillera souvent en coordonnées sphériques. Pour passer des coordonnées cartésiennes $\mathbf{x} = (x, y, z)$ aux coordonnées sphériques $\mathbf{r} = (r, \theta, \varphi)$, on introduit les notations suivantes.

Les vecteurs sont écrits en gras. Un vecteur $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$, s'écrit en coordonnées sphériques $\mathbf{p} = (p, 0, 0)$ dans le repère $(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$, avec

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{p}} &= \hat{\mathbf{p}}(\theta, \varphi) = (\sin\theta\cos\varphi,\, \sin\theta\sin\varphi,\, \sin\varphi)^T, \\
\hat{\theta} &= \hat{\theta}(\theta, \varphi) = (\cos\theta\cos\varphi,\, \cos\theta\sin\varphi,\, -\sin\theta)^T, \\
\hat{\varphi} &= \hat{\varphi}(\theta, \varphi) = (-\sin\varphi,\, \cos\varphi,\, 0)^T.
\end{aligned}$$

De manière générale, on écrira la décomposition d'un vecteur $\mathbf{E}$ dans le repère $(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$ comme suit :

$$\mathbf{E} = E_p\hat{\mathbf{p}} + E_\theta\hat{\theta} + E_\varphi\hat{\varphi}, \tag{A.11}$$

avec

$$E_p = \mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{p}},\ E_\theta = \mathbf{E}\cdot\hat{\theta} \text{ et } E_\varphi = \mathbf{E}\cdot\hat{\varphi}.$$

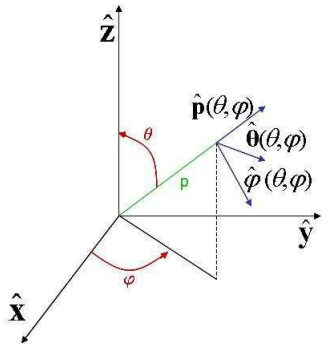


FIG. A.1 – Définition du repère $(\hat{\mathbf{p}}, \hat{\theta}, \hat{\varphi})$.

II Application aux équations de Vlasov-Maxwell relativistes tridimensionnelles

Pour résoudre numériquement l'équation de Vlasov-Maxwell relativiste tridimensionnelle, on recherche la fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)$ sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions de Laguerre $\psi_n(p)$ et d'harmoniques sphériques $\varphi_{nm}(\theta, \phi)$:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) \approx f^N(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \sum_{n=0}^{N}\sum_{l=0}^{L}\sum_{m=-l}^{l} f_{nlm}(\mathbf{x}, t)\psi_n(p)\,\varphi_{lm}(\theta, \varphi). \tag{A.12}$$

L'équation de Vlasov, avec un vecteur impulsion $\mathbf{p}$ exprimé en coordonnées sphériques, s'écrit

$$\partial_t f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \frac{\mathbf{p}}{\gamma(\mathbf{p})}.\nabla_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)\,.\nabla_{\mathbf{p}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = 0,$$

avec, dans ce système de coordonnées, l'expression du gradient d'impulsion,

$$\nabla_{\mathbf{p}} f = \partial_p f \ \hat{\mathbf{p}}(\theta,\varphi) + \frac{1}{p}\partial_\theta f \ \hat{\theta}(\theta,\varphi) + \frac{1}{p\sin\theta}\partial_\varphi f \ \hat{\varphi}(\theta,\varphi).$$

On en déduit que

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}(\mathbf{x},t)\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f &= E_p \sum_{nlm} \psi_n'(p)\varphi_{lm}(\theta,\varphi) \\
&\quad + E_\theta \sum_{nlm} \frac{\psi_n(p)}{p}\frac{\partial\varphi_{lm}}{\partial\theta}(\theta,\varphi) \\
&\quad + E_\varphi \sum_{nlm} \frac{\psi_n(p)}{p}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\varphi_{lm}}{\partial\varphi}(\theta,\varphi).
\end{aligned}$$

En profitant de plus du fait que

$$(\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})\cdot\hat{\mathbf{p}} = 0,$$

on en déduit aussi

$$\begin{aligned}
(\mathbf{v}\wedge\mathbf{B})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f &= \frac{p}{\sqrt{1+p^2}}(\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f, \\
&= (\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})_\theta \sum_{nlm} \frac{\psi_n(p)}{\sqrt{1+p^2}}\frac{\partial\varphi_{lm}}{\partial\theta}(\theta,\varphi) \\
&\quad + (\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})_\varphi \sum_{nlm} \frac{\psi_n(p)}{\sqrt{1+p^2}}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\varphi_{lm}}{\partial\varphi}(\theta,\varphi).
\end{aligned}$$

En écrivant l'élément de volume $d\mathbf{p}$,

$$d\mathbf{p} = p^2\sin\theta\, dp\, d\theta\, d\varphi,$$

les densités de charge et de courant, ρ et $\mathbf{j}$, présentes dans les équations de Maxwell ont les expressions :

$$\begin{aligned}
\rho &= \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} f(\mathbf{x},p,\theta,\varphi,t)\, p^2 dp\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi, \\
\mathbf{j} &= \int_0^{+\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} f(\mathbf{x},p,\theta,\varphi,t)\, \frac{p^3}{\sqrt{1+p^2}}\, dp\, \hat{\mathbf{p}}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi.
\end{aligned}$$

En injectant l'expression de f (A.12) dans l'équation de Vlasov, puis en multipliant par la fonction test $p^2\phi_n(p)\varphi_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta$ et en intégrant, on obtient une équation d'évolution

de chaque cœfficient $f_{nlm}(\mathbf{x},t)$ de la décomposition :

$$
\begin{aligned}
&(n+1)(n+2)\,\frac{\partial f_{nlm}(\mathbf{x},t)}{\partial t}\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \frac{p^3}{\sqrt{1+p^2}}\phi_n(p)\psi_{n'}(p)\,dp\ \sum_{l'm'}\left(\int\int \varphi_{lm}\varphi_{l'm'}\hat{\mathbf{p}}\,\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right)\cdot\nabla_{\mathbf{x}} f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \phi_n(p)\frac{d\psi_{n'}}{dp}p^2\,dp\sum_{l'm'}\left[\int\int E_p(\mathbf{x},\theta,\varphi,t)\varphi_{lm}\varphi_{l'm'}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right]\ f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'}(p)\,p\,dp\sum_{l'm'}\left[\int\int E_\theta(\mathbf{x},\theta,\varphi,t)\varphi_{lm}\partial_\theta\varphi_{l'm'}\ \sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right]\ f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'}(p)\,p\,dp\sum_{l'm'}\left[\int\int E_\varphi(\mathbf{x},\theta,\varphi,t)\varphi_{lm}\partial_\varphi\varphi_{l'm'}\,d\theta\,d\varphi\right]\ f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \frac{\phi_n\psi_{n'}}{\sqrt{1+p^2}}p^2\,dp\sum_{l'm'}\left[\int\int(\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})_\theta(\mathbf{x},\theta,\varphi,t)\,\varphi_{lm}\partial_\theta\varphi_{l'm'}\sin\theta d\theta\,d\varphi\right]\ f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&+\sum_{n'}\int_0^\infty \frac{\phi_n\psi_{n'}}{\sqrt{1+p^2}}p^2\,dp\sum_{l'm'}\left[\int\int(\hat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{B})_\varphi(\mathbf{x},\theta,\varphi,t)\,\varphi_{lm}\partial_\varphi\varphi_{l'm'}\,d\theta\,d\varphi\right]\ f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)\\
&=0.
\end{aligned}
\tag{A.13}
$$

Matriciellement, le système à résoudre s'écrit,

$$
\begin{aligned}
\partial_t F(\mathbf{x},t) \ &+\ C_1\,\partial_x F(\mathbf{x},t)+C_2\,\partial_y F(\mathbf{x},t)\\
&+\ C_3\,\partial_z F(\mathbf{x},t)+D_{\mathbf{E},\mathbf{B}}\,F(\mathbf{x},t)=0,
\end{aligned}
$$

où les matrices C_1, C_2 et C_3 sont les matrices de convection dans les trois directions spatiales, le vecteur F contient les cœfficients spectraux $f_{n'l'm'}(\mathbf{x},t)$ et la matrice $D_{\mathbf{E},\mathbf{B}}$ est la matrice de dérivation spectrale. Les matrices mises en jeu sont pleines et contiennent des intégrales complexes à calculer. Les matrices de convection ont l'avantage d'être indépendantes du temps. Les éléments de la matrice de dérivation spectrale dépendent des champs $\mathbf{E}(\mathbf{x},t)$ et $\mathbf{B}(\mathbf{x},t)$ et doivent donc être recalculés à chaque itération en temps.

Les seconds membres des équations de Maxwell, les densités de charge et de courant, sont calculés à partir des expressions suivantes :

$$
\begin{aligned}
\rho(\mathbf{x},t) &= \sum_{nlm} f_{nlm}(\mathbf{x},t)\int_0^{+\infty}\psi_n(p)\,p^2\,dp\ \int\int\varphi_{lm}\sin\theta\,d\theta d\varphi\\
&= f_{000}(\mathbf{x},t)\int_0^{+\infty}e^{-p}\,p^2\,dp\ \int\int\varphi_{00}\sin\theta\,d\theta d\varphi\\
&= 4\sqrt{\pi}f_{000}
\end{aligned}
$$

et

$$
\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \sum_{nlm} f_{nlm}(\mathbf{x},t)\int_0^{+\infty}\psi_n(p)\,\frac{p^3}{\sqrt{1+p^2}}\,dp\ \int\int\hat{\mathbf{p}}(\theta,\varphi)\varphi_{lm}\sin\theta\,d\theta d\varphi. \tag{A.14}
$$

Calculs des intégrales en radial

L'expression (A.13) conduit au calcul de cinq types d'intégrales en radial, notées I_1,...,I_4. Une dernière intégrale, notée I_5, doit être calculée pour obtenir l'expression (A.14) de la densité de courant $\mathbf{j}$.

En introduisant les polynômes :

$$P(p) = L_n^2(p)L_{n'}^2(p)p = \sum_{k=0}^{n+n'+1} a_k p^k, \tag{A.15}$$

$$Q(p) = L_n^2(p)L_{n'}^2(p)p^2 = \sum_{k=0}^{n+n'+2} b_k p^k, \tag{A.16}$$

$$R(p) = L_n^2(p)p^3 = \sum_{k=0}^{n+3} c_k p^k, \tag{A.17}$$

les intégrales s'écrivent :

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^\infty \frac{p^3}{\sqrt{1+p^2}}\phi_n(p)\psi_{n'}(p)\ dp = \sum_{k=0}^{n+n'+1} a_k \int_0^\infty \frac{p^{k+2}}{\sqrt{1+p^2}} e^{-p}\ dp,\\
I_2 &= \int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'}(p)p\ dp = \sum_{k=0}^{n+n'+1} a_k \int_0^\infty p^k e^{-p}\ dp,\\
I_3 &= \int_0^\infty \phi_n(p)\frac{d\psi_{n'}}{dp}p^2 dp\\
&= n'\int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'}(p)p\ dp - (n'+2)\int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'-1}(p)p\ dp - \int_0^\infty \phi_n(p)\psi_{n'}(p)p^2\ dp\\
&= n'\,I_2 - (n'+2)\sum_{k=0}^{n+n'} a_k \int_0^\infty p^k e^{-p}\ dp - \sum_{k=0}^{n+n'+2} c_k \int_0^\infty p^k e^{-p}\ dp,\\
I_4 &= \int_0^\infty \frac{p^2}{\sqrt{1+p^2}}\phi_n(p)\psi_{n'}(p)\ dp = \sum_{k=0}^{n+n'+1} a_k \int_0^\infty \frac{p^{k+1}}{\sqrt{1+p^2}} e^{-p}\ dp,\\
I_5 &= \int_0^\infty \psi_n(p)\frac{p^3}{\sqrt{1+p^2}}\ dp = \sum_{k=0}^{n+3} b_k \int_0^\infty \frac{p^k}{\sqrt{1+p^2}} e^{-p}\ dp.
\end{aligned} \tag{A.18}$$

Les intégrales,

$$J_k = \int_0^\infty \frac{p^k}{\sqrt{1+p^2}} e^{-p}\ dp,$$

pour $k = 0, ..., n+n'+3$, se calculent avec la formule de récurrence suivante :

$$J_{k+1} = kJ_k - J_{k-1} + (k+1)J_{k-2},$$

avec

$$J_0 = \frac{\pi}{2}(-Y_0(1) + S_0(1)),$$

$$J_1 = -\frac{\pi}{2}(Y_1(1) + S_{-1}(1))$$

et

$$J_2 = J_1 - J_0 + 1,$$

où l'on a noté $Y_k(p)$ et $S_k(p)$ des fonctions de Bessel et de Struve.

Les intégrales $\int_0^\infty p^k e^{-p}\, dp$, pour $k = 0, ..., n+3$, se calculent de la même manière.

Ainsi, toutes les intégrales (A.18) sont calculables mais d'expressions complexes, faisant intervenir des fonctions spéciales, à évaluer. Pour cette raison, il semble judicieux d'employer un outil de calcul formel tel que Maple ou Mathematica qui permet de calculer tous les produits scalaires en radial pour un nombre maximal donné de fonctions d'analyse en p.

Calculs des intégrales en (θ, ϕ)

Les intégrales en radial se calculent via la formule suivante :

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \varphi_{l_1 m_1}\varphi_{l_2 m_2}\varphi_{l_3 m_3} \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$
$$= \sqrt{\frac{1}{4\pi}(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix},$$

où $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$, est le symbol de Wigner associé aux cœfficients de Clesch-Gordan [3].

Annexe B

Eléments du code HELIOS

Nous présentons dans cette annexe des éléments complémentaires au chapitre 7. Les tableaux B.1 rapportent les temps de calcul, pour différents jeux de paramètres (I, N), du code HELIOS dans sa version parallélisée non optimisée et dans sa version optimisée. Nous donnons dans chacun des cas les *speed-up* associés. La figure B.1 montre le script écrit pour le stockage sur SHERPA des données générées par le code.

N_p	HELIOS non-optimisé Temps/itération	*speed-up*	HELIOS optimisé Temps/itération	*speed-up*
1	105	1	16.9	1
2	60	1.75	8.4	2
5	32.7	3.2	4.8	3.5
10	20.5	5.12	3.9	4.3
20	17.9	5.86	4.12	4.1
40	17.4	6.03	4.56	3.7
80	20.1	5.22	-	-

$N = 40$ et $I = 80$

N_p	HELIOS non-optimisé Temps/itération	*speed-up*	HELIOS optimisé Temps/itération	*speed-up*
1	9212	1	2582	1
5	1960	4.7	562	4.6
10	1147	8	307	8.4
20	742	12.4	197	13.1
50	551.2	16.7	144	17.9
100	535	17.2	143	18
200	580	15.9	-	-

$N = 100$ et $I = 100$

TAB. B.1 – *Temps de calcul pour une itération du code HELIOS non-optimisé et du code HELIOS optimisé en fonction du nombre de processeurs* N_p.

Jan 04, 07 10:14 **script_sherpa** Page 1/2

```
#!/bin/sh

# pour voir ce que fait le script :
# set -x

ulimit -c 0

# printenv
# MSUB_JOBNAME

if [ "$MSUB_JOBNAME" == "" ] ; then
echo "FATALE ERREUR : MSUB_JOBNAME non positionnee !"
exit
fi
if [ "$MSUB_NPES" == "" ] ; then
echo "FATALE ERREUR : MSUB_NPES non positionnee !"
exit
fi

cas=$MSUB_JOBNAME
echo "Nom du cas :"$cas

cd ~          /helios_parallele/$cas
if [ -f "num_reprise.dat" ]; then
num=`cat num_reprise.dat`
echo "Numero de la reprise :"$num
else
num=-1
echo "Numero de la reprise : Pas de reprise"
fi

# Creation des dossiers du cas sur le cache et sur le ref
#--------------------------------

if [ ! -d `home -p`/$cas ] ; then
mkdir `home -p`/$cas
fi
if  [ ! -d `home -c`/$cas ] ; then
mkdir `home -c`/$cas
fi

# listing
#--------

dirige -f  ~          /helios_parallele/$cas


# Lecture
#--------
if [ $num !=  -1 ] ; then
nom=`home -p`/$cas/reprise_Distrib.dat$num
if [ -f $nom ] ; then
sherpa_cache_entree  -l $nom
fi
nom=`home -p`/$cas/reprise_Distrib_binary.dat$num
if [ -f $nom ] ; then
sherpa_cache_entree -l $nom
fi
fi

# Execution
#----------
```

Jan 04, 07 10:14 **script_sherpa** Page 2/2

```
cd ~          /helios_parallele/code1Dx_3Dp

if [ "$1" == "-dbg" ] ; then
cea_mprun -n $MSUB_NPES ./DBG/helios.exe          /helios_parallele/$cas `home -
p`/$cas
elif [ "$1" == "-tv" ] ; then
cea_mprun -d tv -n $MSUB_NPES ./DBG/helios.exe          /helios_parallele/$cas `
home -p`/$cas
elif [ "$1" == "-ddt" ] ; then
cea_mprun -d ddt -n $MSUB_NPES ./DBG/helios.exe          /helios_parallele/$cas
`home -p`/$cas
else
cea_mprun -n $MSUB_NPES ./PERF/helios.exe          /helios_parallele/$cas `home
-p`/$cas
fi

# Ecriture
#---------

echo "Transfert des fichiers produits !"

if [ -f "num_reprise.dat" ]; then
num=`cat num_reprise.dat`
nom=`home -p`/$cas/reprise_Distrib.dat$num
if [ -f $nom ] ; then
echo "Transfert du fichier :"$nom
sherpa_cache_entree -e $nom
fi
nom=`home -p`/$cas/reprise_Distrib_binary.dat$num
if [ -f $nom ] ; then
echo "Transfert du fichier :"$nom
sherpa_cache_entree -e $nom
fi
fi

i=0
while [ $i -le 5 ] ; do
nom=`home -p`/$cas/save_Distrib_el_t$i.dat
if [ -f "$nom" ]; then
echo "Transfert du fichier :"$nom
sherpa_cache_entree -e $nom

nom=`home -p`/$cas/save_Distrib_e2_t$i.dat
echo "Transfert du fichier :"$nom
sherpa_cache_entree -e $nom
fi
i=`expr $i + 1`
done
```

FIG. B.1 – *Script pour le stockage sur SHERPA des données générées par le code HE-*

Bibliographie

[1] Amdahl D., *Validity of the single processor approach to achieving large-scale computing capabilities*, AFIPS Conference Proceedings, 483-485, 1967.

