

CEA/DRIF/DCSA/MLS/B3/DO/224/97

DEVELOPPEMENTS RECENTS DANS LE CODE DE
RESOLUTION DES EQUATIONS DE VLASOV-MAXWELL
EN 2D STRUCTURE MANET

R. SENTIS - P. BLAISE - P. CIARLET

(EP. 2331.01)

Date d'émission : 22 decembre 1997 Nombre de pages : 55
Date de diffusion :

12 JAN. 1998

Visa du Chef de Service MLS

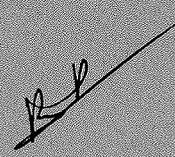

D. BOUCHE

Table des matières

1	Environnement du code	5
1.1	Unités du problème	5
1.2	Données	6
1.2.1	Pas d'espace	6
1.2.2	Pas de temps	6
1.2.3	Nombre de mailles	6
1.2.4	Impulsion laser	7
1.2.5	Macro-Particules	7
1.2.6	Protection-reprise	7
1.3	Partage de fichiers source sous CVS	7
1.4	Format des fichiers de résultat	7
1.5	Protection/Reprise	9
1.6	Arborescence	9
1.7	Lancement d'un cas sur T3E	10
2	Parallélisme	11
2.1	PVM	11
2.1.1	Nouvelles fonctionnalités	11
2.1.2	Exécution monoprocesseur	11
2.2	FORTRAN 90	11
2.3	Temps d'exécution	12
2.3.1	Augmentation du taux de parallélisation	12
2.3.2	Quelques mesures	14
2.3.3	Performances	15
3	Modélisation numérique	18
3.1	Structure des données	18
3.2	Schémas numériques	20
3.3	Correction de Poisson locale	22
3.3.1	Méthode du potentiel correcteur	22
3.3.2	Méthode de Marder	26
3.4	Condition au bord pour les champs	28
3.5	Condition au bord pour les particules	29
4	Un exemple de simulation	30
5	Annexe: Résolution des équations d'Euler couplées aux équations de Maxwell	41

Introduction

Le code **Manet** a été développé pour simuler l'interaction entre une onde laser et un plasma. **Manet** résout en 2D cartésien les équations couplées de Vlasov-Maxwell par une méthode particulière. Il fonctionne actuellement sur machine massivement parallèle Cray T3E.

Ce rapport fait suite aux travaux de Adolf [1] et Lefebvre, Chave et Bain [5], où l'on trouvera une description des méthodes numériques ainsi que des cas typiques de simulation.

Cependant, il nous est apparu que de nombreuses améliorations pouvaient être apportées au code. D'une part sur le plan informatique :

- Restructuration du fichier de données.
- Passage sous CVS.
- Format des fichiers résultats.
- Mise en place d'un système de protection/reprise.
- Passage au FORTRAN 90.
- Amélioration des performances parallèles.

d'autre part sur le plan numérique :

- Correction de Poisson locale : méthodes de Marder ou du gradient conjugué.
- Condition au bord pour le champ électrique et pour son potentiel.
- Réémission de particules [7].

Tout au long de ce rapport, nous nous sommes attachés à décrire de façon la plus claire possible chacun des problèmes liés à ces améliorations.

Nous avons par ailleurs mis en annexe une étude (rédigée par P. Bain et R. Sentis) concernant l'implémentation d'un module de résolution des équations d'Euler couplées aux équations de Maxwell bien que le couplage de ce module au reste de code ne soit pas encore totalement validé.

1 Environnement du code

1.1 Unités du problème

Le système d'unités utilisé dans le code est appelé *système d'unités plasma*. Ce système a l'avantage d'éviter l'apparition des constantes fondamentales c , ϵ_0 , μ_0 , e , m_e , ainsi que de la pulsation laser ω_0 , ce qui permet un gain en lisibilité et en temps de calcul.

Il sera systématiquement utilisé par la suite. Nous le présentons ici de façon détaillée.

Quantité	Symbole	Unité plasma
Temps	t	ω_0^{-1}
Vitesse	v	c
Distance	d	c / ω_0
Accélération	a	$c \omega_0$
Masse	m	m_e (masse de l'électron)
Impulsion	p	$m_e c$
Energie	E	$m_e c^2$
Charge	q	e (charge élémentaire)
Champ électrique	\vec{E}	$m_e c \omega_0 / e$
Champ magnétique	\vec{B}	$m_e \omega_0 / e$
Densité	n	$\omega_0^2 m_e \epsilon_0 / e^2$ (densité critique)

TAB. 1 - *unités plasma*

ω_0 est spécifié dans le code par la donnée de la longueur d'onde en micromètres.

Nous donnons ici quelques formules utiles ainsi que des facteurs de conversions en unités plasma :

- une énergie de 1 *keV* vaut $1 / 511 m_e c^2$.
- la masse du proton vaut $1836 m_e$.
- la longueur de Debye électronique λ_D vaut $\sqrt{E_{th} (keV) / 511 n_e}$ en unités plasma, où n_e est la densité électronique en unités plasma et E_{th} l'énergie thermique initiale en *keV*.
- l'amplitude du champ électrique pour un laser d'éclairement I_0 en $W.cm^{-2}$ de longueur d'onde λ_0 en μm vaut $0.85 \cdot 10^{-9} \sqrt{I_0 \lambda_0^2}$ en unités plasma pour une onde plane.

1.2 Données

Une simulation numérique avec **Manet** est gouvernée par le fichier *data*. Plusieurs exemples sont fournis avec la version officielle maintenue sous *CVS*, (paragraphe 1.3).

Le format du fichier *data* est fixe et pour un utilisateur averti les commentaires qui ont été ajoutés à chaque étape devraient être suffisants.

Nous précisons ici certaines étapes essentielles pour la création de ce fichier. Nous rappelons que les données sont à fournir dans le système d'unités plasma.

Nous supposons que l'utilisateur a une idée précise du plasma qu'il veut étudier en ce qui concerne notamment la densité, l'énergie thermique, ainsi que le type d'impulsion laser, sa pulsation, son intensité, ...

1.2.1 Pas d'espace

L'utilisateur doit fixer deux pas de maillage : Δx en abscisse et Δy en ordonnée. En général ils seront identiques. Pour éviter certaines instabilités numériques, [2] page 175, ils doivent être inférieurs à $4 \lambda_D$. L'avant-dernière formule du paragraphe précédent permet de calculer cette longueur en fonction de l'énergie thermique des électrons et de leur densité initiale. Les pas du maillage doivent également être une fraction (i. e. au plus 0.20) de la longueur d'onde du laser qui vaut 2π en unités plasma.

1.2.2 Pas de temps

Les valeurs de Δx , Δy conditionnent celle du pas de temps Δt par le critère CFL imposé par la méthode de résolution des équations de Maxwell, [2] page 354. Cette relation doit être vérifiée pour assurer la stabilité numérique du schéma :

$$\left(\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{\Delta t}{\Delta y}\right)^2 \leq 1 \quad \text{unités plasma}$$

De plus Δt doit être une fraction de la période laser qui vaut 2π en unités plasma.

1.2.3 Nombre de mailles

La taille du plasma conditionne le nombre de mailles en abscisse et en ordonnée connaissant Δx et Δy . Toutefois il ne faut pas espérer dépasser quelques milliers de mailles sur chacun des deux axes vu les performances actuelles.

Le domaine de calcul est découpé en bandes de tailles égales selon l'axe Oy , une bande correspondant à un processeur [1]. C'est pourquoi le nombre de mailles selon Oy doit être un multiple du nombre de processeurs. L'idéal est de prendre un multiple de 128, nombre maximum de processeurs sur le T3E. Une différence fondamentale avec la version précédente est que le fichier de données est "indépendant" du nombre de processeurs : une fois fixé le nombre de mailles selon Oy , on peut choisir n'importe quel nombre de processeurs sans toucher au reste des données, dès que le nombre de mailles en est un multiple. Ceci permet par exemple de faire des essais avec un petit nombre de processeurs, 16 ou 32, puis de passer en phase finale à 128 pour tirer parti de la puissance de calcul du T3E.