[2] Arber T.D. and Vann R.G.L., *A critical comparison of Eulerian-grid-based Vlasov solvers*, J. Comput. Phys, **180**, 339-357, 2002.

[3] Arfken G., *Spherical harmonics*, Mathematics Method for Physicists, 3rd edition, 680-685, 1985.

[4] Armstrong P.T, *Numerical Studies of the Nonlinear Vlasov Equation*, Phys. of Fluids, **10**(6), 1269-1280, 1967.

[5] Armstrong P.T and Montgomery, *Asymptotic state of the two-stream instability*, J. Plasma Phys., **1**, 425-433, 1967.

[6] Armstrong P.T., Harding R., Knorr G., Montgomery D., *Solution of the Vlasov's equation by transform methods*, Advances in Computational Physics, **9**, 29, 1976.

[7] Assous F., Degond P., Heintze E., Raviart P.A. and Segré J., *On a finite-element method for solving the three-dimensionnal Maxwell equations*, J. Comput. Phys., **109**, 222-237, 1993.

[8] Barthelmé R., *Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de Vlasov et de Maxwell*, Thèse de l'université Louis Pasteur, Strasbourg, 2005.

[9] Bernardi C. and Maday Y., *'Spectral Method'. In : Handbook of Numerical Analysis*, Vol. 5. ed by Ciarled and J.L. Lions, Amsterdam,1997.

[10] Bernstein I.B., Greene J.M. and Kruskal M.D., *Exact nonlinear plasma oscillations*, Phys. Rev., **108**, 546-550, 1957.

[11] Besse N., *Etude mathématique et numérique de l'équation de Vlasov non linéaire sur des maillages non structurés de l'espace des phases*, Thèse de l'université Louis Pasteur, Strasbourg, 2003.

[12] Besse N. Filbet F. Gutnic M. Paun I. and Sonnendrücker E., *An adaptative numerical method for the Vlasov equation based on a multiresolution analysis*, Numerical Mathematics and advanced applications ENUMATH, 437-446, 2001.

[13] Besse N. and Sonnendrücker E., *Semi-Lagrangien schemes for the Vlasov equation on an unstructured mesh of phase space*, J. Comput. Phys., **191**, 341-376, 2003.

[14] Besse N. and Mehrenberger M., *Convergence of classes of high-order semi-Lagrangian schemes for the Vlasov-Poisson system*, à paraître dans Math. of Comp. et prépublication IRMA 032 (2004). `http://www-irma.u-strasbg.fr/annexes/publications/pdf/04032.pdf`

[15] Besse N., Segré J. and Sonnendrücker E., *Semi-Lagrangian schemes for the two-dimensional Vlasov-Poisson system on unstructured meshes*, Transport Theory Statist. Phys., **34**, 311-332, 2005.

[16] Birdsall C. K. and Langdon A. B., *Plasma Physics Via Computer Simulation*, Inst. of Physics, 1991.

[17] Boris J.P. and Book D. L., *Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport*, J. Comput. Phys., **20**, 397-431, 1976.

[18] Bourdarie S., Friedel R.H.W., Fennel J., Kanekal S. and Cayton T.E., *Radiation belt representation of the energetic electron environment : Model and data synthesis using the Salammbô radiation belt transport code and Los Alamos geosynschonous and GPS energetic particle data*, Space Weather, **3**, 2005.

[19] Bostan M., *Convergence des solutions faibles du système de Vlasov-Maxwell stationnaire vers des solutions faibles du système de Vlasov-Poisson stationnaire quand la vitesse de la lumière tend vers l'infini*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser I 340, 803-808, 2005.

[20] Bostan M., *Solutions périodiques en temps des équations de Vlasov-Maxwell*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser I 339, 451-456, 2004.

[21] Boyd J.P., *Asymptotic coefficients of Hermite function series*, J. Comput. Phys., **54**, 382-410, 1984.

[22] Boyd J.P., *Chebychev and Fourier Spectral Methods*, Dover publications, second edition, 2001.

[23] Bret A., Gremillet L. and Bellido J.C., *How really transverse is the filamentation instability ?*, Phys. Plasmas, à paraître, 2007.

[24] Califano F., Pegoraro F., Bulanov S.V. and Mangeney A., *Kinetic saturation of the Weibel instability in a collisonless plasma*, Phys. Review E, **57**(6), 7048-7059, 1998.

[25] Canouet N., Fezoui L. and Piperno S., *3D Maxwell's equations and orthogonal non-conforming meshes : a hp-type Discontinuous Galerkin method*, Technical Report RR-4912, INRIA, 2003.

[26] Canuto C., Hussaini M. Y., Quarteroni A., Zang T.A., *Spectral Methods - Fundamentals in Single Domains*, Springer, 2006.

[27] Cheng C.Z. and Knorr G., *The integration of the Vlasov equation in configuration space*, J. Comput. Phys., **22**, 330-351, 1976.

[28] Ciurea-Borcia R., Matthieussent G., Solomon J., Le Bel E. and Simonet F., *Pitch-angle diffusion of relativistic electrons due to resonant interactions with whistler waves*, Phys. Plasmas, **6**, 4597-4606, 1999.

[29] Ciurea-Borcia R., Matthieussent G., Le Bel E., Simonet F. and Solomon J., *Oblique whistler waves generated in cold plasma by relativistic electron beams*, Phys. Plasmas, **7**, 359-370, 2000.

[30] Cohen G., and Monk P., *Mur-Nedelec finite element schemes for Maxwell's equations*, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., **169**, 197-217, 1999.

[31] Cohen G., Ferrières X. and Pernet S., *A spatial high-order hexahedral discontinuous Galerkin method to solve Maxwell's equations in time domain*, J. Comput. Phys., **217**, 340-363, 2006.

[32] Cohen-Tannoudji C., Diu B. and Laloë F. *Mécanique quantique*, volumes 1 et 2, Hermann, 1973.

[33] Dautray R. and Lions J.L., *Analyse mathématique et calcul scientifique pour les sciences et les techniques*, Masson (Paris) tome 2, 1985.

[34] Davidson R.C., *Kinetic waves and instabilities in a uniform plasma*, Handbook of Plasma Physics, vol 1, 554, Eds A.A. Galeev and R.N. Sudan, 1983.

[35] Delcroix J.L and Bers A., *Physique des plasmas*, Tomes 1&2, Savoirs Actuels, CNRS Edition, 1994.

[36] Denton R.E. and Kotschenreuther, δf *Algorithm*, J. Comput. Phys., **119**, 283, 1995.

[37] DiPerna R.J. and Lions J.L. *Global weak solutions of Vlasov-Maxwell system*, Comm. Pure Appl. Math. XVII, 729-757, 1989.

[38] DiPeso G., Morse E.C. and Ziolkowski R. W., δf *and particle simulations of parametric instabilities*, J. Comput. Phys., **96**, 325, 1991.

[39] Diu B., Guthmann C., Lederer D. and Roulet B., *Physique statistique*, Hermann, Editeurs des sciences et des arts, 1989.

[40] Eliasson B., *Outflow Boundary Conditions for the Fourier Transformed One-Dimensional Vlasov-Poisson System*, J. Sci. Comput., **16**(1), 1-28, 2001.

[41] Eliasson B., *Domain Decomposition of the Padé Scheme and Pseudo-Spectral Method, Used in Vlasov Simulations*, IT Scientific Report 2002-029, ISSN 1404-3203, Department of Information Technology, Uppsala University, 2002.

[42] Eliasson B., *Outflow boundary conditions for the Fourier transformed two-dimensional Vlasov equation*, J. Comput. Phys., **181**(1), 98-125, 2002.

[43] Eliasson B., *Numerical modelling the Fourier transformed two-dimensional Vlasov-Maxwell system*, J. Comput. Phys., **190**, 501-522, 2003.

[44] Eliasson B., *The parallel implementation of the one-dimensional Fourier transformed Vlasov-Poisson system*, Comput. Phys. Comm, **170**, 205-230, 2005.

[45] Elkina N.V. and Büchner J., *A new conservative unsplit method for the solution of the Vlasov equation*, J. Comput. Phys., **213**, 862-875, 2006.

[46] Ezzuddin, Z.Y., *Numerical solutions of nonlinear plasma equations by the finite element method*, Ph.D.Thesis California Univ., Los Angeles, 1975.

[47] Feynman R. P., *Electromagnétisme 1*, InterEditions, Paris, 1979.

[48] Figua H., Bouchut F., Feix M.R. and Fijalkow E., *Instability of the filtering method for Vlasov's equation*, J. Comput. Phys., **159**, 440-447, 2000.

[49] Fijalkow E., *A numerical solution to the Vlasov equation*, Comput. Phys. Commun., **116**, 319-328, 1999.

[50] Fijalkow E., *Numerical solution to the Vlasov equation : the 1D code*, Comput. Phys. Commun., **116**, 329-335, 1999.

[51] Filbet F., Sonnendrücker E. and Bertrand P., *Conservative numerical schemes for the Vlasov equation*, Comput. Phys. Comm., **172**, 166-187, 2001.

[52] Filbet F. and Sonnendrücker E., *Comparison of Eulerian Vlasov solvers*, Comput. Phys. Comm., **150**, 247-266, 2003.

[53] Fochesato C. and Bouche D., *Evaluation de différents solveurs de Maxwell pour la résolution de Maxwell-Vlasov par une méthode PIC*, Rapport CEA-R-6140, 2007.

[54] Fornberg B., *A practical guide to Pseudospectral Methods*, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 1998.

[55] Funaro D. and Kavian O., *Approximation of some diffusion evolution equations in unbounded domains by Hermite functions*, Math. Comput., **57**(196), 597-619, 1991.

[56] Gagne R. and Shoucri M., *A splitting scheme for the numerical solution of a one-dimensional Vlasov equation*, J. Comput. Phys., **24**, 445, 1977.

[57] Glassey R. and Schaeffer J., *On the 'one and one-half dimensional' relativistic Vlasov-Maxwell system*, Math. Meth. Appl. Sci., **13**, 169-179, 1990.

[58] Glassey R. and Schaeffer J., *The 'two and one-half dimensional' relativistic Vlasov-Maxwell system*, Comm. Math. Phys., **185**, 257-284, 1997.

[59] Glassey R. and Schaeffer J., *The relativistic Vlasov-Maxwell system in two space dimensions : Part I & II* , Arch. Rat. Mech. Anal., **92**, 56-90, 1986.

[60] Glassey R. and Strauss W., *Singularity formation in a collisionless plasma could only occur at high velocities*, Arch. Rat. Mech. Anal., **92**, 56-90, 1986.

[61] Gottlieb D. and Orszag S.A., *Numerical analysis of spectral methods : Theory and applications*, Soc. Ind. and Appl. Math., Philadelphia, 1977.

[62] Grant F. C. and Feix M. R., *Fourier-Hermite Solutions of the Vlasov Equations in the linearized Limit*, Phys. Fluids, **10**, 696, 1967.

[63] Guo B.Y., *Error estimation for Hermite spectral method for nonlinear partial differential equations*, Math. Comp., **68**, 1067-1078, 1999.

[64] Guo Y., *Global weak solutions of the Vlasov-Maxwell system with boundary conditions*, Comm. Math. Phys., **154**, 245-263, 1993.

[65] Guo B.Y., Xu C.L., *Hermite pseudospectral method for nonlinear partial differential equations*, Math. Model. Numer. Anal., **34**(4), 859-872, 2000.

[66] Gutnic M., Haefele M., Paun I. and Sonnendrücker E., *Vlasov simulations on an adaptative phase-space grid*, Comput. Phys. Comm., **164**, 214-219, 2004.

[67] Gutnic M., Haefele M., and Sonnendrücker E., *Moments conservation in adaptative Vlasov solver*, Nucl. Instrum. Methods A, **558**, 159-162, 2006.

[68] Hermeline F., *Two coupled particule-finite volume methods using Delaunay-Voronoï meshes for the approximation of Vlasov-Poisson and Vlasov-Maxwell equations*, J. Comput. Phys., **106**, 1-18, 1993.

[69] Hockney R.W., Eastwood J.W, *Computer Simulation Using Particles*, McGraw-Hill Book Company, 1981.

[70] Holloway J.P., *Spectral velocity discretizations for the Vlasov-Maxwell equations*, Transport theory and statistical physics, **25**(1), 1-32, 1996.

[71] Holloway J.P., *On numerical methods for Hamiltonian PDEs and a collocation method for the Vlasov-Maxwell equations*, J. Comput. Phys., **129**, 121, 1996.

[72] Holzer R.E., Burton R.K. and Chan K.W., *Comparison of magnetospheric hiss with plasma parameters during weak diffusion*, Rapport technique, Pub n°1550, Institute of Geophysics and Planetary physics, UCLA, fevrier 1976.

[73] Huot F., Ghizzo A., Bertrand P., Sonnendrücker E. and Coulaud O., *Instability of the time splitting scheme for the one-dimensional and relativistic Vlasov-Maxwell system*, J. Comput. Phys., **185**, 512-531, 2003.

[74] Izrar B., Ghizzo A., Bertrand P., Fijalkow E., Feix M. R., *Integration of Vlasov equation by a fast Fourier Eulerian code*, Comput. Phys. Comm, **52**, 375-382, 1989.

[75] Jogalekar P. and Woodside M., *Evaluating the scalability of distributed systems*, IEEE Transactions on Parallel and Distributed System, **11**(6), 589-603, 2000.

[76] Joyce G., Knorr G. and Meier H., *Numerical integration methods of the Vlasov equation*, J. Comput. Phys., **8**, 53-63, 1971.

[77] Kennel C. F., Petschek H. E., *Limit on stably trapped particle fluxes*, J. Geophys. Res., **71**, 1-28, 1966.

[78] Klimas A. J., *A method for overcoming the velocity space filamentation problem in collisionless plasma model solutions*, J. Comput. Phys., **68**, 202, 1987.

[79] Klimas A. J. and Farrell W. M., *A splitting algorithm for Vlasov simulation with filamentation filtration*, J. Comput. Phys., **110**, 150-163, 1994.

[80] Le Bel E., *Etude physique et numérique de la saturation des ceintures de Van Allen*, Thèse de l'université Paris XI, Orsay, 2002.

[81] Le Bourdiec S., de Vuyst F. and Jacquet L., *Numerical solution of the Vlasov-Poisson system using generalized Hermite functions*, Comput. Phys. Comm., **175**, 528-544, 2006.

[82] Lefebvre E., Cochet N., Fritzler S., Malka V., Aléonard M.-M., Chemin J.-F., Darbon S., Disdier L., Faure J., Fedotoff A. *et al.* , *Electron and photon production from relativistic laser-plasma interactions*, Nucl. Fusion, **43**, 629-633, 2003.

[83] Ma H., Sun W. and Tang T. *Hermite Spectral Methods with a Time-Dependent Scaling for Parabolic Equations in Unbounded Domains*, *SIAM J. Num. Anal.*, **43**, 58-75, 2005.

[84] Manfredi G., *Long-Time Behavior of Nonlinear Landau Damping*, Phys. Rev. Lett., **79**(15), 2815-2818, 1997.

[85] Manfredi G. and Bertrand P., *Stability of Bernstein-Greene-Kruskal modes*, Phys. Plasmas, **7**, 2425-2431, 2000.

[86] Mangeney A., Califano F., Cavazzoni C. and Travnicek P., *A numerical Scheme for the Integration of the Vlasov-Maxwell System of Equations*, J. Comput. Phys., **179**, 495-538, 2002.

[87] Message Passing Interface (MPI), `http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/`

[88] Mehrenberger M., Violard E., Hoenen O., Campos Pinto M. and Sonnendrücker E., *A parallel adaptative Vlasov solver based on hierarchical finite element interpolation*, Nucl. Instrum. Methods A, **558**, 188-191, 2006.

[89] Nakamura T. and Yabe T., *Cubic interpolated propagation scheme for solving the hyper-dimensional Vlasov-Poisson equation in phase space*, Comput. Phys. Comm., **120**, 122-154, 1999.

[90] Newmat10, `http://objcryst.sourceforge.net/ObjCryst/newmat.htm`

[91] Omura Y. and Summers D., *Computer simulations of the relativistic whistler-mode wave-particle interactions*, Phys. Plasmas, **11**, 3530, 2004.

[92] O'Neil T.M., *Collisionless damping of an electron plasma wave*, Phys. Fluids, **8**(12), 2255, 1965.

[93] Orszag S.A., *Comparison of pseudospectral and spectral approximations*, Stud. Appl. Math., **51**, 253-259, 1972.

[94] Ossakow S.L., Ott E. and Haber I., *Nonlinear evolution of whistler instabilities*, Phys. Fluids, **15**(12), 2314-2326, 1972.

[95] Piperno S., Remaki M. and Fezoui L., *A non-diffusive finite volume scheme for the 3D Maxwell equations on unstructured meshes*, SIAM J. Numer. Anal., **39**(6), 2089-2108, 2002.

[96] Piperno S. and Fezoui L., *A discontinous Galerkin FVTD method for 3D Maxwell equations*, Technical report RR-4733, INRIA, 2003.

[97] Piperno S., *Schémas en éléments finis discontinus localement raffinés en espace et en temps pour les équations de Maxwell 1D*, Technical Report RR-4986, INRIA, 2003.

[98] Poupaud F., *Boundary value problems for the stationary Vlasov-Maxwell system*, Forum Math., **4**, 499-527, 1992.

[99] Pohn E., Shoucri M. and Kamelander G., *Eulerian Vlasov codes*, Comput. Phys. Comm., **166**, 81-93, 2005.

[100] Rein G., *Global weak solutions to the relativistic Vlasov-Maxwell system revisited*, Comm. Math. Sci., **2**(2), 145-158, 2004.

[101] Remaki M., *A new finite volume scheme for solving Maxwell's system*, COMPEL, **19**(3), 913-931, 2000.

[102] Réveillé T., Bertrand P., Ghizzo A., Simonet F., Baussard N., *Dynamic evolution of relativistic electrons in radiation belts*, J. Geophys. Res., **106**(A9), 18883-18894, 2001.

[103] Ricci P., Lapenda G. and Brackbill J.U., *A simplified implicit Maxwell solver*, J. Comp. Phys., **183**, 117, 2002.

[104] Robinson P.A. and Coakley P., *Spacecraft charging, progress in the study of dielectrics and plasmas*, IEEE Transactions on Electrical Insulation, **27**(5), 994, 1992.

[105] Roux A. and Solomon J., *Mécanismes non linéaires associés aux interactions ondes-particules dans la magnétosphère*, Ann. Géophys., **26**(2), 279-297, 1970.

[106] Schmitz H. and Grauer R., *Darwin-Vlasov simulations of magnetized plasmas*, J. Comput. Phys., **214**, 738-756, 2006.

[107] Schumer J.W. and Holloway J.P., *Vlasov simulations using velocity-scaled Hermite representations*, J. Comput. Phys., **144**, 626-661, 1998.

[108] Shebalin J.V., *A spectral algorithm for solving the relativistic Vlasov-Maxwell equations*, Comput. Phys. Comm., **156**, 86-94, 2003.

[109] Shoucri M. and Knorr G., *Numerical integration of the Vlasov equation*, J. Comput. Phys., **14**, 84, 1974.

[110] Shoucri M., *Numerical simulation of plasma edge turbulence due to E×B flow velocity shear*, Czechoslovak J. Phys., **51**, 1139-1151, 2001.

[111] Shoucri M., Gerhauser H. and Finken K.-H., *Integration of the Vlasov equation along characteristics in one and two dimensions*, Comput. Phys. Comm., **154**, 65-75, 2003.

[112] Silin I. and Büchner J., *Three-dimensional Vlasov-code simulations of magnetopause-like current sheets*, Adv. Space Res., **37**, 1354-1362, 2006.

[113] Solomon J., *Injection de particules énergétiques dans la magnétosphère. Conséquence sur les déformations des fonctions de distribution et sur les interactions de gyrorésonance*, Thèse de l'université Paris-Sud, Orsay, 1977.

[114] Solomon J., Cornilleau-Wehrlin N., *An experimental study of ELF/VLF hiss generation in the Earth's magnetosphere*, J. Geophys. Res., **93**(A3), 1839, 1988.

[115] Sonnendrücker E., Roche J., Bertrand P. and Ghizzo A., *The semi-lagrangian method for the numerical resolution of Vlasov equations*, J. Comput. Phys., **149**, 201-220, 1998.

[116] Sonnendrücker E., Filbet F., Friedman A., Oudet E. and Vay J.L., *Vlasov simulation of beams on a moving phase-space grid*, Comput. Phys. Comm., **164**, 390, 2004.

[117] Sonnendrücker E. and Navaro P. , *Développement du code Maxwell-Vlasov PIC parallèle Brennus : Mise en œuvre d'un solveur 2D par la méthode de Galerkin discontinu*, Rapport CEA, novembre 2006.

[118] Strang G., *On the construction and comparison of difference schemes*, SIAM J. Numer. Anal. **5**(3), 506-517, 1968.

[119] Sydora R. D., *Low-noise electromagnetic and relativistic particle-in-cells plasma simulation models*, J. Comput. and Applied Mathematics, **109**, 243-259, 1999.

[120] Szegö G., *Orthogonal polynomials*, Amer. Math. Soc, New York, 1967.

[121] Taflove A. and Hagness S.C., *Computational Electrodynamics : The Finite Difference Time-Domain method*, Second Edition, Artech House, Boston, 2000.

[122] Tang T., *The Hermite spectral method for gaussian-type functions*, SIAM J. Sci. Comput., **14**(3), 594-606, 1993.

[123] Tang T., McKee S. and Reeks M.W., *A spectral method for the numerical solutions of a kinetic equation describing the dispersion of small particles in a turbulent flow*, J. Comput. Phys., **103**, 222-230, 1992.

[124] Valentini F., Veltri P. and Mangeney A., *A numerical scheme for the integration of the Vlasov-Poisson system of equations in magnetized case*, J. Comput. Phys., **210**, 730-751, 2005.

[125] Van Allen J. A., McIlwain C. E. and Ludwig G. H., *Radiation observations with satellite 1958*, J. Geophys. Res., **64**, 271, 1959.

[126] Van Allen J. A. and Frank L. A., *Radiation around the Earth to a radial distance of 107,400Km*, Nature, **184**, 219, 1959.

[127] Van Allen J. A., *The first public lecture on the discovery of the geomagnetically trapped radiation*, State University of Iowa Report, 1960.

[128] Webb R.C., Palkuti L., Cohn L., Kweder Lt. Col. G. and Costantine A., *The commercial and military survivability crisis*, Defense Electronics, 21, 1995.

[129] Weideman J.A.C., *The eigenvalues of Hermite and rational spectral différentiation matrices*, Numer. Math., **61**, 409-431, 1992.

[130] Wollman S., *An existence and uniqueness theorem for the Vlasov-Maxwell system*, Comm. Appl. Math., **37**, 457-462, 1984.

[131] Wollman S., Ozizmir E., *Numerical approximation of the one-dimensional Vlasov-Poisson system with periodic boundary conditions*, SIAM J. Numer. Anal., **33**(4), 1377-1409, 1996.

[132] Xiao F., Thorne R.M. and Summers D., *Instability of electromagnetic R-modes waves in relativistic plasma*, Phys. Plasmas, **5**, 2489-2497, 1998.

[133] Yang T.Y.B., Arons J. and Langdon A.B, *Evolution of the Weibel instability in relativistically hot electron-positron plasmas*, Phys. Plasmas, *1*(9), 3059-3077, 1994.

[134] Yee K.S., *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media*, IEEE Trans. Antennas and Propagation, **14**(3), 302-307, 1966.

[135] Yee K.S. and Chen J.S., *The finite-difference time-domain (FDTD) and the finite-volume time-domain (FVTD) methods in solving Maxwell equations*, IEEE Trans. Antennas and Propagation, **45**(3), 354-363, 1997.

[136] Yu W., Mittra R., Su T., Liu Y. and Yang X., *Parallel Finite-Difference Time-Domain Method*, Artech House Publishers, Edition 1, 2006.

[137] Zaki S. I., Gardner L. R. and Boyd T. J. M., *A finite element code for the simulation of one-dimensional Vlasov plasmas I Theory*, J. Comput. Phys., **79**, 184-199, 1988 ; *II Applications*, J. Comput. Phys., **79**, 200, 1988.

[138] Zenger C., *Sparse Grids*, In W. Hackbusch editor, *Parallel Algorithms for Partial Differential Equations*, Proceedinds of the Sixth GAMM-Seminar, Kiel 1990, volume **31** of Notes on Num. Fluid Mech. Vieweg-Verlag, 1991.

[139] Zumbusch G., *A Sparse Grid PDE Solver*, Advances in Software Tools for Scientific Computing (Proceedings SciTools '98), editor : H. P. Langtangen, A. M. Bruaset, E. Quak, Springer, chapter 4 in Lecture Notes in Computational Science and Engineering **10**, 133-178, 2000.

Article publié dans Computer Physics Communications

Available online at www.sciencedirect.com
ScienceDirect
Computer Physics Communications 175 (2006) 528–544
Computer Physics Communications
www.elsevier.com/locate/cpc

Numerical solution of the Vlasov–Poisson system using generalized Hermite functions

S. Le Bourdiec [a,b,*], F. de Vuyst [b,c,d], L. Jacquet [a]

[a] *CEA DAM Ile de France, BP 12, 91680 Bruyères-le-Châtel, France*
[b] *École Centrale Paris, laboratoire MAS, Grande Voie des Vignes, 92295 Châtenay-Malabry cedex, France*
[c] *CMLA, ENS Cachan, 61, avenue du président Wilson, 94235 Cachan cedex, France*
[d] *Laboratoire de recherche conventionné CEA DAM–ECP, BP 12, 91680 Bruyères-le-Châtel, France*

Received 3 January 2006; received in revised form 12 July 2006; accepted 12 July 2006

Available online 1 September 2006

Abstract

Two different spectral approaches for solving the nonlinear Vlasov–Poisson equations are presented and discussed. The first approach is based on a standard spectral Galerkin method (SGM) using Hermite functions in the velocity space. The second method which belongs to the family of pseudospectral methods (SCM) uses Gauss–Hermite collocation points for the velocity discretization. The high-dimensional feature of these equations and the suspected presence of small scales in the solution suggested us to employ these methods that provide high order accuracy while considering a "small" number of ad hoc basis functions. The scaled Hermite functions allow us to treat the case of unbounded domains and to properly recover Gaussian-type distributions. Some numerical results on usual test cases are shown and prove the good agreement with the theory.
© 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 52.65.Ff; 52.35.-g; 52.65.-y

Keywords: Vlasov equation; Spectral method; Pseudospectral method; Hermite functions; Collocation; Scaling factor

1. Introduction

In the last thirty years, various numerical methods have been developed for solving the Vlasov–Maxwell equations. These methods can be parted in two main branches. The first is the well-known *particle-in-cell* (PIC) method. This method introduces the concept of pseudo-particles and relies on the computation of their trajectories. The intrinsic stochastic process allows to scan all the velocity space. The PIC method has been successfully used to simulate the behaviour of collisionless laboratory and space plasmas and provides accurate results for the modelling of large scale phenomena in one, two and three space dimensions (Birdsall–Langdon [1]). It is also well suited to address more sophisticated situations such as complex geometries, on non-Cartesian meshes. It can also be extended to the full relativistic regime in a quite straightforward way (Omura–Summers [2]). Moreover, PIC codes suffer from intrinsic drawbacks. Since they deal with a relatively limited number of particles of finite size, they produce noisy fields and in turn noisy particle accelerations. Due to the intrinsic noise, they are not suited for problems where the phase space structures drive the physics. In particular, artificial noise generation can make impractical simulations of electromagnetic waves excited by weak plasma instabilities (Sydora [3]).

An alternative approach based on an Eulerian approach consists in solving the Vlasov equation for the distribution function along with the Maxwell equations. In most of the case, the distribution function and the fields are computed on a multidimensional grid in phase space (both space and velocity variables). In the sixties, a variant has been proposed: rather to discretize the function in velocity space, Galerkin methods with a "small" finite set of orthogonal polynomials are used (Armstrong [4], Joyce et al. [5]. More recently, Tang [6], Tang et al. [7], Holloway [8] and Schumer–Holloway [9] have shown the merit to

* Corresponding author.
E-mail addresses: solene.le-bourdiec@cea.fr (S. Le Bourdiec), florian.de-vuyst@ecp.fr (F. de Vuyst), laurent.jacquet@cea.fr (L. Jacquet).

0010-4655/$ – see front matter © 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.
doi:10.1016/j.cpc.2006.07.004

use rescaled orthogonal basis like the so-called scaled Hermite basis. In [9], the authors show that, according to some symmetry properties of the Hermite weights, the numerical method conserves certain integral quantities like the number of particles, the momentum, the energy or the L^2-norm. These properties leads to algorithms that can provide long time numerical stability while using a small set of basis functions. Therefore, we have adopted such methods to write down our own Vlasov–Maxwell code devoted to the study of the wave–particle interactions in the magnetospheric plasma. In this article, we present the first version of the code which is one-dimensional in both space and velocity and restricted to the Vlasov–Poisson system.

The paper is organized as follows. First we briefly recall the main features of the multidimensional Vlasov–Maxwell system. In the two next sections we describe the application of the spectral method and of the pseudospectral collocation method to our system of equations in the two-dimensional phase space (1Dx-1Dv). Then, we show the numerical results obtained by these two methods for some short-time and long-time usual test cases, namely the linear Landau Damping, the nonlinear Landau damping and the two-stream instability. Our results are compared with theoretical predictions and numerical results given in previous works. Finally we give our concluding remarks about the extension of this work to the 2Dx-3Dp Vlasov–Maxwell code.

2. The Vlasov–Maxwell system

Apart from regions located very near from Earth's surface, the magnetospheric plasma can be considered as collisionless. For many physical problems its dynamics is driven by kinetic effects and can be described by the relativistic Vlasov–Maxwell equations.

$$\begin{cases} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\nabla_{\mathbf{p}} f_\alpha = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}}\times\mathbf{E} = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2\nabla_{\mathbf{x}}\times\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}}\cdot\mathbf{B} = 0. \end{cases} \tag{1}$$

This system describes the evolution in the phase space $(\mathbf{x},\mathbf{p}) \in (\Omega\subset\mathbb{R}^3)\times\mathbb{R}^3$, of the distribution functions $f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t)$ of the particles of species α, m_α and q_α being the corresponding mass and charge. The momentum is defined by:

$$\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}, \tag{2}$$

where γ is the relativistic factor. The electric and magnetic fields $\mathbf{E}$ and $\mathbf{B}$ are respectively determined by the charge and current densities ρ and $\mathbf{j}$ given by

$$\begin{cases} \rho = \sum_\alpha q_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} f_\alpha \,\mathrm{d}\mathbf{p}, \\ \mathbf{j} = \sum_\alpha q_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{v} f_\alpha \,\mathrm{d}\mathbf{p}. \end{cases} \tag{3}$$

Because of the self-consistent coupling of the fields and the distribution functions, these equations are nonlinear and exact solutions can be found only in special situations. However, recent papers show that the Vlasov–Maxwell system is a well-posed problem and some estimates on global weak solutions have been discovered (Rein [32]).

In our applications, the physical system is usually made of three components: two electronic components, the cold magnetospheric electrons and the energetic injected electrons, and the magnetospheric ions which ensure the global electric neutrality.

The Vlasov equation conserves the main physical quantities: total number of particles n_p, total momentum P and total energy $\mathcal{E}$ expressed by the first moments:

$$\begin{aligned} n_p(t) &= \sum_\alpha \int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t)\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{p}, \\ \mathbf{P}(t) &= \sum_\alpha \int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} \mathbf{v} f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t)\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{p}, \\ \mathcal{E}(t) &= \sum_\alpha m_\alpha c^2 \int_{\Omega\times\mathbb{R}^3} (\gamma-1) f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t)\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{p} \\ &\quad + \epsilon_0 \int_\Omega \frac{|\mathbf{E}(\mathbf{x},t)|^2 + c^2|\mathbf{B}(\mathbf{x},t)|^2}{2}\,\mathrm{d}\mathbf{x}. \end{aligned} \tag{4}$$

It also preserves mathematical quantities such as the L^2-norms,

$$\|f_\alpha\|_{2,\Omega\times\mathbb{R}^3}(t) = \left(\int_{\Omega\times\mathbb{R}^d} \left| f_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{p},t)\right|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}\,\mathrm{d}\mathbf{p}\right)^{1/2}. \tag{5}$$

For numerical stability and accuracy concern, it is important to design numerical methods that respect these conservation properties at the discrete level.