1.2.4 Impulsion laser

L'intensité du laser fixe l'amplitude maximale du champ électrique par la dernière formule du paragraphe précédent, (dans le cas d'une onde plane).

Remarquons que le choix d'unités plasma ne fait pas intervenir directement la longueur d'onde du laser. Néanmoins elle est demandée à l'utilisateur, et peut servir à convertir les énergies électromagnétiques par exemple.

1.2.5 Macro-Particules

Les équations de Vlasov sont résolues par une méthode particulière, [1], [2]. Le choix du nombre de macro-particules par maille représente un compromis. Grossièrement le temps de calcul croît linéairement en fonction de leur nombre. Idéalement si le nombre de macro-particules tend vers l'infini on résout exactement les équations de Vlasov. Un bon compromis est de choisir quelques macro-particules par maille, entre 3 et 20. Mais il faut savoir que moins il y a de macro-particules plus la densité totale de charge ions + électrons est bruitée localement par faute d'une mauvaise répartition statistique. En conséquence, ce bruit se propage aux équations de Maxwell par l'intermédiaire de la densité de charge ρ et la densité de courant \vec{J} .

1.2.6 Protection-reprise

Par souci de clarté nous reportons au paragraphe 1.5 les explications techniques concernant le système de protection-reprise.

1.3 Partage de fichiers source sous CVS

Le code **Manet** a évolué depuis sa première version par le biais de plusieurs développeurs. Il nous est apparu essentiel de porter ce code sous un utilitaire de gestion de version permettant le développement cohérent par plusieurs personnes. Nous avons retenu Concurrent Versions System - CVS qui est un logiciel sous license GNU. Il est relativement simple d'emploi et se trouve dans le domaine public.

Une documentation simplifiée mais suffisante en général est accessible dans le répertoire `~/manet` sous le nom de *CVS-manuel*. Son contenu est donné en annexe, page 34.

1.4 Format des fichiers de résultat

En sortie **Manet** donne plusieurs types de diagnostics [5]

- énergétiques
- temps de calcul
- particules tests
- cartes des champs électromagnétiques 2D

- cartes d'espace des phases 2D

Dans sa version précédente toutes les sorties se faisaient au format texte. Pour les cartes 2D cela représentait d'énormes fichiers dont le temps d'écriture pouvait nuire aux performances du code. Ces fichiers sont maintenant au format binaire. Pour assurer une relecture compatible sur station de travail nous avons choisi le format IEEE 32bits. Ceci n'est pas automatique sur le T3E. En conséquence, il faut avant de lancer l'exécution du code utiliser le script *format_manet* qui est une succession de commandes **assign** qui force les sorties 2D au format IEEE 32bits. Ce script se trouve dans le répertoire */src*.

Un programme C, ou l'utilisation de la bibliothèque *nx* en fortran, lira directement les données des fichiers 2D sur station de travail. Voici un exemple de code source Fortran90 pour relire le fichier carte de champ magnétique B_z , comprenant quatre sauvegardes sur un maillage de 151×193 points :

```
program lit_champ

  implicit none

  integer i, j, iter, fdunit, rc
  integer ibuff(1)

  real rbuff(1)

!ouverture du fichier au format IEEE 32bits

  call nxopen('champ_Bz.t2@ie32', 'r', fdunit, rc)

  if (rc .eq. -1) then
    call nxperror()
    stop
  endif

!lecture des donnees

  do iter = 1, 4

!  print*, 'iteration numero', iter

    do j = 1, 193
      do i = 1, 151

        call nxreadf(fdunit, 1, rbuff, rc)

        IF (iter == 4) print*, rbuff(1)
      enddo
    enddo
  enddo
```

```

        enddo
    enddo

enddo

end program lit_champ

```

qui se compile sur SGI avec la ligne de commande

```
f90 lit_champ.f90 -lnxfort -lnx -L $LM_LIB
```

Par ailleurs, certains logiciels tel que *AVS* permettent une relecture directe au format IEEE.

1.5 Protection/Reprise

La version actuelle de **Manet** comprend un système de *protection-reprise*.

Imaginons qu'un utilisateur estime à moins d'une heure de calcul une simulation de 10 000 itérations. Il se peut que cette limite soit dépassée, auquel cas le programme est stoppé par le gestionnaire de tâches du T3E avant la fin de son exécution et tout le travail est perdu.

Pour éviter ce genre de mésaventure, l'utilisateur peut spécifier dans le fichier *data* une sauvegarde intégrale par tous les processeurs des données toutes les n itérations. Dans l'exemple précédent on peut imaginer une sauvegarde toutes les 2 500 itérations par exemple. Si le programme a été stoppé après l'itération 7 500, on peut spécifier une reprise du programme avec les données sauvegardées à l'itération 7 500 en donnant le nombre d'itérations voulues dans le fichier *data* (2 500 dans notre exemple pour compléter à 10 000).

Pour la reprise, le fichier exemple *data.reprise* donne le format à utiliser.

Malgré cela, l'utilisation des protections-reprises est à limiter. En effet, la sauvegarde des données peut ralentir l'exécution du code. Il faut compter plusieurs minutes sur 128 processeurs pour la sauvegarde de 4 giga-octets de données.

1.6 Arborescence

Sur T3E, **Manet** possède une arborescence qui permet une organisation claire des fichiers.

- les fichiers sources **.f90*, **.h*, le *Makefile*, les objets **.o* dans le répertoire */src*
- le binaire *manetx*, le fichier de formattage des sorties *format_manet* dans le répertoire */bin*
- les fichiers de données *data* dans le répertoire */data*
- les fichiers résultats **.t2* **.s* *resu** dans le répertoire */resu*

L'utilisateur doit donc créer cette arborescence sur son compte T3E. Les échanges de fichiers entre la version de travail sur station et la version d'exécution sur T3E se font par remote-copy unix *rcp*.

1.7 Lancement d'un cas sur T3E

Nous supposons que l'utilisateur a créé l'arborescence précédente et qu'il y a placé correctement les fichiers.

Voici les étapes à respecter pour un lancement en interactif

- compilation par la commande *make*
- installation de l'exécutable par *make install*
- on se place dans le répertoire */bin*
- exécution de *format_manet* pour les sorties IEEE 32 bits
- on exécute

```
mpprun -n npes manetx
```

où *npes* est le nombre de processeurs.

Pour un lancement en mode 'batch' (de nuit ou le week-end), il faut d'abord créer dans son *home* *-ap* un répertoire *gex* qui contiendra le répertoire portant le nom du cas que l'on veut soumettre, par exemple *cas01*. Dans ce dernier répertoire on doit créer un fichier script *sourceg* de simulation. En voici un exemple :

```
COMMENT=instabilite surcritique
INPUT=0                !! numero d'imputation
MEMOIRE=100000000
TID=MINE
TEMPSTD=3600          !! temps en secondes
CRAY=cauchy
PROCESS=128
***GEX*** 1          image du cas complet
cd /cauchy/user1/m8/blaise/manetf90/bin
./format_manet
mpprun -n 128 ./manetx

***GEX***-1
```

Enfin avec la commande *expc t3e* on ajoute ce cas dans la queue de calcul du T3E. Un menu d'aide sous *expc* donne les explications nécessaires.

2 Parallélisme

Manet est un code parallèle. L'ampleur des calculs effectués dans **Manet** justifie pleinement ce choix. D'une part il s'agit de calculer l'évolution de plusieurs millions de particules sous l'influence d'un champ électromagnétique, d'autre part les méthodes numériques de résolution ne présentent pas de handicap majeur vis-à-vis de la parallélisation.

Le choix d'un langage de parallélisation tel que **PVM** en fait un code portable, et assure une certaine souplesse d'écriture comparé à des langages tels que HPF.