Moreover, Vlasov solutions are known to acquire increasingly fine structure in the velocity space as time increases. For example, an expression of the nondissipative property is the well-known filamentation phenomenon in the phase space Grant–Feix [10], Cheng–Knorr [11]. According to Manfredi [12], small scale structures are mostly produced by the free streaming nature of the dynamics. In order to capture these fine structures, special care has to be given to the velocity discretization. This suggested us to design high order accurate methods. Moreover, in the three-dimensional space case, we have to face a time dependent 3Dx-3Dp problem. A usual Eulerian finite difference scheme would lead to a very high dimensional problem. Typically, for each time step we would consider $(100)^3\cdot(100)^3 = 10^{12}$ degrees of freedom which is still not achievable for today's computers. Whereas spectral methods are known to provide a high order of accuracy while using a small number of degrees of freedom. Moreover as the momentum space is unbounded, the restriction of the computation to a finite domain would introduce an artificial domain truncation with the need of controlling the truncation error (Funaro–Kavian [13]). Spectral methods can solve problems on unbounded domains in a natural way. We also focus on spectral Hermite-based methods for the momentum space discretization.

In the following, we will use the simpler nonrelativistic 1Dx1Dv Vlasov–Poisson system. It appears to be a necessary

first step to compare the methods and to check them on test cases. Two kinds of spectral methods will be analysed: the spectral Galerkin one (SGM) (Section 3) and the pseudospectral one (SCM) which is a high-order collocation approach (Section 4). In both cases, we will use the same high order finite differences scheme for the spatial discretization.

3. Hermite spectral Galerkin approach

3.1. Projection on generalized Hermite functions

Spectral methods are commonly used to solve partial differential equations (Boyd [14]). The core of these methods consists in expanding the equations on global functions set. In practice, the solution g is approximated by a finite sum that correspond to a truncation of a series

$$g(v) = \sum_{n=0}^{N} a_n \phi_n(v). \tag{6}$$

The problem is then to choose a well-suited class of basis functions ϕ_n and to determine the expansion coefficients a_n.

The optimal choice of basis is strongly problem-dependent. According to Tang in [6], Fourier basis (see for example Klimas–Farrell [15] or Elliasson [16]) are not a good choice because the periodicity of the basis functions does not permit the momentum conservation. Chebyshev bases preserve neither momentum nor total energy (Shoucri–Knorr [17]). Hermite functions, the product of Hermite polynomials and a Gaussian, seem to be a natural choice for Maxwellian-type velocity profiles (Funaro–Kavian [13]). Compared with other classical polynomials, they possess a fairly simple expression for their derivatives.

There are different kinds of Hermite approximations based on the choice of Hermite functions and weights. This choice depends on the asymptotic behavior of the solution.

Schumer and Holloway have discussed different choices of orthogonal Hermite basis functions depending on the form of their weight functions (Holloway [8], Schumer–Holloway [9]). If the basis are asymmetrically weighted (i.e. weight function $\not\equiv 1$), momentum, number of particles and total energy are preserved but not the L^2-norm. In the case of symmetrical weighted basis functions (weight function $\equiv 1$), momentum, particles number, total energy as well as L^2-norm are conserved and the numerical stability is shown to be better.

Tang has shown in [6] that it is required to introduce a velocity scaling factor to make the method accurate and stable. This scaling factor improves spectral accuracy and reduces the truncation error. Moreover, the use of a scaling factor offers a second advantage as the required memory and the computational cost of the method are greatly reduced.

Having in minds these different points, we have chosen the following basis of normalized scaled Hermite functions:

$$\tilde{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha v) e^{-\alpha^2 v^2}, \quad \alpha > 0 \tag{7}$$

where α is the scaling factor and H_n is the standard Hermite polynomial (see, for example, Szegö [29] or Dautray–Lions [18]). The weight associated with these functions is then $\omega(v) = e^{\alpha^2 v^2}$.

We recall the first few Hermite polynomials:

$$\begin{aligned}
&H_0(v) = 1,\\
&H_1(v) = 2v,\\
&H_2(v) = 4v^2 - 2,\\
&H_3(v) = 8v^3 - 12v,\\
&H_4(v) = 16v^4 - 48v^2 + 12,\\
&H_5(v) = 32v^5 - 160v^3 + 120v,\\
&H_6(v) = 64v^6 - 480v^4 + 720v^2 - 120.
\end{aligned} \tag{8}$$

Let us also introduce the space of functions

$$L^2_\omega(\mathbb{R}) = \left\{ u \text{ so that } u \text{ measurable and } \|u\|_{0,\omega} < \infty \right\}, \tag{9}$$

where the weighted L^2-norm $\|\cdot\|_{0,\omega}$ is defined by:

$$\|u\|_{0,\omega} = \left(\int_{\mathbb{R}} u^2(v)\omega(v)\,\mathrm{d}v \right)^{1/2}. \tag{10}$$

The Hermite basis functions $\tilde{H}_n \in L^2_\omega(\mathbb{R})$ satisfy the following recursion relations:

$$\alpha v \tilde{H}_n(v) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \tilde{H}_{n+1}(v) + \sqrt{\frac{n}{2}} \tilde{H}_{n-1}(v), \tag{11}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \tilde{H}_n(v) = -\alpha \sqrt{2(n+1)} \tilde{H}_{n+1}(v), \tag{12}$$

$$\begin{aligned}
v \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \tilde{H}_n(v) = &-\sqrt{(n+1)(n+2)} \tilde{H}_{n+2}(v)\\
&- (n+1)\tilde{H}_n(v).
\end{aligned} \tag{13}$$

The set of functions $\tilde{H}_n(v)$ is $L^2_\omega(\mathbb{R})$-orthonormal, meaning that

$$\int_{\mathbb{R}} \tilde{H}_m(v)\tilde{H}_n(v)\omega(v)\,\mathrm{d}v = \delta_{mn}, \tag{14}$$

where δ is the Kronecker symbol.

Moreover, the set of their derivatives belongs to $L^2_\omega(\mathbb{R})$ and forms an orthogonal family:

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \tilde{H}_n(v) \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v} \tilde{H}_m(v)\omega(v)\,\mathrm{d}v = 2\alpha(n+1)\delta_{mn}. \tag{15}$$

For all $u \in L^2_\omega(\mathbb{R})$, we can write

$$u(v) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n \tilde{H}_n(v) \tag{16}$$

with

$$u_n = \int_{\mathbb{R}} u(v)\tilde{H}_n(v)\omega(v)\,\mathrm{d}v, \quad n > 0 \tag{17}$$

as Hermite coefficients.

Spectral methods are known to provide high order accuracy while using a basis of small size. We detail now recent results

about the estimates of approximation error using a basis of Hermite functions (Guo [19,20]).

Let $\mathbb{P}_N$ be the set of all algebraic polynomials of degree at most N, where N is a positive integer. The $L^2_\omega(\mathbb{R})$-orthogonal projection $P_N : L^2_\omega(\mathbb{R}) \to \mathbb{P}_N$ verifies the following property

$$(u - P_N u, \phi)_\omega = 0, \quad \phi \in \mathbb{P}_N. \tag{18}$$

P_N is also the best approximation associated with the inner product in the space $H^m_\omega(\mathbb{R})$ (Guo [20]).

Guo [19,20] provides error estimates in usual Sobolev norms: for any $u \in H^r_\omega(\mathbb{R})$ and $0 \leqslant \mu \leqslant r$,

$$\|u - P_N u\|_{\mu,\omega} \leqslant C_1 N^{\frac{\mu - r}{2}} \|u\|_{r,\omega}, \tag{19}$$

and for any $u \in H^1_\omega(\mathbb{R})$ and $r \geqslant 1$,

$$\left\| (u - P_N u) e^{-v^2/2} \right\|_{L^\infty} \leqslant C_2 N^{\frac{1}{4} - \frac{r}{2}} \|u\|_{1,\omega}, \tag{20}$$

where C_1 and C_2 are positive constants.

3.2. Application to the 1D Vlasov–Poisson system

In a plasma without magnetic field, the system (1) becomes the Vlasov–Poisson system. As already mentioned above, this system is now the reference framework of the paper. Moreover we consider just one species of moving particles, the electrons. The ions forms a neutralizing background with a constant density in time and space.

The dimensionless Vlasov–Poisson system in one space dimension (1Dx-1Dv) reads:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x,v,t) + v \frac{\partial}{\partial x} f(x,v,t) + E(x,t) \frac{\partial}{\partial v} f(x,v,t) = 0, \tag{21}$$

$$E(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} \phi(x,t), \tag{22}$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) = \rho(x,t) - 1, \tag{23}$$

where $\rho(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,v,t)\,\mathrm{d}v$, $(x,v) \in I \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ and $t \geqslant 0$.

We consider a periodic plasma of period L, so we have $I = [0, L]$ and functions E, ϕ and f satisfy periodic boundary conditions:

$$f(0,v,t) = f(L,v,t), \quad v \in \mathbb{R},\ t \geqslant 0, \tag{24}$$

$$E(0,t) = E(L,t), \quad t \geqslant 0, \tag{25}$$

$$\phi(0,t) = \phi(L,t) = 0, \quad t \geqslant 0. \tag{26}$$

With a regular initial condition

$$f(x,v,0) = f^0(x,v), \tag{27}$$

the problem (21)–(27) is well-posed (Wollman–Ozizmir [21]).

In the following, we will use dimensionless quantities. The unit of time is the reciprocal of the plasma pulsation ω_p^{-1} and the unit of length, the Debye length λ_d. Velocities are expressed in unit of thermal velocity v_{th}.

First of all, we expand the distribution function on the Hermite basis,

$$f(x,v,t) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(x,t) \tilde{H}_n(v). \tag{28}$$

Inserting (28) into the Vlasov system and using the recursion formulae (11)–(13), we obtain:

$$\partial_t f = \sum_{n=0}^{\infty} \partial_t f_n \tilde{H}_n(v), \tag{29}$$

$$v \partial_x f = \frac{1}{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \partial_x f_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \partial_x f_{n+1} \right] \tilde{H}_n(v), \tag{30}$$

$$E(x,t) \partial_v f = -\alpha \sum_{n=0}^{\infty} E(x,t) f_{n-1} \sqrt{2n} \tilde{H}_n(v). \tag{31}$$

At the Nth-spectral order of approximation, the problem can be recast in a finite system of hyperbolic equations:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f_0(x,t) + \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} f_1(x,t) = 0, \\ \quad \vdots \\ \frac{\partial}{\partial t} f_n(x,t) + \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n}{2}} \frac{\partial}{\partial x} f_{n-1}(x,t) + \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{n+1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} f_{n+1}(x,t) \\ \quad - \alpha \sqrt{2n} E(x,t) f_{n-1}(x,t) = 0, \quad n = 1, \ldots, N-1, \\ \quad \vdots \\ \frac{\partial}{\partial t} f_N(x,t) + \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{N}{2}} \frac{\partial}{\partial x} f_{N-1}(x,t) \\ \quad - \alpha \sqrt{2N} E(x,t) f_{N-1}(x,t) = 0. \end{cases} \tag{32}$$

In the exact system there is an infinite number of Hermite coefficients. In order to close the set of coupled equations, we have set to zero the coefficients for n greater than N. Let us introduce the following notations:

$$F = F(x,t) = \begin{pmatrix} f_0(x,t) \\ \vdots \\ f_N(x,t) \end{pmatrix},$$

$$R = \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & & & (0) \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \sqrt{\frac{N+1}{2}} \\ (0) & & & \sqrt{\frac{N+1}{2}} & 0 \end{pmatrix} \tag{33}$$

and

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & (0) \\ \sqrt{2 \times 2} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ (0) & & \sqrt{2(N+1)} & 0 \end{pmatrix}. \tag{34}$$

The discrete system to solve is then written in a vector form:

$$\partial_t F + R \partial_x F - \alpha E(x,t) L F = 0. \tag{35}$$

The coupling with the Poisson problem is expressed by the dependency of the electric field E with respect to F. It is easy to see that the zeroth order moment of f is proportional to f_0 so

that

$$\rho(x,t) = \int_{\mathbb{R}} f(x,v,t)\,\mathrm{d}v = \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}} f_0(x,t). \tag{36}$$

Now, we focus on the discretization in both time and space of this system.

3.3. Time and space discretization

3.3.1. Semi-discretization in time

We define a fixed time step Δt and a sequence of discrete times $(t^j = j\Delta t)_{j\in\mathbb{N}}$ with $t^0 = 0$. From a given initial data $F^0 = F^0(x) = (f_n^0(x))_{n=0,\dots,N}$, we use a fractional step time splitting scheme to solve Eq. (35). This scheme is based on the operator splitting process

$$\mathcal{T}(t)F = 0 \tag{37}$$

and

$$\mathcal{E}_F(t)F = 0, \tag{38}$$

where $\mathcal{T}(t)$ and $\mathcal{E}_F(t)$ are defined respectively as

$$\mathcal{T}(t) = \frac{\partial}{\partial t} + R\frac{\partial}{\partial x} \tag{39}$$

and

$$\mathcal{E}_F(t) = \frac{\partial}{\partial t} - \alpha E(x,t) L. \tag{40}$$

The operator $\mathcal{T}(t)$ is associated to the transport process whereas $\mathcal{E}_F(t)$ is a spectral exchange operator. Strang [22] showed how to achieve second order accuracy for smooth solutions by using the symmetrized alternative approximation

$$\begin{aligned} F(\Delta t) &\approx F^{\Delta}(\Delta t) \\ &= \mathcal{E}_F(\Delta t/2)\mathcal{T}(\Delta t)\mathcal{E}_F(\Delta t/2)F^0. \end{aligned} \tag{41}$$

This formula is still not completely explicit because of the dependency of operator $\mathcal{E}$ with respect to F. One possibility is to freeze F inside the operator $\mathcal{E}$.

For a given vector function $G(x) = (g_0(x), \dots, g_N(x))^{\mathrm{T}}$, we define a function $\bar{E}_G(x)$ such that

$$\bar{E}_G(x) = -\phi'(x), \tag{42}$$

with ϕ solution of the stationary Poisson problem:

$$\begin{cases} -\phi''(x) = \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}} g_0(x) - 1, \\ \phi(0) = \phi(L) = 0, \\ \phi'(0) = \phi'(L). \end{cases} \tag{43}$$

We then define

$$\bar{\mathcal{E}}_G(t) = \frac{\partial}{\partial t} - \alpha \bar{E}_G(x) L. \tag{44}$$

By denoting

$$F^1 = \mathcal{T}(\Delta t)\bar{\mathcal{E}}_F(\Delta t/2)F^0, \tag{45}$$

the fractional step method becomes

$$F^{\Delta}(\Delta t) = \bar{\mathcal{E}}_{F^1}(\Delta t/2)\mathcal{T}(\Delta t)\bar{\mathcal{E}}_{F^0}(\Delta t/2)F^0. \tag{46}$$

The solutions of each step are known and can be given in closed form.

The transport problem

$$\begin{cases} \mathcal{T}(t)F = 0, \quad t > 0, \\ F(0) = F^0 \end{cases} \tag{47}$$

is well-posed because the matrix R is symmetric and thus $\mathbb{R}$-diagonalizable, so the system is hyperbolic. Using the diagonal expression of R,

$$R = UDU^{-1},$$
$$\text{where } D = \begin{pmatrix} \gamma_0 & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & \gamma_N \end{pmatrix},$$
$$\text{with } \gamma_0 \leqslant \cdots \leqslant \gamma_N,$$

the system can also be written in diagonal form

$$\partial_t \tilde{F} + D\partial_x \tilde{F} = 0, \tag{48}$$

with $\tilde{F} = U^{-1}F$. Then the solution of (47) is

$$\begin{aligned} &F(x,t) = U\big[(U^{-1}F^0)_k(x-\gamma_k t)\big]_k, \\ &\quad k = 0,\dots,N, t > 0. \end{aligned} \tag{49}$$

At a given x, the problem

$$\begin{cases} \bar{\mathcal{E}}_F(t)F(x) = 0, \quad t > 0, \\ F(x,0) = F^0(x) \end{cases} \tag{50}$$

is also well-posed. Its maximal solution is given by

$$F(x,t) = \exp\big[\alpha E^0(x) L t\big] F^0(x). \tag{51}$$

Because the matrix L is nilpotent, it is easy to compute the exponential matrix in (51).

3.3.2. Full discretization in both space and time

For the sake of simplicity, we consider a uniform grid $(x_i)_{i\in\mathbb{Z}}$ of constant space step h, for which $x_i = ih$. From each computational point x_i we associate a computational cell $I_i =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$ with $x_{i+\frac{1}{2}} = (i+\frac{1}{2})h$. From the initial data $F^0 \in L^1(\mathbb{R})$, we build a sequence $(F_i^0)_i$ such that

$$F_i^0 = \int_{I_i} F^0(x)\,\mathrm{d}x. \tag{52}$$

Transport step (47). From the known sequences $(F_i^j)_{i\in\mathbb{Z}, j\in\mathbb{N}}$ at time t^j, we want to compute the vector of spectral coefficients (F_i^{j+1}) at time $t^{j+1} = t^j + \Delta t$. The field $F^j(x)$ is reconstructed at time t^j and then transported according to (49). We use a piecewise polynomial third order accurate reconstruction following the ideas presented by Mangeney et al. in [23]. It uses a projection on some finite-dimensional space of discontinuous piecewise polynomials functions of type

$$\phi_{il}(x) = \chi_i(x) P_l\left(\frac{x - x_i}{h}\right), \quad x \in I_i \tag{53}$$

where P_l are Legendre polynomials and χ_i are characteristic functions on the interval I_i. Then, we use the transport solution (49) on the time interval Δt applied to the reconstructed field $F^j(x)$. This explicit scheme requires the well-known Courant–Friedrichs–Lewy condition for stability (CFL condition):

$$\max_{k=0,\dots,N} |\gamma_k| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1. \tag{54}$$

Spectral exchange step (50). It simply consists in integrating the full discrete version of the differential system written on each point x_i.

4. Hermite pseudospectral approach

Pseudospectral collocation methods are known to be high order accurate while using a small number of collocation points (Orszag [28], Fornberg [25], Bernardi and Maday [26], Canuto et al. [27]). We consider here normalized scaled Hermite functions

$$\bar{H}_n(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} H_n(\alpha v) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}. \tag{55}$$

These functions have already been used for example by Schumer and Holloway [9] for Vlasov-type equations. The authors have proved that numerical methods based on these basis functions can have interesting features like the conservation of the square of the distribution function. Tang [24] has proposed pseudospectral collocation formulae with the presence of a scaling factor α. We recall the formulae and also provide scaled Gauss–Hermite-type quadrature.

4.1. Collocation method: numerical quadrature and interpolation process

Given a scaling factor $\alpha > 0$, the normalized scaled Hermite polynomials $\mathcal{H}_k$:

$$\mathcal{H}_k(v) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^k k!}} H_k(\alpha v) \tag{56}$$

define an orthonormal basis with respect to the weight function $\omega(v) = e^{-\alpha^2 v^2}$. Denoting the weighted scalar product

$$(f, g)_\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) g(v) \omega(v)\, \mathrm{d}v, \quad f, g \in L^2_\omega(\mathbb{R}), \tag{57}$$

we have

$$(\mathcal{H}_k, \mathcal{H}_l)_{e^{-\alpha^2 v^2}} = \delta_{kl}. \tag{58}$$

Gauss–Hermite quadrature. By choosing integration points ξ_k, $k = 0, \dots, N$, as the zeros of the $(N+1)$th Hermite polynomial $H_{N+1}(v)$, it is well known that exists a unique set of weights ω_k such that the quadrature formula

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(v) e^{-\alpha^2 v^2}\, \mathrm{d}v \approx \sum_{k=0}^{N} \omega_k f\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right) \tag{59}$$

is exact for polynomials up to degree $(2N+1)$ (see Canuto et al. [27] for example). By defining $L_j(v) \in \mathbb{P}^{N+1}$ the Lagrange polynomial of degree $(N+1)$ such that

$$L_j(\xi_k) = \delta_{jk}, \quad k = 0, \dots, N, \tag{60}$$

considering $f(v) = L_j(\alpha v)$, it is easy to see that

$$\omega_j = \frac{1}{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} L_j(v) e^{-v^2}\, \mathrm{d}v. \tag{61}$$

We propose below a computable expression for ω_j:

Lemma 1. *The integration weights ω_j are equal to*

$$\omega_j = \frac{1}{\sum_{k=0}^{N} [\mathcal{H}_k(\frac{\xi_j}{\alpha})]^2}. \tag{62}$$

Proof. The decomposition of $L_j(\alpha v)$ in the orthonormal basis $\mathcal{H}_k(v)$ gives

$$L_j(\alpha v) = \sum_{k=0}^{N} \big(L_j(\alpha \cdot), \mathcal{H}_k\big)_{e^{-\alpha^2 v^2}} \mathcal{H}_k(v). \tag{63}$$

Because $L_j(\alpha v)\mathcal{H}_k(v) \in \mathbb{P}^{2N+1}$, we can use the quadrature formula (59) to write

$$\begin{aligned} L_j(\alpha v) &= \sum_{k=0}^{N} \sum_{l=0}^{N} L_j(\xi_l) \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \omega_l \mathcal{H}_k(v) \\ &= \sum_{k=0}^{N} \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \omega_j \mathcal{H}_k(v). \end{aligned} \tag{64}$$

By choosing $v = \frac{\xi_l}{\alpha}$, $l = 0, \dots, N$, we see that

$$\sum_{k=0}^{N} \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) \omega_j = \delta_{jl} \tag{65}$$

and in particular

$$\sum_{k=0}^{N} \left[\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\right]^2 \omega_j = 1. \tag{66}$$

Interpolation process with scaling factor. Now we take advantage of the quadrature formula to build a high order interpolation function $\mathcal{I}^N f$ from $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R})$. We use the points $\{\frac{\xi_k}{\alpha}\}_{k=0,\dots,N}$ as collocation points and the following scaled Hermite functions $\bar{H}_k$ as interpolation basis functions:

$$\bar{H}_k(v) = \mathcal{H}_k(v) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}. \tag{67}$$

Remark that $(\bar{H}_k, \bar{H}_l) = \delta_{kl}$. From $f \in L^2_{e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}}(\mathbb{R})$, we define its orthogonal projection $\Pi^N f$ on the vector space spanned by the $\bar{H}_k$ as

$$\Pi^N f(v) = \sum_{k=0}^{N} (f, \bar{H}_k) \bar{H}_k(v). \tag{68}$$

Now, for $f \in span(\bar{H}_k)_{k=0,N}$, we have

$$\Pi^N f(v) = f(v) = \sum_{k=0}^{N} \left(f(v)e^{\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}, \mathcal{H}_k(v)\right)_{e^{-\alpha^2 v^2}} \bar{H}_k(v). \tag{69}$$

Because of the exactness of the quadrature formula (59) and the fact that $f(v)e^{\frac{1}{2}\alpha^2 v^2}\mathcal{H}_k(v) \in \mathbb{P}^{2N+1}$, we also have

$$f(v) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N} \omega_l e^{\frac{1}{2}\xi_l^2} f\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right)\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right)\bar{H}_k(v). \tag{70}$$

This leads us to define a linear interpolation operator

$$\mathcal{I}^N : \mathcal{C}^0(\mathbb{R}) \to span(\bar{H}_k)_{k=0,N}$$

defined by

$$\mathcal{I}^N f(v) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{l=0}^{N} \omega_l f\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right) e^{\frac{1}{2}\xi_l^2}\mathcal{H}_k\left(\frac{\xi_l}{\alpha}\right)\bar{H}_k(v) \tag{71}$$

or again, with Tang's notations [24],

$$\mathcal{I}^N f(v) = \sum_{k=0}^{N} a_k \bar{H}_k(v) \tag{72}$$

with

$$a_k = \sum_{j=0}^{N} \frac{1}{C_j} f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \tag{73}$$

and

$$C_j = \frac{e^{-\xi_j{}^2}}{\omega_j} = \sum_{k=0}^{N}\left[\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\right]^2. \tag{74}$$

Remark 1. From (59), considering $g(v) = f(v)e^{-\alpha^2 v^2}$, one can derive another quadrature formula:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(v)\,dv \approx \sum_{k=0}^{N} \frac{1}{C_k} g\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right). \tag{75}$$

Guo and Xu [20] studied the properties of Gauss–Hermite interpolations. For the interpolation operator $\mathcal{I}^N$ at the Hermite–Gauss nodes in $\mathbb{R}$, considering $\alpha = 1$, they proved the estimate: for any $f \in H^m_\omega(\mathbb{R})$ (the weighted Sobolev space of order m), there exists a constant C such that

$$\left\| f - \mathcal{I}^N f \right\|_{H^k_\omega(\mathbb{R})} \leqslant C N^{\frac{1}{3}+k-\frac{m}{2}} \| f \|_{H^m_\omega(\mathbb{R})}, \tag{76}$$

for $m \geqslant 1$ and $0 \leqslant k \leqslant m$.

4.2. Application to the 1D Vlasov–Poisson system

This section is devoted to the application of the SCM for the velocity discretization of the one-dimensional Vlasov–Poisson system (21)–(23) with the boundary conditions (24)–(26) and the initial condition (27).

The pseudospectral representation f^N for the plasma distribution function f is written as

$$f(x,v,t) \approx f^N(x,v,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(x,t)\bar{H}_k(v), \tag{77}$$

where $a_k(x,t) = \sum_{j=0}^{N} f^N(x, \frac{\xi_j}{\alpha}, t)\bar{H}_k(\frac{\xi_j}{\alpha})\frac{1}{C_j}$.

The pseudospectral approximation of the Vlasov equation gives,

$$\partial_t f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + \frac{\xi_n}{\alpha}\partial_x f^N\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) + E(x,t)\left(\partial_v^N f\right)(x,v,t)|_{v=\frac{\xi_n}{\alpha}} = 0, \quad n = 0,\ldots,N \tag{78}$$

where $\partial_v^N f$ is the derivative of the interpolation function f^N with respect to v:

$$\partial_v f^N(x,v,t) = \sum_{k=0}^{N} a_k(x,t)\bar{H}_k'(v), \tag{79}$$

which yields for all $n = 0,\ldots,N$

$$\partial_v^N f\left(x, \frac{\xi_n}{\alpha}, t\right) = \sum_{k=0}^{N}\sum_{j=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_j}{\alpha}, t\right)\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\frac{1}{C_j}\bar{H}_k'\left(\frac{\xi_n}{\alpha}\right). \tag{80}$$

In matrix form, the problem can be written as follows,

$$\partial_t F + diag(\xi_n/\alpha)\partial_x F + E(x,t)DF = 0, \tag{81}$$

where the unknown vector is now

$$F = \begin{pmatrix} f^N(x,\xi_0/\alpha,t) \\ \vdots \\ f^N(x,\xi_N/\alpha,t) \end{pmatrix} \tag{82}$$

and the elements of the differentiation matrix are:

$$\begin{aligned} d_{ij} &= \sum_{k=0}^{N} \frac{1}{C_j}\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\bar{H}_k'\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) \\ &= \frac{\alpha}{C_j}\sum_{k=1}^{N-1}\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\left[\sqrt{\frac{k}{2}}\bar{H}_{k-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) - \sqrt{\frac{k+1}{2}}\bar{H}_{k+1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right)\right] \\ &\quad - \sqrt{\frac{1}{2}}\bar{H}_0\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\bar{H}_1\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) + \sqrt{\frac{N}{2}}\bar{H}_N\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right)\bar{H}_{N-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right). \end{aligned} \tag{83}$$

Since this matrix is time independent, it can be calculated only once a run. The matrix in the convection term is time independent too and diagonal.

To compute the density charge ρ, we use the quadrature formula (75) described above:

$$\rho(x,t) = \int_{\mathbb{R}} f\,dv \approx \sum_{k=0}^{N} f^N\left(x, \frac{\xi_k}{\alpha}, t\right)\frac{1}{C_k}. \tag{84}$$

4.3. Space and time discretization

For the space discretization, we will again use the third order discontinuous Galerkin method proposed by Mangeney et al. [23], already discussed in Section 2.2.2.

Concerning time discretization, it seems interesting to arrange both advection and spectral exchange operators in a rather different way. Because the discrete advection operator is diagonal in the pseudospectral case, the choice

$$F^{\Delta}(\Delta t) = \bar{\mathcal{T}}(\Delta t/2)\mathcal{E}_{F^2}(\Delta t)\bar{\mathcal{T}}(\Delta t/2)F^0 \tag{85}$$

with

$$F^2 = \bar{\mathcal{T}}(\Delta t/2)F^0 \tag{86}$$

requires less operations than the other Strang splitting choice (46).

The CFL condition for stability reads:

$$\max_{k=0,\dots,N} |\xi_k| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leqslant 1. \tag{87}$$

5. Numerical experiments on accuracy and scaling factor

We want to determine the region of the optimal scaling factor α_{opt} and assess the sensitivity of both methods with respect to this parameter. Two cases of Gaussian-type functions are studied: a centered Gaussian (88) and a two-stream type function (89),

$$f_1(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}}, \tag{88}$$

$$f_2(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v^2 e^{-\frac{v^2}{2}}. \tag{89}$$

These functions will be largely used as initial data for the numerical tests presented hereafter in the paper.

For both SGM and SCM, we fix the number of Hermite polynomials to $N = 20$ firstly and after to $N = 80$. Then, we calculate the spectral projection error e_P for the SGM, the interpolation error e_I and the quadrature error e_Q for the SCM. The scaling factor α is varied from 0.1 to 1.2 for the SGM and from $\xi_N/20$ to ξ_N for the SCM using a 0.01 sample step:

$$e_P = \log_{10}\left(\|P_N f - f\|_\infty\right), \tag{90}$$

$$e_I = \log_{10}\left(\|\mathcal{I} f - f\|_\infty\right), \tag{91}$$

$$e_Q = \log_{10}\left(\left|\sum_k \frac{1}{C_k} f\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right) - \int_{\mathbb{R}} f(v)\,dv\right|\right). \tag{92}$$

Moreover we illustrate error curves in the case $N = 20$ with approximate functions (solid lines) for three different values of α: $\alpha < \alpha_{opt}$, $\alpha = \alpha_{opt}$ and $\alpha > \alpha_{opt}$ and with the exact function (dashed lines).

The results are shown in Fig. 1 for the SGM and in Fig. 2 for the SCM.

5.1. Spectral Galerkin method (SGM)

Functions f_1 and f_2 are interesting because for these functions there exists an optimal choice of α, $\alpha_{opt} = 1/\sqrt{2}$, where Galerkin approximate is exact if $N \geqslant 3$:

$$f_1(v) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \tilde{H}_0(v), \tag{93}$$

$$f_2(v) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \tilde{H}_0(v) + \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \tilde{H}_2(v). \tag{94}$$

Error behavior (Figs. 1(a), (b), (f), (g)). These figures show that the α dependence of the spectral projection error is quite drastic. The curves also display a region of high accuracy for α centered around α_{opt}. This region is larger when the number N of Hermite polynomials is increased.

Approximate functions behavior (Figs. 1(c), (d), (e), (h), (i), (j)). With $\alpha = \alpha_{opt}$ (Figs. 1(d) and (i)), as expected, approximate solutions perfectly fit with the exact ones. In the case $\alpha < \alpha_{opt}$ (Figs. 1(c) and (h)), oscillations appear and function positivity is not conserved. For $\alpha > \alpha_{opt}$ (Figs. 1(e) and (j)), the curves shape is somewhat reproduced while displaying small oscillations.

5.2. Spectral collocation method (SCM)

Unlike the SGM case, there is no theoretical optimal value for α. A few paper have discussed good choices of scaling factor. For example, Tang in [24] proposes to consider:

$$\alpha = \max_{i=0,\dots,N} \xi_i = \frac{\xi_N}{K}, \quad K > 0. \tag{95}$$

The choice of K is discussed below.

Error behavior (Figs. 2(a), (b), (f), (g)). As seen before, interpolation (solid lines) and quadrature (dashed lines) errors are strongly α dependent. Still there exists a region of high accuracy which remains narrow even for large N values. So we have to correctly calibrate the scaling factor for efficient computations.

Our numerical experiments show that the optimal choice of K depends itself on N. For $N = 20$, a good K is about 6 whereas for $N = 80$, it is about 10. In general, $K = 6$ seems to be a good value (the error is about 10^{-10}) which we chose for simulations.

Approximate functions behavior (Figs. 2(c), (d), (e), (h), (i), (j)). Comments are quite the same as SGM's ones. For $K = 6$ (Figs. 2(d) and (i)), the interpolation process gives excellent results. For greater K (Figs. 2(c) and (h)) an oscillation behavior appears with loss of positivity. This can be interpreted as Gibbs phenomenon. For smaller K (Figs. 2(e) and (j)), the distribution shape is nearly reproduced. These results are due to the fact that the set of collocation points, which depends on α, does not recover very well the function support so that some information is lost.