2.1 PVM

2.1.1 Nouvelles fonctionnalités

Dans sa version précédente **Manet** utilisait principalement les sous-routines de communication *pvmfrecv* et *pvmfsend*. Ces routines sont *a priori* universelles. Mais il est apparu en de nombreux endroits plus judicieux de faire appel aux routines *pvmfbcast* et *pvmfreduce* ainsi qu'aux routines *pvmfprecv* et *pvmfpsend*.

pvmfbcast diffuse aux processeurs membre d'un même groupe (en général, tous les processeurs) les données contenues dans le buffer d'envoi du processeur qui appelle cette routine.

pvmfreduce applique un opérateur sur les données des processeurs membres d'un même groupe. Le résultat est collecté par un seul processeur. Les opérations prédéfinies sont le minimum, le maximum, la somme, le produit, l'utilisateur pouvant définir ses propres fonctions de réduction.

Cela a permis un gain de place conséquent en termes de lignes de code (grâce principalement à *pvmfreduce*). De plus, il est préférable d'utiliser ces routines qui sont optimisées pour le T3E.

2.1.2 Exécution monoprocesseur

Nous avons rendu l'exécution monoprocesseur possible. L'intérêt d'une exécution monoprocesseur est principalement pour la mise au point du code. Elle permet bien sûr d'écartier toute erreur due à l'exécution parallèle du code.

2.2 FORTRAN 90

Manet a été réécrit en Fortan 90. Ce choix est une quasi-obligation en cette fin de siècle et offre de nombreux avantages.

Le code source est au "format libre" ce qui permet une meilleure souplesse d'écriture par rapport au Fortran 77.

Les fonctionnalités d'opérations sur les tableaux ont été largement utilisées lors de la réécriture du code, permettant une meilleure lisibilité. Ainsi, le nombre de lignes de code source a été réduit de 40%, effet conjugué du Fortran90 et des nouvelles fonctionnalités **PVM**

Notons qu'actuellement **Manet** utilise 4 fichiers en-tête **.h*, inclus avec la directive *include*. Nous avons fait porter notre effort sur la modularité du code : initialement il n'y avait qu'un seul fichier en-tête. Malgré tout cet usage n'est que toléré dans la norme Fortran90. Il était justifié par le fait que le Fortran90 du T3D ne reprend que partiellement la norme. Une évolution future sera d'inclure des modules par la directive *use*.

La routine *retrpa* qui gère les communications des particules entre processeurs a été entièrement revue, (voir le paragraphe suivant), en utilisant l'allocation dynamique des tableaux en Fortran90. Le gain de place en mémoire est conséquent car on évite l'allocation à répétition de tableaux surdimensionnés pour les communications des particules. En effet, on remplace l'utilisation d'un tableau dimensionné au nombre total des particules par celle d'un tableau dimensionné au nombre effectif de particules sortantes.

2.3 Temps d'exécution

2.3.1 Augmentation du taux de parallélisation

Un moyen d'estimer la bonne parallélisation du code et d'évaluer ses performances est d'utiliser l'outil **apprentice**. Bien entendu l'utilisation d'un outil d'évaluation perturbe le fonctionnement du code, en particulier les options d'optimisation à la compilation. Ce qu'il faut retenir ce sont les temps relatifs et pas absolus.

Pour utiliser **apprentice** il faut d'abord recompiler le code pour qu'il soit correctement instrumenté. Une explication est fournie dans le makefile, où il suffit de commenter et de décommenter certaines lignes d'options de compilation. Puis on lance une exécution qui génère un fichier *app.rif*. On peut alors utiliser **apprentice** pour obtenir un diagnostic d'exécution.

La figure 1 présente le résultat obtenu sur 64 processeurs avec le fichier *data.parallelisme*. Ce fichier simule une onde laser de faible intensité pénétrant un plasma sous-critique de 640 sur 640 mailles avec 5 macro-ions et 5 macro-électrons par maille.

Le travail "parallèle" en vert, c'est-à-dire hors communications, représente environ 75% du temps, ce qui est raisonnable. Le reste du temps "non parallèle", utilisé pour les communications, est scindé en deux parties : rouge et gris. La partie rouge représente les routines de communications évaluées, celle en gris les routines non évaluées.

On remarque en rouge un mauvais fonctionnement de *pvmfrecv* dans la routine *updsou* qui communique les densités de charge et de courant entre processeurs. Une façon d'y remédier est d'augmenter la taille des buffers **PVM**.

Les nécessaires instructions de réduction *pvmfreduce* ralentissent aussi l'exécution du code. Elles se partagent entre les diagnostics et la correction de Poisson.

Remarquons que les diagnostics 2D sont négligeables en temps de calcul. L'écriture au format IEEE 32 bits n'est pas pénalisante et beaucoup plus rapide que le format texte.

Le quart du temps de calcul est passé dans la routine *retrpa* qui gère les communications des particules entre processeurs voisins. Nous avons optimisé cette routine, d'une part, en utilisant l'allocation dynamique et, d'autre part, en ordonnant efficacement les boucles les plus lentes.

En effet, la majorité de son travail est l'arrangement des tableaux de particules lorsque

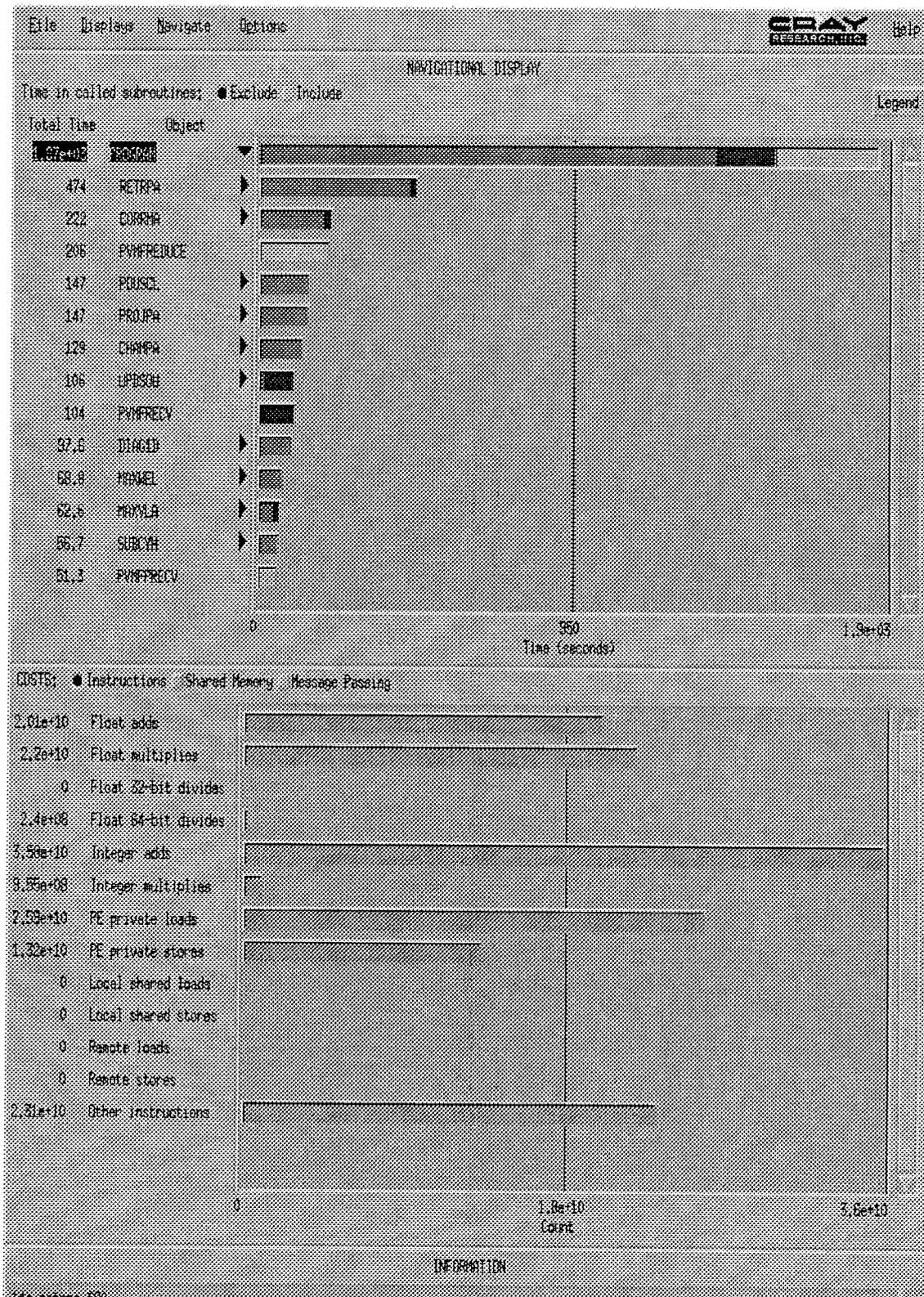


FIG. 1 - apprentice

certaines d'entre elles sont passées aux processeurs voisins ou ont été absorbées par les bords du domaine. Pour ce faire on doit repérer ces particules, communiquer leurs caractéristiques physiques, puis les supprimer des tableaux de particules.