General comments. For both methods we have also determined the optimal choice for the scaling factor $\alpha_{opt-\mathrm{SGM}} =$

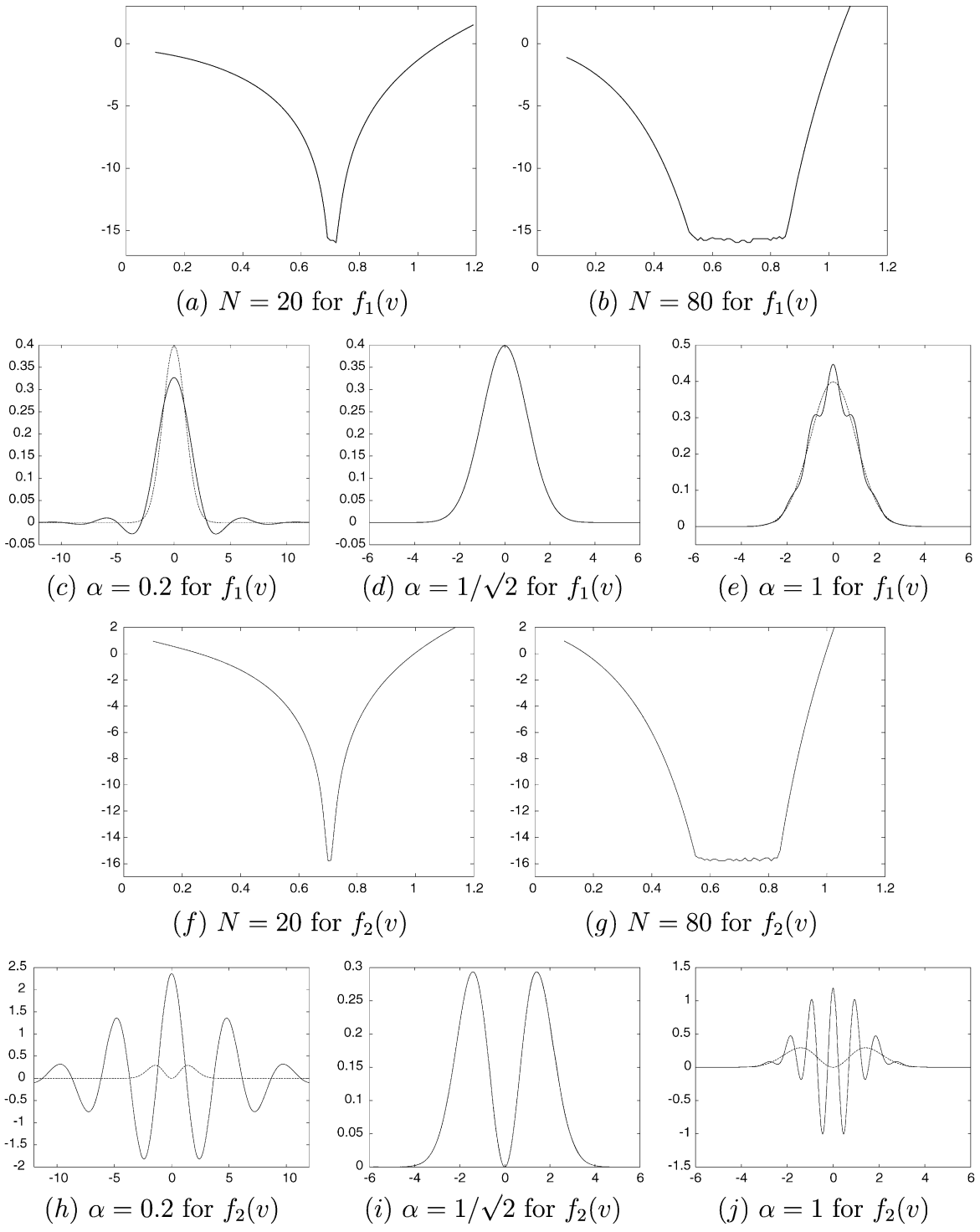


Fig. 1. SGM's approximations and numerical error estimates varying α.

$1/\sqrt{2}$ and $\alpha_{opt-\mathrm{SCM}} = \xi_N/6$. Using a convenient scaling factor is worthwhile since it can reduce the numerical complexity at fixed accuracy requirement. This is a way to decrease the simulation cost.

6. Numerical tests

In this section, we compare the performance of both SGM and SCM presented above. Short time and long time classical numerical tests from plasma physics are performed: the linear and the strong Landau damping and the two-stream instability.

6.1. Linear Landau damping

To begin with, we compare the results given by the two spectral methods for the linear Landau damping. This test consists of introducing a small perturbation in a uniform Maxwellian

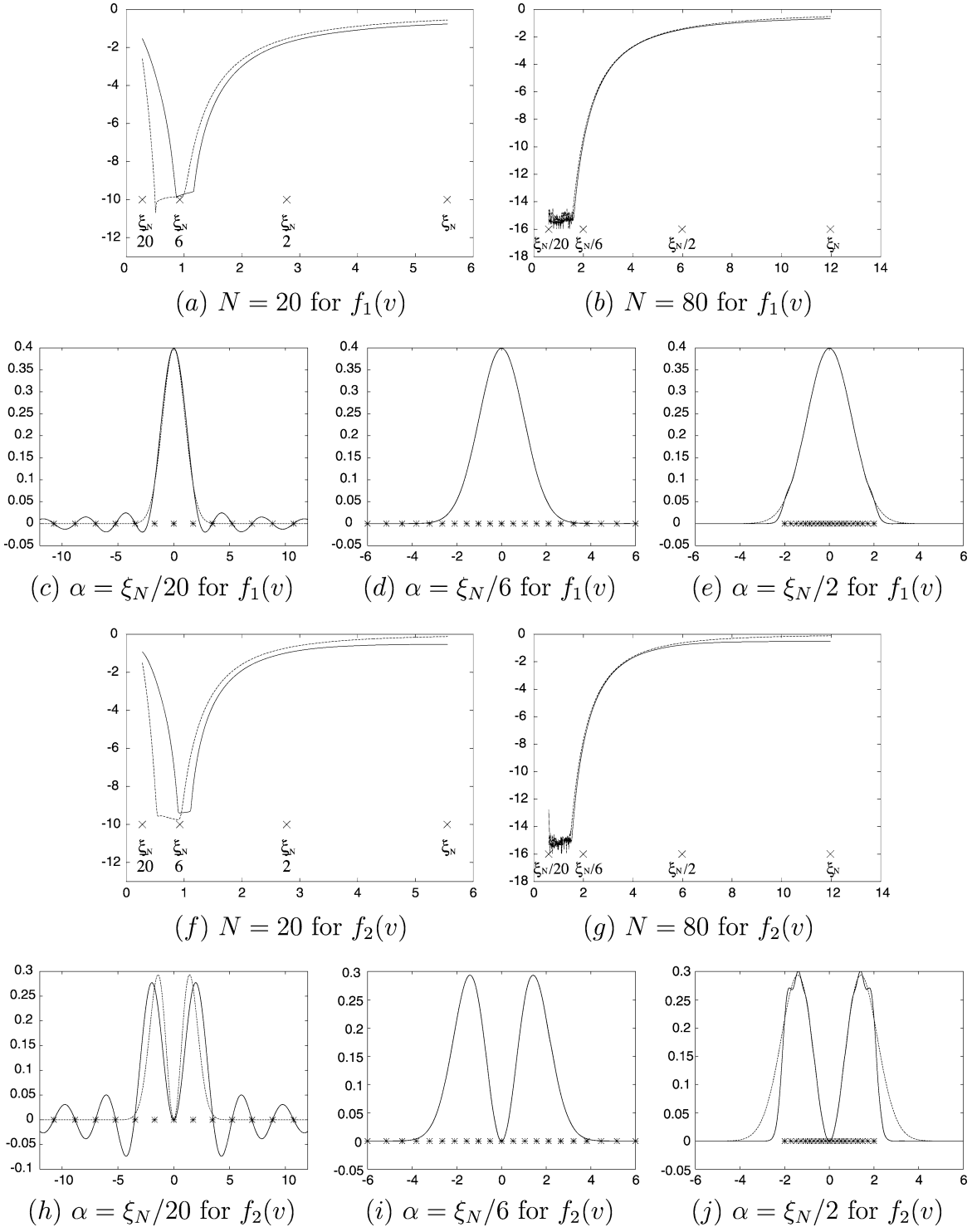


Fig. 2. SCM's approximations and numerical error estimates varying α.

plasma. The initial electron distribution function is then given by:

$$f(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}} \big(1 + a\cos(kx)\big). \tag{96}$$

The amplitude a of the perturbation is 0.01 and the length L_x of the spatial computational domain is equal to 4π. With these data we perform simulations for two values of the wave number k, different numbers of cells I in the x-direction and also different N values. For the time step Δt, we use the courant number 0.25. (The CFL conditions are respectively (54) and (87) for the SGM and the SCM). We choose the optimal scaling factor for a centered Gaussian $\alpha = 1/\sqrt{2}$ for the SGM and $\alpha = \xi_N/6$ for the SCM as determined in Section 5.

The main numerical results are presented in Fig. 3. Figs. 3(a) and 3(b) show the time evolution, in logarithm scale, of the am-

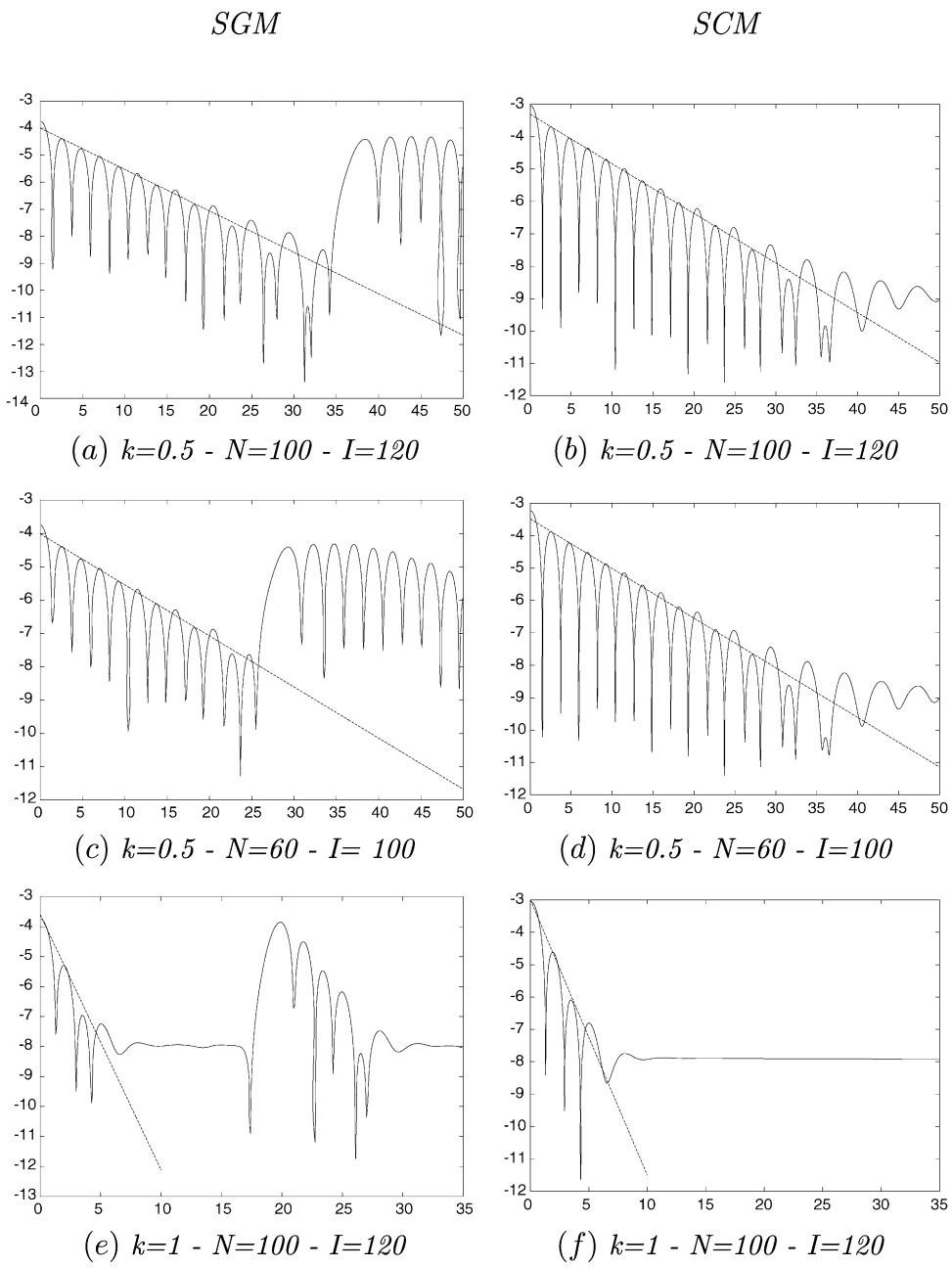


Fig. 3. Evolution in time of $|E_k(0.5,t)|$ for the linear Landau damping with the SGM and the SCM. Parameters are $a = 0.01$, $\alpha = 1/\sqrt{2}$ (SGM), $\alpha = \xi_N/6$ (SCM) and $L_x = 4\pi$.

plitude of the electric field's basic Fourier component $E_k(0.5,t)$ obtained from the two methods for $k = 0.5$, $I = 120$ and $N = 100$. In both cases the amplitude begins to decay exponentially in time, in agreement with the theory of Landau damping. The damping rate γ and the oscillation frequency ω_r obtained by fitting a straight line across the maxima of $\log(|E_k(0.5,t)|)$ until about $T_R/2$, where T_R is the recurrence time (97), are respectively for the SGM and the SCM:

$(\gamma = -0.1522, \omega_r = 1.4081)$ and

$(\gamma = -0.147, \omega_r = 1.406)$.

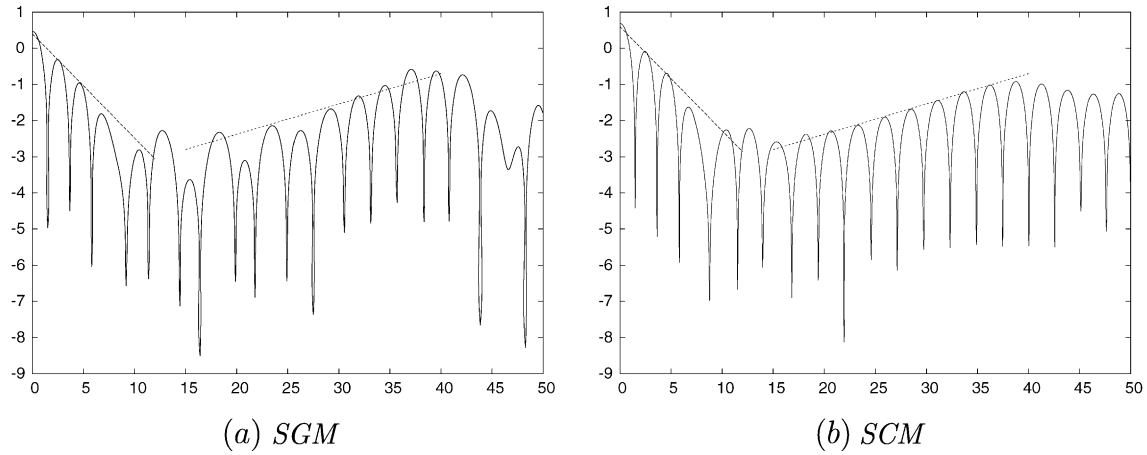
These figures are in reasonable agreement with the theoretical values deduced from the direct resolution of the dispersion relation:

$$\gamma^{\text{th}} = -0.1533 \quad \text{and} \quad \omega_r^{\text{th}} = 1.4156.$$

Since the electric field has a weak initial amplitude and is damped as time increases, one may expect the so-called recurrence effect to occur. In fact, this effect appears at around $t = 45$; this time is in a good agreement with the free-streaming recurrence time formula given by Holloway [9]:

$$T_R = \frac{\alpha\pi\sqrt{N}}{k}. \tag{97}$$

In order to estimate the effect on the result accuracy of both the number of Hermite polynomials and the space step, we



(a) SGM (b) SCM

Fig. 4. Evolution in time of the first Fourier mode of the electric field for the strong Landau damping with the SGM and the SCM. Parameters are: $a = 0.5$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = 1/\sqrt{2}$ (SGM), $\alpha = \xi_N/6$ (SCM), $N = 150$ and $I = 100$.

have performed simulations still with $k = 0.5$ but with lower N and I (i.e $N = 60$ and $I = 100$). The corresponding results are shown in Figs. 3(c) and 3(d). Compared with the previous simulations, the beginning of the time evolution of $E_k(0.5, t)$ remains qualitatively unchanged. The damping rate and the oscillation frequency are now respectively for the SGM and the SCM:

$(\gamma = -0.1507, \omega_r = 1.4057)$ and

$(\gamma = -0.1455, \omega_r = 1.406)$.

The recurrence effect appears earlier in the simulations as expected from the formula of Holloway.

Figs. 3(e) and 3(f) show the time evolution of the amplitude of the electric field's component $E_k(0.5, t)$ calculated now for $k = 1$, $N = 100$ and $I = 120$. The Landau damping is again clearly computed and the obtained numerical values for γ and ω_r are respectively for the SGM and the SCM:

$(\gamma = -0.9721, \omega_r = 2.0312)$ and

$(\gamma = -0.944, \omega_r = 2.016)$.

The agreement with the theoretical values for $k = 1$, $\gamma^{\text{th}} = -0.8513$ and $\omega_r^{\text{th}} = 2.04$, is still satisfactory. The recurrence effect takes place at $t = 23$, which is also close to the time predicted by Holloway for the free-streaming case (97).

6.2. Strong Landau damping

In this case, the initial distribution is still given by (96) but the amplitude of the perturbation is increased to $a = 0.5$. For these simulations, we keep $k = 0.5$ and take $L_x = 4\pi$, $N = 80$ and $\alpha = 1/\sqrt{2}$ for the SGM and $\alpha = \xi_N/6$ for the SCM. We have increased the number of points in space ($I = 100$) in order to have sufficient accuracy to approximate the first Fourier mode of the electric field.

The linear Landau damping theory cannot longer be applied to this problem because this theory is valid for short times $t < 1/\sqrt{a}$. For longer times, nonlinear effects dominate.

Fig. 4 shows the amplitude in time of $|E_1|$ the first Fourier modes of E in logarithm scale. The damping of this fundamental mode is more important than predicted by the linear theory ($\gamma = -0.288$). At around $t = 15$, $|E_1|$ grows up exponentially with $\gamma = 0.084$ until saturation occurs at $t \approx 40$. Comparing the results obtained with both methods shows that the SCM gives a more regular increase than the SGM. In Fig. 5 are plotted, at different times, the half spatially integrated distribution function obtained with the SCM. As predicted by the quasilinear theory, at $t = 10$ a plateau centered around $v = 2.8$, which corresponds to the phase velocity of the wave ($v_\phi = \omega_r/k$), appears. At time $t = 15$, a small bump appears and causes the growth of the mode. Moreover, wrinkles centered around v_ϕ appear on the body of the distribution function. They correspond to the filamentation phenomenon and we can also observe its progress in time. In Fig. 6 are given the contour plots of the distribution function in phase space obtained with the SCM. From $t = 25$ to $t = 40$, a vortex centered to the phase velocity appears.

These results are consistent with those reported by Nakamura–Yabe [30] and Filbet–Sonnendrücker [31].

6.3. Two-stream instability

We consider now a symmetric two-stream instability resulting from the initial condition defined by the distribution

$$f(x, v, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v^2 e^{-v^2/2} \big(1 + a\cos(kx)\big), \tag{98}$$

with $a = 0.01$ and $k = 0.5$. The simulations are performed with $N = 80$, $I = 80$ and $\alpha = 1/\sqrt{2}$ (SGM) and $\alpha = \xi_N/6$ (SCM).

Fig. 7 shows the time histories of the first three modes of the electric field and that of the total electric energy for the SCM and the SGM. After an initial short-lived transient regime, the first mode calculated by the SCM (Fig. 7(a)) grows exponentially with a growth rate $\gamma \approx 0.2$, in relative good agreement with the theoretical value $\gamma^{\text{th}} = 0.25$ (Grant–Feix [10]). The amplitude of the mode saturates at $t \approx 25$ and then undergoes oscillations due to the trapping of particles in the potential well

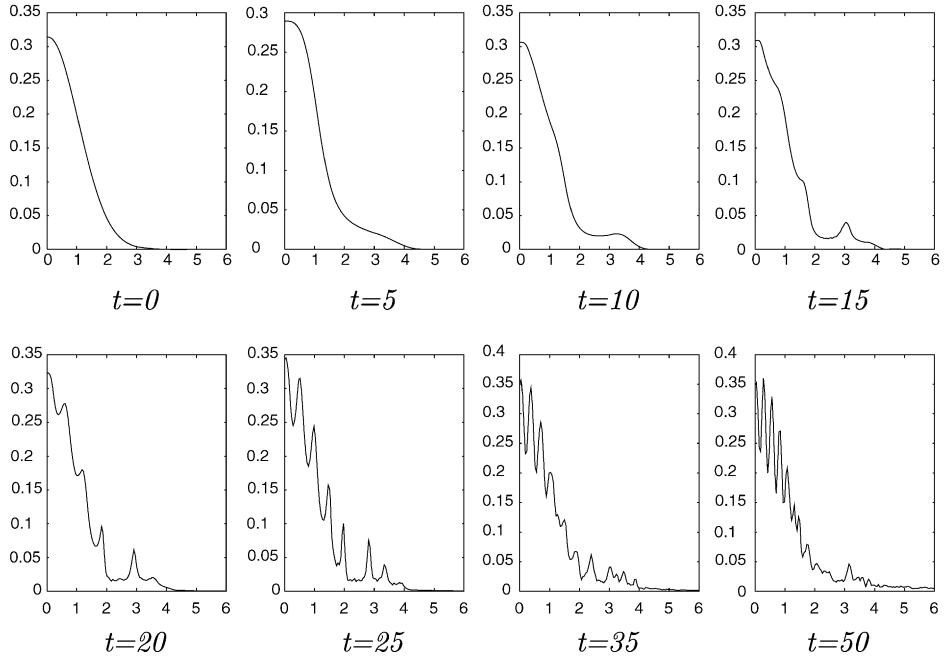


Fig. 5. Time development of the spatially integrated distribution function for the strong Landau damping with the SCM. Parameters are $a = 0.5$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 150$ and $I = 100$.

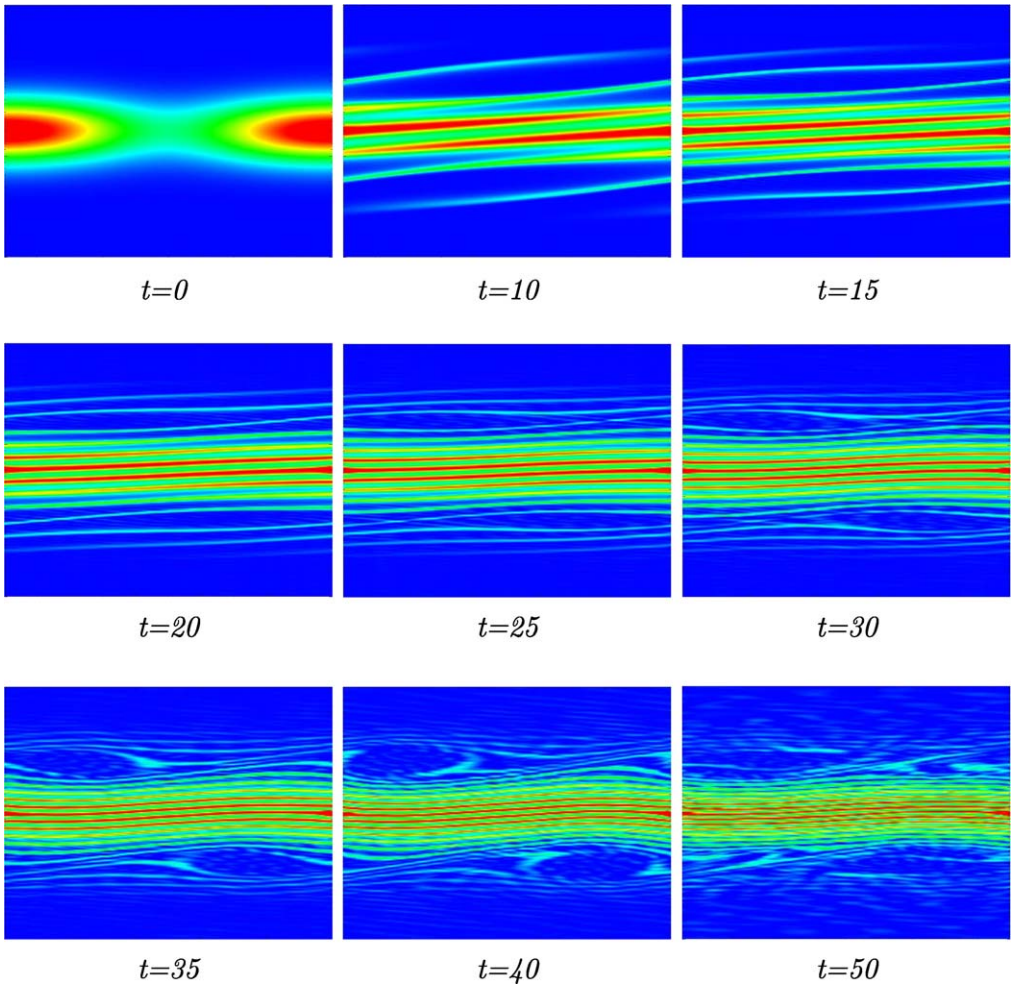


Fig. 6. Time development of the distribution function in the phase space grid $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$ for the strong Landau damping, with the SCM. Parameters are $a = 0.5$, $k = 0.5$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 150$ and $I = 100$. Axes are (x, v).

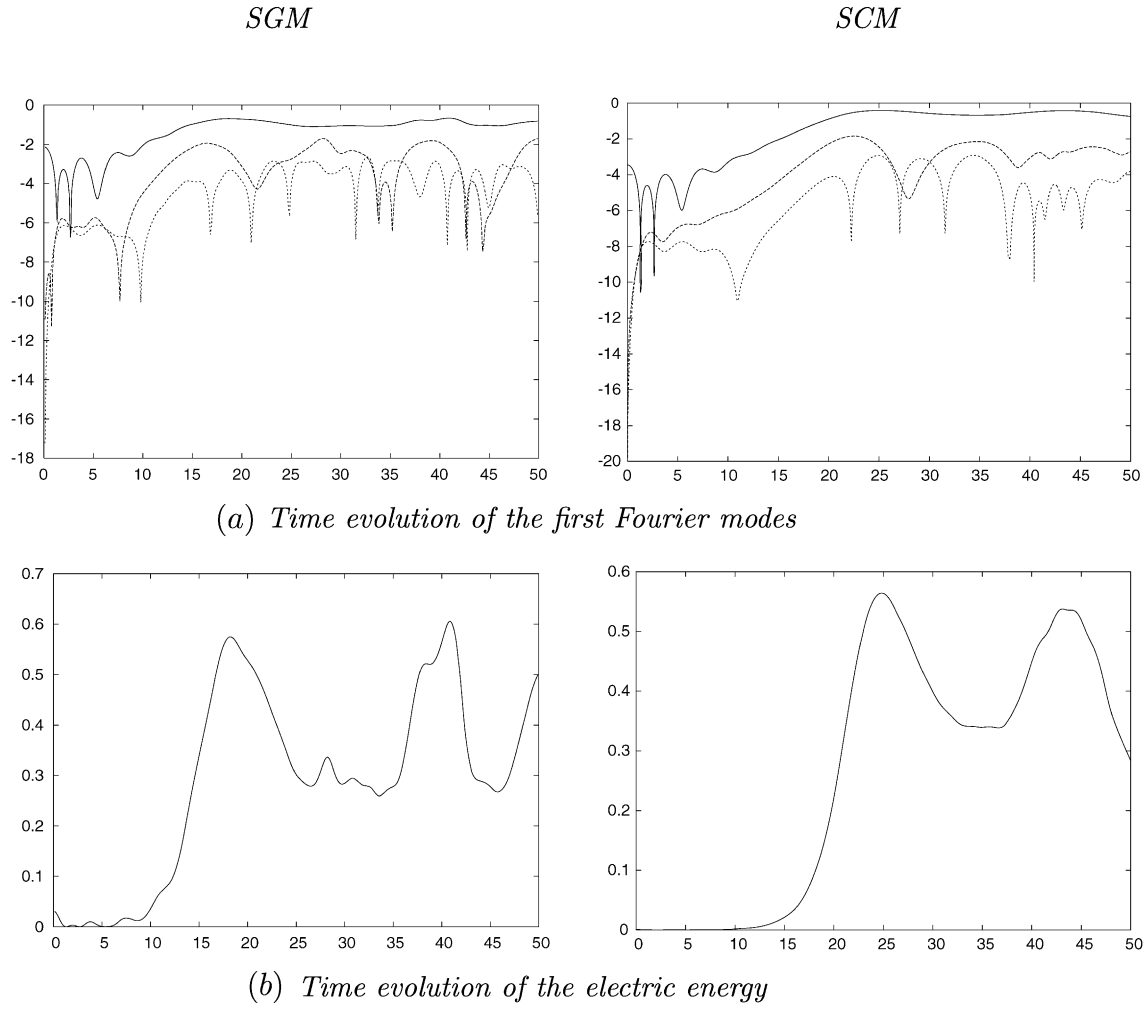


Fig. 7. Two stream's results with the SGM and the SCM. Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = 1/\sqrt{2}$ (SGM), $\alpha = \xi_N/6$ (SCM), $N = 80$ and $I = 80$.

associated with the electric field. The period of these oscillations, $T_{tr} \approx 20$, agrees precisely with the trapping period calculated at the saturation time of the mode. The higher two modes $|E_2|$ and $|E_3|$ also grow exponentially and then oscillate but their amplitudes remain about an order of magnitude smaller than the first mode amplitude. The electric energy (Fig. 7(b)) grows exponentially with approximatively the growth rate of the first mode from $t \approx 10$ to $t \approx 25$ and then saturates. After saturation, the energy oscillates with a period very close to the trapping period.

These results are consistent with those reported by Cheng–Knorr [11] and more recently by Nakamura–Yabe [30]. The corresponding results given by the SGM appears clearly worse. More particularly, the amplitude of the oscillations during the transient phase of the first mode time evolution is larger and the subsequent linear growth phase is not as well described as by the SCM. For the electric energy we also notice additional small-period and small-amplitude oscillations after the saturation time while the period of the main oscillation is in a poor agreement with the theoretical expected value.

Fig. 8 shows the time development of the spatially integrated distribution function. These results are obtained with the SCM. They show the filling in of the hole near the minimum $v = 0$ as time progresses. The filling ceases at $t \approx 25$ when saturation occurs.

In Fig. 9 are given the contour plots of the distribution function in phase space also obtained with the SCM. From $t \approx 15$ we can observe the appearance of a hole structure as the instability grows rapidly. After $t \approx 25$, as a result of particle trapping in the electric field, a vortex has formed and rotates with the trapping frequency.

6.4. Long-time simulations

The previous results prove that for short times the SCM leads to better results than the SGM. But it is important to verify that the SCM is accurate enough to perform long-time simulations. So we study in this section the long-time nonlinear Landau damping and the long-time two-stream instability.

Long-time two-stream instability. The parameters are the same as in Section 6.3, but here we run the simulation up to 300. The evolution of the electric energy is depicted in Fig. 11. The electric energy presents oscillations of decreasing amplitude and converges toward about 70% of its peak value as obtained by Pohn et al. [34]. Fig. 10 shows contour plots of the distribution function in phase space for three times $t = 120$, $t = 200$

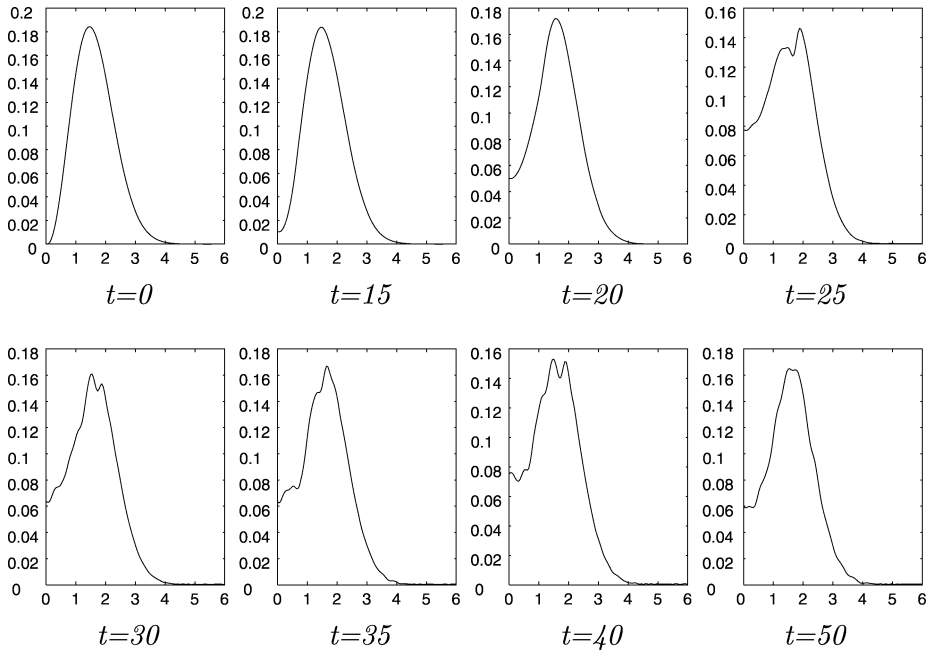


Fig. 8. Time development of the spatially integrated distribution function for the two-stream instability with the SCM. Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 80$ and $I = 80$.