Pour les communications, on compte d'abord les particules à communiquer, puis on alloue dynamiquement des tableaux temporaires de communication de tailles correspondantes, et on utilise **PVM**. Dans sa version précédente, le code utilisait des tableaux de communication de taille fixe, égale au nombre maximum de particules que peut gérer un processeur, ce qui était, bien évidemment, beaucoup trop important par rapport au nombre de particules à communiquer à chaque itération.

Dans un second temps, on réalise la suppression des particules en repérant les intervalles à décaler et le décalage correspondant, comme on peut le voir sur la figure 2, et on effectue les décalages proprement dits. Dans la version précédente, le calcul était fait en raisonnant particule par particule, ce qui était nettement plus lent. Néanmoins, cette routine reste pénalisante. La mémoire cache relativement faible sur un processeur *alpha* du T3E peut être une explication complémentaire, lors de l'exécution des boucles de réarrangement.

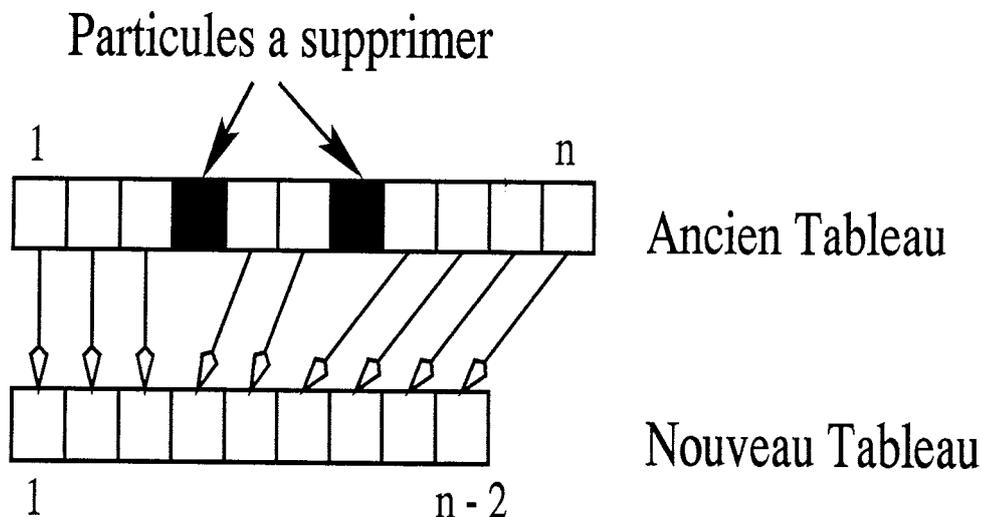


FIG. 2 - *arrangement des tableaux*

Enfin, dans le cas d'un calcul relativiste, (cela n'apparaît pas sur le test *data.parallelisme*), la racine carrée est souvent utilisée. Celle-ci est lente sur un processeur du T3E. On pourrait envisager une optimisation en utilisant une méthode de Newton avec pour germe le résultat de l'itération précédente.

2.3.2 Quelques mesures

Nous reprenons l'exemple précédent en faisant varier

- (1) le nombre de processeurs à taille globale constante,

(2) le nombre de processeurs à taille locale constante (scalability).

Les deux résultats sont respectivement présentés sur les figures 3 et 4. On appelle p le nombre de processeurs et $(T_i)_{1 \leq i \leq p}$ le temps mis par chaque processeur (calculs, communications et diagnostics), et on note $T = \max_{1 \leq i \leq p} T_i$ le temps "elapsed".

On représente en ordonnée, sur la Figure 3, le temps "elapsed" multiplié par le nombre de processeurs, i. e. pT . Idéalement, cette quantité doit rester constante.

pT est décomposé en 4 parties

- *diagnostics*: calcul et écriture des diagnostics
- *maxwell*: résolution des équations de Maxwell
- *pousseur*: résolution des équations du mouvement
- *particules*: pousseur + projection des champs et des densités

La figure 3 montre une parallélisation excellente pour les parties particulières. Par contre le solveur de Maxwell devient plus lent quand le nombre de processeurs augmente. Cela vient d'un plus grand nombre de communications. La partie diagnostics reste quasi-négligeable, avec cependant une augmentation due au nombre croissant de communications et d'opérations de réduction.

Sur la figure 4 ("scalability"), on représente le temps "elapsed" T qui doit idéalement, dans ce second cas, rester constant. On obtient à nouveau un résultat excellent pour la partie particulière. La partie Maxwell + diagnostics croît avec le nombre de PEs principalement à cause des instructions de réduction.

2.3.3 Performances

Apprentice, figure 1, permet d'accéder au nombre d'opérations effectuées au cours d'une simulation. On peut estimer sommairement la puissance de calcul de **Manet** par le nombre de FLOPs (FLoating point OPERations per second). Nous prenons comme exemple l'interaction laser haute intensité - plasma surcritique [5]. Après estimation du nombre d'opérations flottantes et du temps de calcul avec les options de compilations `-O2 - unroll2`, on arrive à un peu moins de 5 GFLOPs pour 128 PEs (1 GFLOPs = 10^9 opérations flottantes par seconde). En comparant le temps total d'exécution avec l'ancienne version on obtient une accélération d'un facteur 4,5. Sachant que le passage T3D à T3E permet d'espérer un gain de 2 à 3, on peut penser que les optimisations introduites dans le code (cf. plus haut) contribuent à une réduction d'un facteur 1,5 à 2,2 du temps d'exécution.

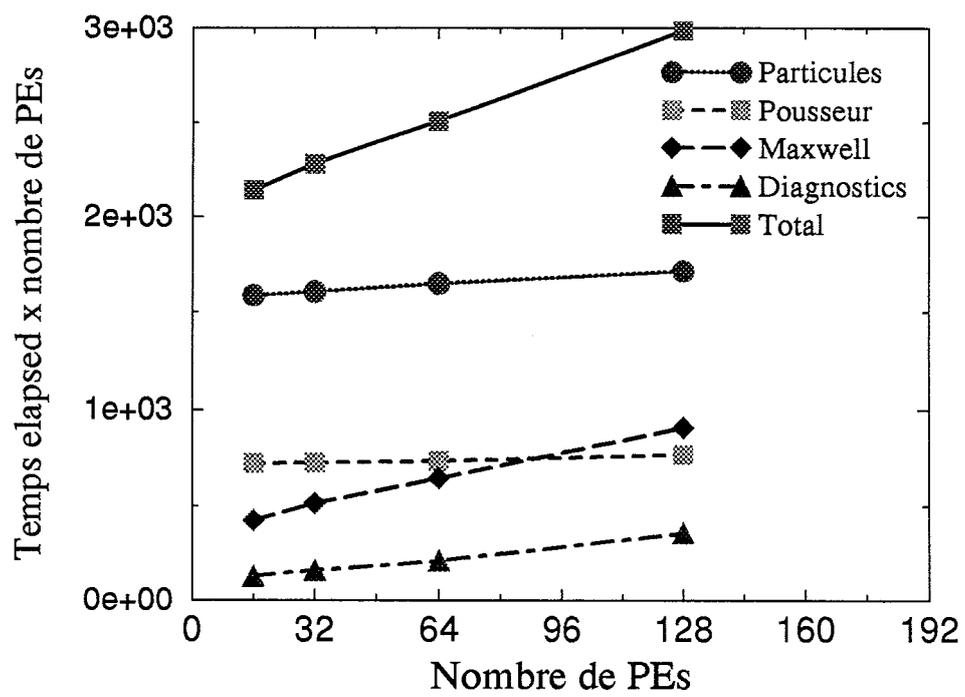


FIG. 3 - *parallélisation*

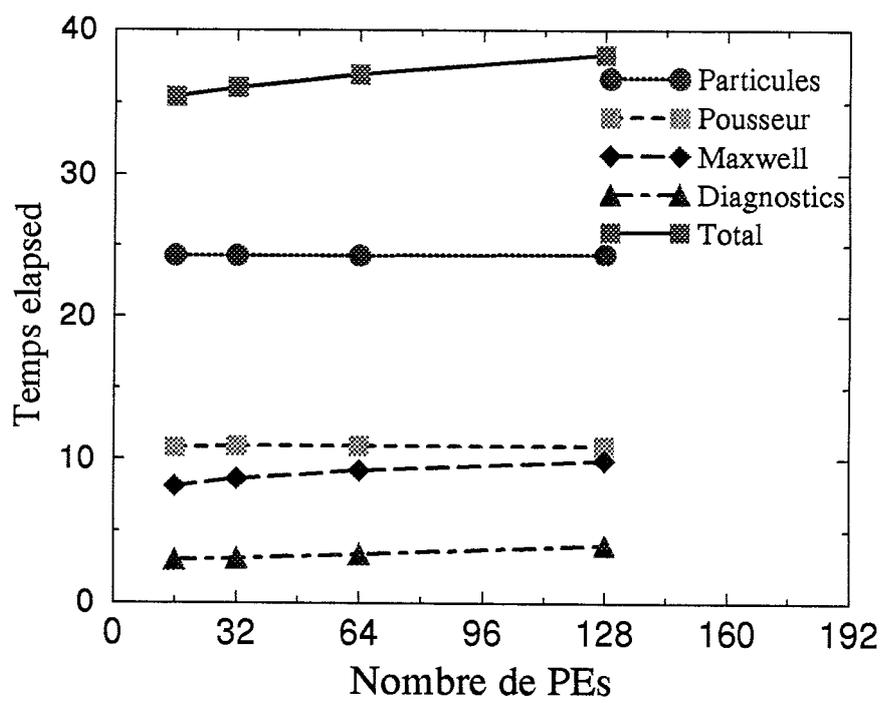


FIG. 4 - "scalability"

3 Modélisation numérique

3.1 Structure des données

Avant de considérer la résolution numérique proprement dite, nous nous proposons de revenir sur les structures de données.

Suivant Birdsall et Langdon [2], page 353, la discrétisation des données en deux dimensions d'espace est :

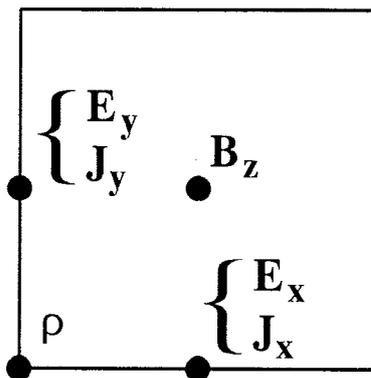


FIG. 5 - Points de discrétisation.

où le couple (\vec{E}, B_z) , avec $\vec{E} = (E_x, E_y)$, est le champ électromagnétique, $\vec{J} = (J_x, J_y)$ est la densité de courant, et ρ est la densité de charge.

A partir de là, on définit un maillage rectangulaire, dit **primal**, de $n_x \times n_y$ mailles. Le pas du maillage est supposé constant dans chaque direction. Il est noté Δx selon Ox et Δy selon Oy .

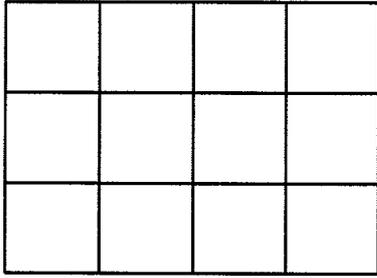
La densité de charge ρ est définie aux sommets du maillage, et en conséquence la structure de données associée est :

$$\rho(0 : n_x; 0 : n_y),$$

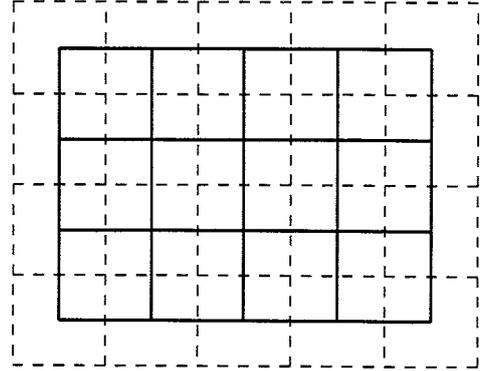
ce qui signifie que ρ est connue par l'intermédiaire d'un tableau bidimensionnel $(\rho_{i,j})_{0 \leq i \leq n_x, 0 \leq j \leq n_y}$

Dans un second temps, on définit le maillage **dual** du premier maillage. Par définition, c'est le maillage qui, d'une part, entoure le maillage primal, et qui, d'autre part, est décalé d'une demi-maille dans chaque direction.

Ce maillage dual est composé de $(n_x + 1) \times (n_y + 1)$ mailles.



Maillage primal



Maillage dual

FIG. 6 - *Maillages.*

Les quantités E_x , J_x , E_y , J_y et B_z sont définies sur le maillage **dual**. Les valeurs sont connues au milieu des arêtes (verticales) pour E_x et J_x , au milieu des arêtes (horizontales) pour E_y et J_y , et aux sommets pour B_z . On constate aisément que, d'après la Figure 5 :

$$E_x, J_x(0 : n_x + 1; 0 : n_y), \quad E_y, J_y(0 : n_x; 0 : n_y + 1), \quad B_z(0 : n_x + 1; 0 : n_y + 1).$$

Les maillages et les structures de données sont bien sûr définis pour le problème dans sa totalité. Lors d'une exécution sur machine parallèle, on découpe celui-ci en un certain nombre de sous-problèmes. Dans **Manet**, on procède à un découpage du maillage d'origine en bandes horizontales, avec un sous-problème par processeur. En ce qui concerne le maillage primal, on opère comme suit.

Les interfaces sont dédoublées, ce qui signifie que la valeur de ρ sur ces interfaces est doublée. Si on pose $n'_y = n_y/p$, où p est le nombre de sous-domaines, on a :

$$\rho(\cdot; n'_y)|_{ss-dom\ k-1} = \rho(\cdot; 0)|_{ss-dom\ k}.$$

A partir du découpage précédent, on obtient le découpage associé :

Remarque : Dans le code **Manet**, on appelle lmx la quantité $n'_x + 1$ et lmy la quantité $n'_y + 1$, ce qui est donc le nombre de mailles du maillage dual par sous-domaine dans chaque direction.

En termes de maillage dual, il y a donc recouvrement de **une** maille. Par exemple :

$$\begin{aligned} E_y(\cdot; n'_y)|_{ss-dom\ k-1} &= E_y(\cdot; 0)|_{ss-dom\ k}, \\ E_y(\cdot; n'_y + 1)|_{ss-dom\ k-1} &= E_y(\cdot; 1)|_{ss-dom\ k}. \end{aligned}$$

Ce type de relation gouverne les échanges de données dans le code.