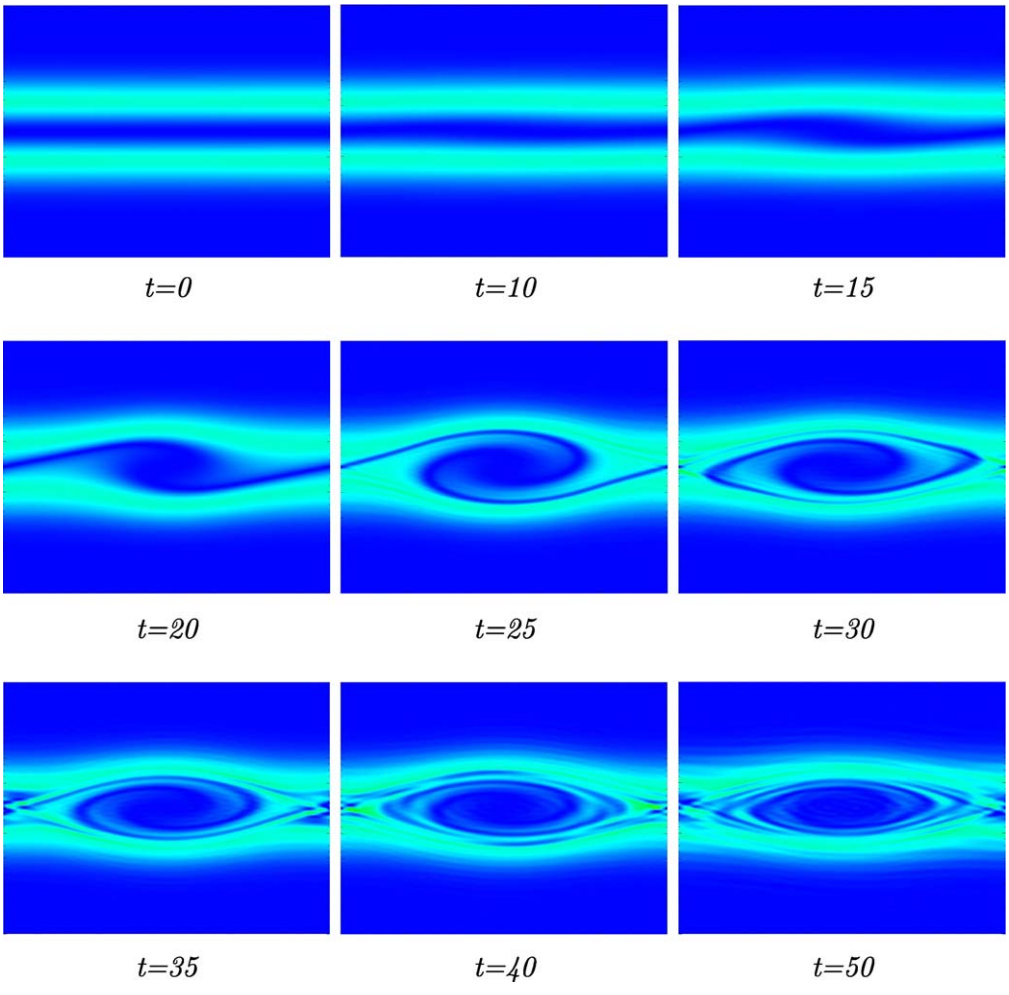


Fig. 9. Time development of the distribution function in the phase space grid $(x, v) \in [0, 4\pi] \times [-6, 6]$ for the two-stream instability with the SCM. Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.5$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 80$ and $I = 80$. Axes are (x, v).

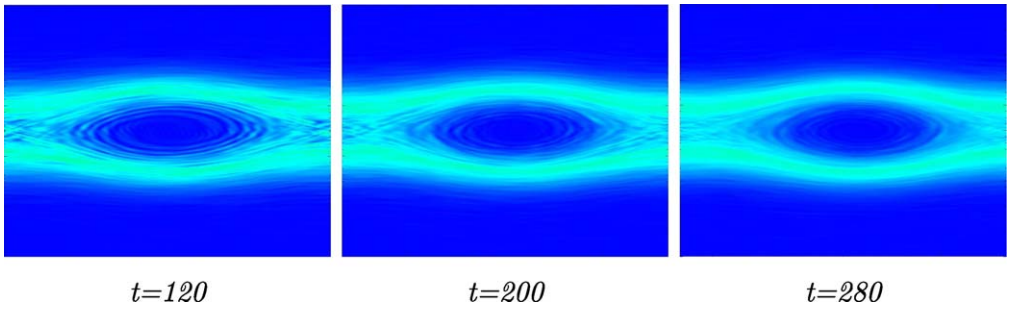


Fig. 10. Long-time two-stream instability's results with the SCM. Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 180$ and $I = 250$. Axes are (x, v).

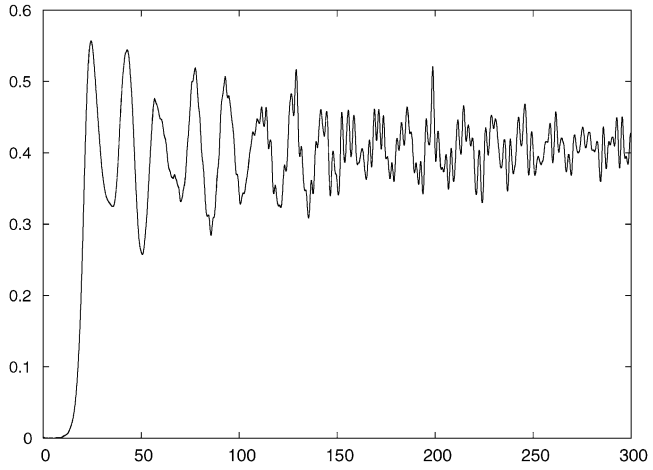


Fig. 11. Time evolution of the electric energy for the long time two-stream instability with the SCM.Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.5$, $L_x = 4\pi$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 180$ and $I = 300$.

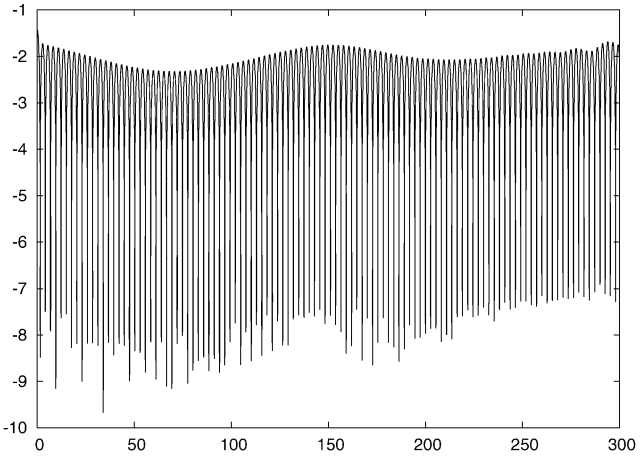


Fig. 12. Long-time nonlinear Landau damping's results with the SCM. Parameters are: $a = 0.01$, $k = 0.3$, $L_x = 2\pi/k$, $\alpha = \xi_N/6$, $N = 180$ and $I = 600$.

and $t = 280$. As expected, the system seems to approach a BGK equilibrium.

Long-time nonlinear Landau damping. We consider the initial distribution (96) with an amplitude of the perturbation $a = 0.01$, the length of the x-grid $L_x = 2\pi/k$ with a wavenumber $k = 0.3$, $N = 180$, $I = 500$ and $\alpha = \xi_N/6$. We compare our results with those obtained by Schumer–Holloway [9] and Shoucri–Gagne [33]. Fig. 12 shows the log-plot of the first mode amplitude. Both the initial exponential decay in the linear phase and the field amplitude oscillations are reproduced in the simulation in good agreement with theoretical predictions (O'Neil [35]).

7. Concluding remarks and forthcoming work

In this paper, we have presented and discussed two Hermite spectral-type methods. They have been specially designed to provide an accurate solution of the Vlasov equation within an unbounded velocity domain while using a small number of degrees of freedom. The first method is a spectral Galerkin method (SGM) and the second one is based on a spectral collocation approach (SCM). In both cases, scaled Hermite functions have been used as basis functions. In the SGM, the computation of the spectral coefficients invokes sparse matrices, so changes of variables (both direct and reverse transformations) have to be involved for diagonalization at each convection step. This part of the computation may be very expensive in memory resources and in computational time. The usefulness of the SCM approach is reflected by the fact that the matrix associated with the convective transport operator $\mathcal{T}$ is a diagonal matrix. This is an obvious advantage because we does not need to perform any variables changes which is highly desirable to save computational time resources.

We have applied these two spectral approaches to the 1Dx-1Dv Vlasov–Poisson system on reference academic test cases for both short and long times with a relatively small number of degree of freedom per time step. The results obtained show good qualitative and quantitative agreement with the theory. We also note that the SCM yields more accurate results than the SGM. The computational cost required for a prescribed accuracy is significantly smaller with the SCM. We also analyse the behaviour and the sensitivity of the solutions with respect to the scaling factor α. From this analysis, we found for each cases, the optimal value of α.

At the present time, we are applying the SCM to the 2Dx-3Dp relativistic Vlasov equation coupled with the complete set of Maxwell equations. For the SCM, the presence of the relativistic factor is not a difficulty and should involve only slight modifications into the SCM presented here. Therefore, the SCM can be viewed as a very good competitor to address high-dimensional Vlasov–Maxwell relativistic problems. In future works, we intend to perform 2Dx-3Dp simulations of van Allen

radiation belts using the TERA-scale supercomputer from the *Commissariat à l'Energie Atomique*, the French atomic agency.

Acknowledgements

The authors would like to express their gratitude to André Mangeney at DESPA, Observatoire de Paris, Meudon, France for fruitful discussions on the subject. We also thank Mathieu Haefele at LSIIT, University of Strasbourg and CALVI INRIA project, France for having provided us his phase space visualization software. We also greatly thank the referees for constructive remarks and ways to improve the article.

References

[1] C.K. Birdsall, A.B. Langdon, Plasma Physics Via Computer Simulation, Inst. of Physics, 1991.
[2] Y. Omura, D. Summers, Computer simulations of the relativistic whistler-mode wave-particle interactions, Phys. Plasmas 11 (2004) 3530.
[3] R.D. Sydora, Low-noise electromagnetic and relativistic particle-in-cells plasma simulation models, J. Comput. Appl. Math. 109 (1999) 243–259.
[4] P.T. Armstrong, Numerical studies of the nonlinear Vlasov equation, Phys. Fluids 10 (6) (1967) 1269–1280.
[5] G. Joyce, G. Knorr, H. Meier, Numerical integration methods of the Vlasov equation, J. Comput. Phys. 8 (1971) 53–63.
[6] T. Tang, The Hermite spectral method for Gaussian-type functions, SIAM J. Sci. Comput. 14 (3) (1993) 594–606.
[7] T. Tang, S. McKee, M.W. Reeks, A spectral method for the numerical solutions of a kinetic equation describing the dispersion of small particles in a turbulent flow, J. Comput. Phys. 103 (1992) 222–230.
[8] J.P. Holloway, Spectral velocity discretizations for the Vlasov–Maxwell equations, Transport Theory Statist. Phys. 25 (1) (1996) 1–32.
[9] J.W. Schumer, J.P. Holloway, Vlasov simulations using velocity-scaled Hermite representations, J. Comput. Phys. 144 (1998) 626–661.
[10] F.C. Grant, M.R. Feix, Fourier–Hermite solutions of the Vlasov equations in the linearized limit, Phys. Fluids 10 (1967) 696.
[11] C.Z. Cheng, G. Knorr, The integration of the Vlasov equation in configuration space, J. Comput. Phys. 22 (1976) 330–351.
[12] G. Manfredi, Long-time behavior of nonlinear Landau damping, Phys. Rev. Lett. 79 (15) (1997) 2815–2818.
[13] D. Funaro, O. Kavian, Approximation of some diffusion evolution equations in unbounded domains by Hermite functions, Math. Comp. 57 (196) (1991) 597–619.
[14] J.P. Boyd, Chebychev and Fourier Spectral Methods, second ed., Dover, 2001.
[15] A.J. Klimas, W.M. Farrell, A splitting algorithm for Vlasov simulation with filamentation filtration, J. Comput. Phys. 110 (1994) 150–163.
[16] B. Elliasson, Numerical modelling the Fourier transformed two-dimensional Vlasov–Maxwell system, J. Comput. Phys. 190 (2003) 501–522.
[17] M. Shoucri, G. Knorr, Numerical integration of Vlasov equation, J. Comput. Phys. 14 (1974) 84.
[18] R. Dautray, J.L. Lions, Analyse mathématique et calcul scientifique pour les sciences et les techniques, tome 2, Masson, Paris, 1985.
[19] B.Y. Guo, Error estimation for Hermite spectral method for nonlinear partial differential equations, Math. Comp. 68 (1999) 1067–1078.
[20] B.Y. Guo, C.L. Xu, Hermite pseudospectral method for nonlinear partial differential equations, Math. Model. Numer. Anal. 34 (4) (2000) 859–872.
[21] S. Wollman, E. Ozizmir, Numerical approximation of the one-dimensional Vlasov–Poisson system with periodic boundary conditions, SIAM J. Numer. Anal. 33 (4) (1996) 1377–1409.
[22] G. Strang, On the construction and comparison of difference schemes, SIAM J. Numer. Anal. 5 (3) (1968) 506–517.
[23] A. Mangeney, F. Califano, C. Cavazzoni, P. Travnicek, A numerical scheme for the Integration of the Vlasov–Maxwell system of equations, J. Comput. Phys. 179 (2002) 495–538.
[24] T. Tang, The Hermite spectral method for Gaussian-type functions, SIAM J. Sci. Comput. 14 (3) (1993) 594–606.
[25] B. Fornberg, A Practical Guide to Pseudospectral Methods, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 1998.
[26] C. Bernardi, Y. Maday, Spectral methods, in: P.G. Ciarled, J.L. Lions (Eds.), Handbook of Numerical Analysis, vol. 5, North-Holland, Amsterdam, 1997, pp. 209–486.
[27] C. Canuto, M.Y. Hussaini, A. Quarteroni, T.A. Zang, Spectral Methods—Fundamentals in Single Domains, Springer, Berlin, 2006.
[28] S.A. Orszag, Comparison of pseudospectral and spectral approximations, Stud. Appl. Math. 51 (1972) 253–259.
[29] G. Szegö, Orthogonal Polynomials, Amer. Math. Soc., New York, 1967.
[30] T. Nakamura, T. Yabe, Cubic interpolated propagation scheme for solving the hyper-dimensional Vlasov–Poisson equation in phase space, Comput. Phys. Comm. 120 (1999) 122–154.
[31] F. Filbet, E. Sonnendrücker, Comparison of Eulerian Vlasov solvers, Comput. Phys. Comm. 150 (2003) 247–266.
[32] G. Rein, Global weak solutions to the relativistic Vlasov–Maxwell system revisited, Comm. Math. Sci. 2 (2) (2004) 145–158.
[33] R. Gagne, M. Shoucri, A splitting scheme for the numerical solution of a one-dimensional Vlasov equation, J. Comput. Phys. 24 (1977) 445.
[34] E. Pohn, M. Shoucri, G. Kamelander, Eulerian Vlasov codes, Comput. Phys. Comm. 166 (2005) 81–93.
[35] T.M. O'Neil, Collisionless damping of an electron plasma wave, Phys. Fluids 8 (12) (1965) 2255.

Résumé

Les satellites artificiels baignent dans un environnement radiatif hostile qui conditionne en partie leur fiabilité et leur durée de vie en opération : les ceintures de Van Allen. Afin de les protéger, il est nécessaire de caractériser la dynamique des électrons énergétiques piégés dans les ceintures radiatives. Elle est déterminée essentiellement par les interactions entre les électrons énergétiques et les ondes électromagnétiques existantes.

Le travail de cette thèse a consisté à concevoir un schéma numérique original pour la résolution du système d'équations modélisant ces interactions : les équations de Vlasov-Maxwell relativistes. Notre choix s'est orienté vers des méthodes d'intégration directe. Nous proposons trois nouvelles méthodes spectrales pour discrétiser en impulsion les équations : une méthode de Galerkin et deux méthodes de type collocation. Ces approches sont basées sur des fonctions de Hermite qui ont la particularité de dépendre d'un facteur d'échelle permettant d'obtenir une bonne résolution en vitesse.

Nous présentons dans ce manuscript les calculs conduisant à la discrétisation et à la résolution du problème de Vlasov-Poisson monodimensionnel ainsi que les résultats numériques obtenus. Puis nous étudions les extensions possibles des méthodes au problème complet relativiste. Afin de réduire les temps de calcul, une parallélisation et une optimisation des algorithmes ont été mises en œuvre. Enfin, les calculs de validation du code 1Dx-3Dv, à partir d'instabilités de types Weibel et whistlers, à une ou deux espèces d'électrons, sont détaillés.

Mots clés : équations de Vlasov-Poisson, équations de Vlasov-Maxwell, méthode de Galerkin, méthode de collocation, facteur d'échelle, relativiste, 3D vitesse, parallélisation, supercalculateur, instabilités Weibel, ceintures de radiation, instabilités whistlers.

Abstract

Artificial satellites operate in an hostile radiation environment, the Van Allen radiation belts, which partly condition their reliability and their lifespan. In order to protect them, it is necessary to characterize the dynamics of the energetic electrons trapped in these radiation belts. This dynamics is essentially determined by the interactions between the energy electrons and the existing electromagnetic waves.

This work consisted in designing a numerical scheme to solve the equations modelling these interactions : the relativistic Vlasov-Maxwell system of equations. Our choice was directed towards methods of direct integration. We propose three new spectral methods for the momentum discretization : a Galerkin method and two collocation methods. All of them are based on scaled Hermite functions. The scaling factor is choosen in order to obtain the proper velocity resolution.

We present in this thesis the discretization of the one-dimensional Vlasov-Poisson system and the numerical results obtained. Then we study the possible extensions of the methods to the complete relativistic problem. In order to reduce the computing time, parallelization and optimization of the algorithms were carried out. Finally, we present 1Dx-3Dv computations of Weibel and whistler instabilities with one or two electrons species.

Keywords : Vlasov-Poisson equations, Vlasov-Maxwell equations, Galerkin method, collocation method, scaling factor, relativistic, 3D velocity, parallelisation, Weibel instabilities, radiation belts, whistler instabilities.