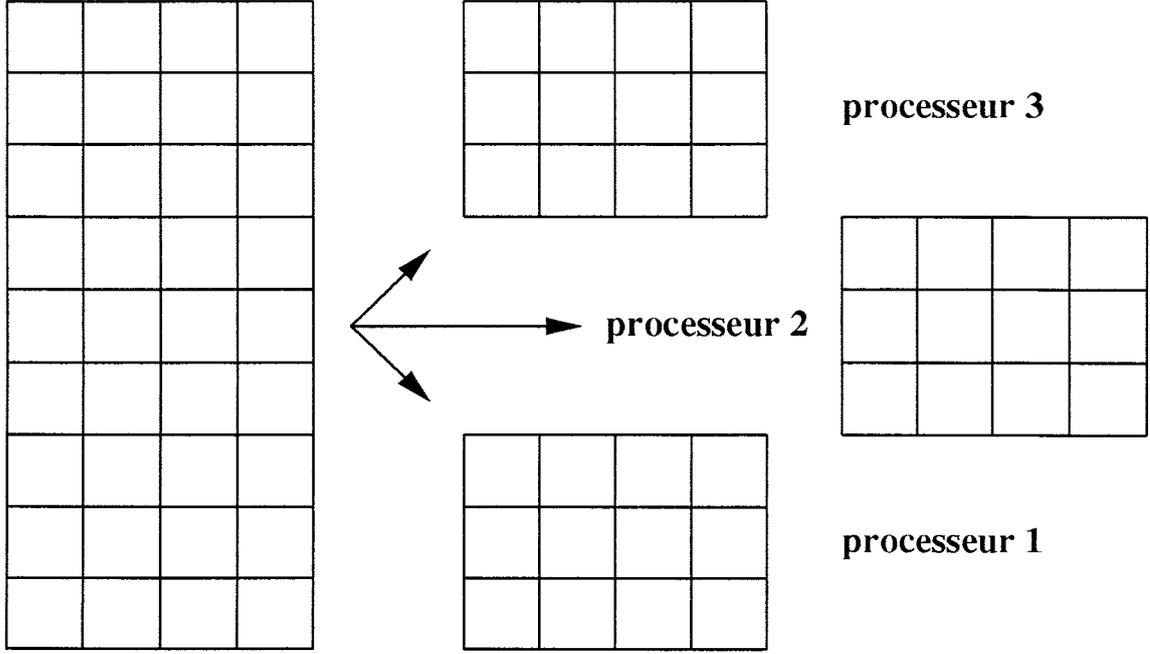


FIG. 7 - Découpage du maillage primal.

3.2 Schémas numériques

On suit ici Birdsall et Langdon [2], pages 352-354, et Adolf [1] pour la résolution numérique des équations de Maxwell. Dans le vide (en 2d), elles peuvent s'écrire (en unités plasmas) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial B_z}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} &= 0, \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \vec{\text{rot}} B_z &= -\vec{J}, \\ \text{div } \vec{E} &= \rho.\end{aligned}$$

Le schéma numérique pour la discrétisation en temps de ces équations est de type Sautemouton (voir la Figure 5 pour les lieux de discrétisation en espace). Ceci donne, pour un pas en temps Δt :

$$\begin{aligned}B_z^{[(n+1/2)\Delta t]} &= B_z^{[(n-1/2)\Delta t]} - \Delta t (\text{rot } \vec{E})^{[n\Delta t]}, \\ \vec{E}^{[(n+1)\Delta t]} &= \vec{E}^{[n\Delta t]} + \Delta t (\vec{\text{rot}} B_z)^{[(n+1/2)\Delta t]} - \Delta t \vec{J}^{[(n+1/2)\Delta t]}.\end{aligned}$$

En espace, on utilise la discrétisation suivante des opérateurs du premier ordre.

Pour un sommet indexé (i, j) du maillage dual ($1 \leq i \leq n_x, 1 \leq j \leq n_y$) :

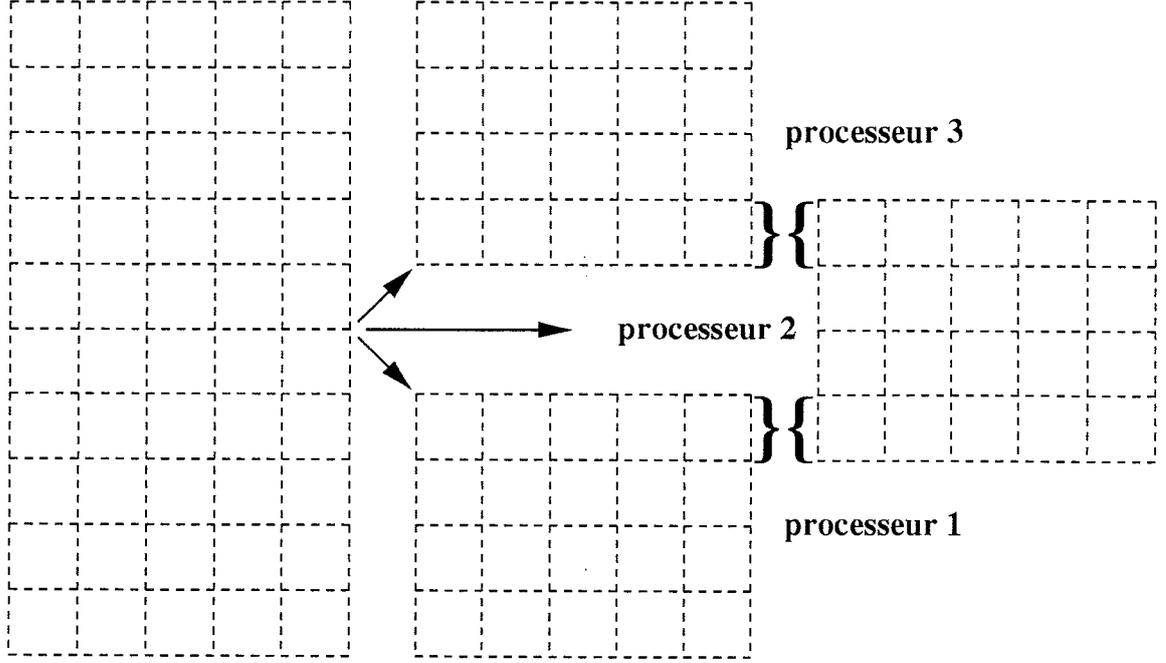


FIG. 8 - Découpage du maillage dual.

$$(\text{rot } \vec{E})(i, j) = \frac{1}{\Delta x} (E_y(i, j) - E_y(i-1, j)) - \frac{1}{\Delta y} (E_x(i, j) - E_x(i, j-1)).$$

Pour une arête verticale indexée (i, j) du maillage dual ($0 \leq i \leq n_x + 1, 0 \leq j \leq n_y$):

$$(\text{rot}_x B_z)(i, j) = (B_z(i, j+1) - B_z(i, j))/\Delta y.$$

Pour une arête horizontale indexée (i, j) du maillage dual ($0 \leq i \leq n_x, 0 \leq j \leq n_y + 1$):

$$(\text{rot}_y B_z)(i, j) = (B_z(i, j) - B_z(i+1, j))/\Delta x.$$

Enfin, pour un sommet indexé (i, j) du maillage primal ($0 \leq i \leq n_x, 0 \leq j \leq n_y$):

$$\text{div } \vec{E}(i, j) = \frac{1}{\Delta x} (E_x(i+1, j) - E_x(i, j)) + \frac{1}{\Delta y} (E_y(i, j+1) - E_y(i, j)).$$

Ces équations sont fermées par une condition de Silver-Muller d'ordre 0 pour l'onde entrante (sur le bord gauche du domaine). Dans la première version du code [1], ces équations étaient également fermées par des conditions périodiques ou réfléchissantes (conducteur parfait) pour les autres bords. Dans la version actuelle, on a remplacé la condition réfléchissante par une condition absorbante qui est modélisée par la méthode des Couches Parfaitement Adaptées de Bérenger [3] (nous renvoyons à [5] pour un exposé détaillé du modèle). Ainsi, pour le champ électromagnétique, on a le choix entre deux possibilités pour les bords haut, bas et droit :

- bords haut et bas périodiques (axe y), bord droit absorbant.

- bords haut, bas et droit absorbants.

Remarque : la périodicité en y implique de prendre un plasma de hauteur égale à celle du domaine lors d'une simulation. Pour l'instant, les Couches Parfaitement Adaptées de Bérenger [3] sont définies uniquement pour des problèmes à charge nulle. Aussi, il semble plus cohérent dans la version actuelle du code, de faire en sorte que le plasma ne soit pas au contact direct des bords absorbants, au moins en début de simulation. Cela se traduit, dans le premier cas, par une largeur de plasma plus petite que celle du domaine, dans le second par un plasma de dimensions (hauteur et largeur) strictement plus petites que celles de la boîte.

Concernant le déplacement des particules, on renvoie le lecteur à [2] ou [1].

Cependant, le couplage entre la méthode particulière et la résolution des équations de Maxwell entraîne que l'équation de conservation de la charge n'est pas rigoureusement vérifiée. Ce problème est dû à la procédure d'assignation des charges et des courants de charge sur le maillage, nous renvoyons le lecteur à [2] page 359. Une méthode de correction locale est décrite et discutée en détail au paragraphe suivant.

3.3 Correction de Poisson locale

Dans le schéma numérique utilisé, on ne vérifie pas rigoureusement l'équation de conservation de la charge. C'est pourquoi il est nécessaire d'effectuer une correction de Poisson pour obtenir numériquement :

$$\operatorname{div} \vec{E} = \rho.$$

Il existe *a priori* deux types de méthodes : celle du potentiel correcteur et la méthode dite de Marder. Comme on le verra plus loin (cf paragraphe 3.3.2), elles ne sont pas très différentes l'une de l'autre.

3.3.1 Méthode du potentiel correcteur

L'idée est ici de corriger \vec{E} par $\delta\vec{E}$, de la forme gradient $\vec{grad}(\delta\phi)$ et tel que :

$$\Delta(\delta\phi) = \rho - \operatorname{div} \vec{E}. \quad (1)$$

Le nouveau champ électrique vérifie en conséquence $\operatorname{div}(\vec{E} + \delta\vec{E}) = \rho$. Il convient maintenant d'adjoindre à (1) une condition aux limites. Le choix de celle-ci repose sur l'observation suivante.

ρ est définie aux sommets du maillage primal. Rappelons que pour un sommet indexé (i, j) de ce maillage ($0 \leq i \leq n_x, 0 \leq j \leq n_y$), on a :

$$\operatorname{div} \vec{E}(i, j) = \frac{1}{\Delta x} (E_x(i+1, j) - E_x(i, j)) + \frac{1}{\Delta y} (E_y(i, j+1) - E_y(i, j)).$$

Lorsque le couple (i, j) parcourt $\{0, \dots, n_x\} \times \{0, \dots, n_y\}$, on parcourt exactement les ensembles de valeur $E_x(0 : n_x + 1; 0 : n_y)$ et $E_y(0 : n_x; 0 : n_y + 1)$. Or, il se trouve que l'on "ferme" le domaine de calcul par une condition aux limites périodique ou par des Couches Parfaitement Adaptées [3]. Le premier cas ne pose pas de problème puisqu'on transfère les données d'un bord à l'autre du domaine. Dans le second cas, par contre, on ne doit pas modifier la valeur du champ électrique déjà calculée dans ces couches extérieures au domaine.

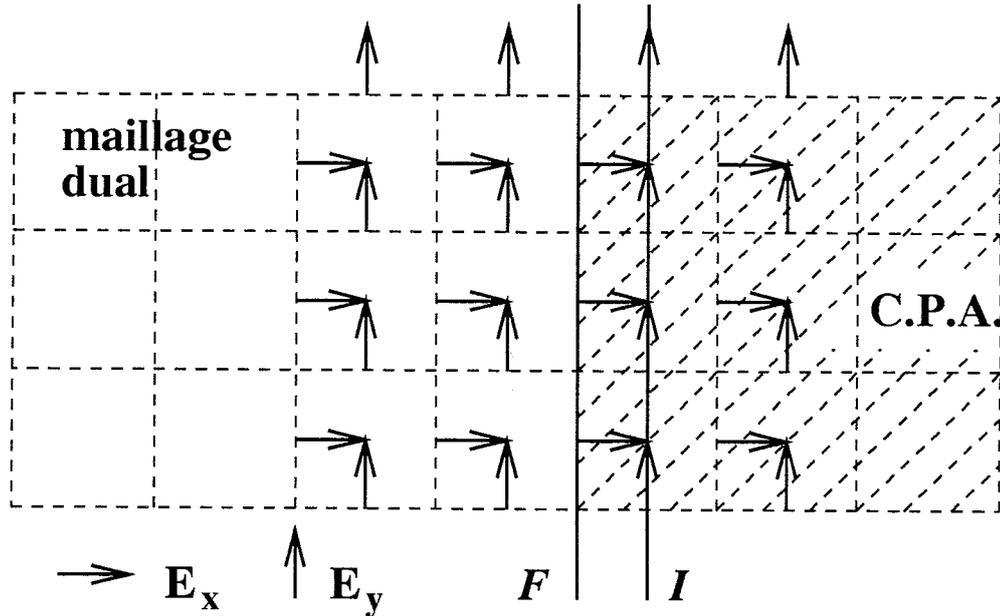


FIG. 9 - Un exemple de Couches Parfaitement Adaptées.

En conséquence, la composante tangentielle de \vec{E} ne doit pas varier sur la ligne d'interface I . Ainsi, si on note $\vec{\nu}$ le vecteur normal (à I) unitaire extérieur et $\vec{\tau}$ le vecteur unitaire tangent (à I) tel que $(\vec{\tau}, \vec{\nu})$ soit direct, on a nécessairement :

$$\vec{\operatorname{grad}}(\delta\phi) \cdot \vec{\tau}_I = 0, \text{ ou } \delta\phi|_I = \text{cste.} \quad (2)$$

Qui plus est, pour les deux types de condition aux limites, on constate sur la Figure 9 (qui s'applique aussi au cas périodique en remplaçant la C.P.A. par le bord gauche), que l'interface I est décalée d'une demi-maille par rapport au maillage dual : elle est donc décalée d'une maille entière par rapport au maillage primal. En termes de structure de données, on doit définir $\delta\phi$ par :

$$\delta\phi(-1 : n_x + 1; -1 : n_y + 1),$$

i. e. sur le maillage primal étendu (maillage primal complété par une maille de chaque côté).

Si par exemple on a une C.P.A. sur le bord droit (cf Figure 9), d'après (2) :

$$\delta\phi(n_x + 1; \cdot) = 0.$$

Si la condition est une condition aux limites périodiques sur les bords bas et haut :

$$\delta\phi(\cdot; -1) = \delta\phi(\cdot; n_y) \text{ et } \delta\phi(\cdot; n_y + 1) = \delta\phi(\cdot; 0).$$

En conclusion, on résout un problème de Laplace sur le maillage primal étendu avec une condition aux limites de type Dirichlet homogène sur tout ou partie du bord (cas de la C.P.A.), et une condition aux limites périodique sur le reste du bord (cas périodique).

A l'intérieur du domaine, après discrétisation de (1), on trouve, pour $0 \leq i \leq n_x$ et $0 \leq j \leq n_y$:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\Delta x^2} (\delta\phi(i-1, j) + \delta\phi(i+1, j)) + 2 \left\{ \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right\} \delta\phi(i, j) \\ & -\frac{1}{\Delta y^2} (\delta\phi(i, j-1) + \delta\phi(i, j+1)) = f(i, j), \text{ avec} \end{aligned} \quad (3)$$

$$f(i, j) = -\rho(i, j) + \frac{1}{\Delta x} (E_x(i+1, j) - E_x(i, j)) + \frac{1}{\Delta y} (E_y(i, j+1) - E_y(i, j)).$$

Remarque : La matrice A associée est symétrique définie positive dès que l'on a une condition aux limites de type Dirichlet homogène sur une partie du bord, et symétrique positive sinon (on ne connaît la solution $\delta\phi$ qu'à une constante près). On contourne le problème en fixant la valeur de $\delta\phi$ en un point.

La résolution directe du problème s'avérant trop coûteuse sur une architecture parallèle, on peut néanmoins utiliser diverses méthodes itératives, parallèles, de résolution. Parmi celles-ci, nous en avons retenu deux :

- La méthode itérative de type Gauss-Seidel avec une numérotation Rouge-Noir.
- La méthode du Gradient Conjugué, avec préconditionnement diagonal.

Avant de détailler les algorithmes, nous définissons D la diagonale de A dont les éléments $(d_{i,j})$ sont tels que

$$d_{i,j} = \frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2}{(\Delta y)^2}, \quad \forall (i, j). \quad (4)$$

Algorithme Gauss-Seidel Rouge-Noir Comme on discrétise le problème par un schéma à cinq points, on peut, pour découpler les nœuds entre eux, les numéroter selon le principe “Rouge-Noir” : les nœuds rouges sont les nœuds repérés par (i_R, j_R) , avec $i_R + j_R \equiv 1 \pmod{2}$, et les nœuds noirs sont repérés par (i_N, j_N) , avec $i_N + j_N \equiv 0 \pmod{2}$. On appelle \mathcal{R} (respectivement \mathcal{N}) l’ensemble des nœuds rouges (respectivement noirs).

Suivant [8], on vérifie aisément que le schéma itératif de Gauss-Seidel se parallélise pour la numérotation Rouge-Noir et on obtient l’algorithme

- $(\delta\phi)^0 = 0$.

- Pour $k = 0, \dots$ jusqu’à convergence

$$\begin{aligned} (\delta\phi)^{k+1/2}(i, j) &= [(\delta\phi)^k + D^{-1}(f - A(\delta\phi)^k)](i, j), \quad \forall (i, j) \in \mathcal{R}, \\ (\delta\phi)^{k+1}(i, j) &= [(\delta\phi)^{k+1/2} + D^{-1}(f - A(\delta\phi)^{k+1/2})](i, j), \quad \forall (i, j) \in \mathcal{N}. \end{aligned}$$

Ici, avoir convergé signifie que l’on a réduit la norme du résidu $f - A(\delta\phi)^k$ d’un facteur suffisant. Dans **Manet**, 5 itérations suffisent pour obtenir une convergence à 10^{-2} près.

Algorithme du Gradient Conjugué Préconditionné Classiquement, on peut accélérer la convergence d’une méthode itérative de résolution en calculant des directions de minimisation de l’erreur orthogonales entre elles. C’est l’idée sous-jacente à la méthode du Gradient Conjugué. Egalement, on peut introduire un préconditionnement pour accélérer la convergence : pour **Manet**, nous nous sommes limités au préconditionnement diagonal, i. e. par D .

L’algorithme est en conséquence

- $(\delta\phi)^0 = 0$.

- $r^0 = f$.

- $z^0 = D^{-1} r^0$.

- $p^0 = z^0$.

- Pour $k = 0, \dots$ jusqu’à convergence

- $\alpha^k = \frac{(r^k, z^k)}{(p^k, A p^k)}$.

- $(\delta\phi)^{k+1} = (\delta\phi)^k + \alpha^k p^k$.

- $r^{k+1} = r^k - \alpha^k A p^k$.

- $z^{k+1} = D^{-1} r^{k+1}$.

- $\beta^k = \frac{(r^{k+1}, z^{k+1})}{(r^k, z^k)}$.

- $p^{k+1} = z^{k+1} + \beta^k p^k$.

Dans ce cas, avoir convergé signifie que l'on a réduit la norme du résidu r^k d'un facteur suffisant. Dans **Manet**, on fixe à 5 le nombre d'itérations.

Notons que l'on peut choisir une valeur initiale différente de $(\delta\phi)^0 = 0$, en panachant les deux méthodes (ou la méthode de Marder). Par ailleurs, de par la répartition des données sur les processeurs (découpage en bandes) et au vu du problème à résoudre (Laplacien), il peut être intéressant d'implémenter la méthode itérative de résolution développée dans [4] (qui repose également sur un découpage en bandes) pour accélérer la vitesse de convergence.

3.3.2 Méthode de Marder

L'idée est maintenant de corriger **itérativement** \vec{E} pour vérifier l'équation de conservation de la charge. Pour cela, on calcule, à partir de $\vec{E}^0 = \vec{E}$:

$$\vec{E}^0 = \vec{E}, \quad (5)$$

$$\text{Pour } k = 1, \dots, m : \quad \vec{E}^k = \vec{E}^{k-1} + \alpha_k \vec{grad} \left(\text{div } \vec{E}^{k-1} - \rho \right), \quad (6)$$

$$\text{avec } \alpha_k = \frac{1}{\frac{2}{(\Delta x)^2} + \frac{2}{(\Delta y)^2}} \cos \left(\frac{(k-1)\pi}{2m} \right). \quad (7)$$

Ici, m est le nombre d'itérations de la méthode, dont une valeur est fixée par défaut ($m = 5$ dans la version actuelle de **Manet**).

Remarque: Comme on va le voir dans la suite, la correction de Marder est une méthode de potentiel correcteur.

Cette correction est effectuée sur le maillage dual. Encore une fois, il reste à résoudre le problème de la condition aux limites. Bien évidemment, si la condition aux limites est périodique, il suffit comme précédemment (cf paragraphe 3.3.1) de communiquer les données d'un bord à l'autre. Si par contre la condition aux limites est discrétisée par une Couche Parfaitement Adaptée, le champ est une **donnée** sur la frontière (voir la Figure 9). Cette donnée est calculée à l'aide de la valeur de B_z et de celle de \vec{J} par l'intermédiaire de la relation de Maxwell-Ampère

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \vec{rot} B_z = -\vec{J}.$$

Sur F , \vec{E} et \vec{J} sont connues par leurs valeurs normales. Maxwell-Ampère s'écrit donc

$$\frac{\partial(\vec{E} \cdot \vec{\nu})}{\partial t} - (\vec{rot} B_z) \cdot \vec{\nu} = -\vec{J} \cdot \vec{\nu}.$$

Ainsi, en remarquant que $(\vec{rot} B_z) \cdot \vec{\nu} = -\partial B_z / \partial \tau$, la condition aux limites est

$$\frac{\partial(\vec{E} \cdot \vec{\nu})}{\partial t} \Big|_F = \left(-\frac{\partial B_z}{\partial \tau} - \vec{J} \cdot \vec{\nu} \right) \Big|_F. \quad (8)$$

On peut alors discrétiser (6) sur tout le maillage dual.

Plus généralement, (6) suggère le commentaire suivant : la correction apportée à \vec{E}^{k-1} l'est sous la forme d'un gradient et elle peut donc être réécrite

$$\begin{aligned} \text{Pour } k = 1, \dots, m : \quad \vec{E}^k &= \vec{E}^{k-1} + \vec{grad}(\delta\psi)^k, \text{ ou} \\ \vec{E}^k &= \vec{E} + \vec{grad}(\delta\phi)^k, \text{ avec } (\delta\phi)^k = \sum_{l=1}^{l=k} (\delta\psi)^l. \end{aligned}$$

Par récurrence, on en déduit immédiatement que la suite $((\delta\phi)^k)_{0 \leq k \leq m}$ satisfait à

$$(\delta\phi)^0 = 0, \text{ et} \quad (9)$$

$$\text{pour } k = 1, \dots, m : \quad (\delta\phi)^k = (\delta\phi)^{k-1} + \alpha_k \left(\left\{ \text{div } \vec{E} - \rho \right\} - \Delta(\delta\phi)^{k-1} \right). \quad (10)$$

Dans (10), la valeur de α_k est celle donnée par (7).

Si l'on passe à la forme discrétisée du problème, on peut faire quelques commentaires additionnels.

On a vu que les éléments diagonaux $(d_{i,j})$ de la matrice A sont tous identiques (voir (4)). En conséquence, on peut réécrire (10) composante par composante, pour $k = 1, \dots, m$ et pour tout (i, j) , sous la forme

$$\begin{aligned} (\delta\phi)^k(i, j) &= [(\delta\phi)^{k-1} + \omega_k D^{-1} (f - A(\delta\phi)^{k-1})](i, j), \\ \text{avec } \omega_k &= \cos\left(\frac{(k-1)\pi}{2m}\right), \end{aligned} \quad (11)$$

où D est la diagonale de A . En d'autres termes, cf [8], (9)-(10) ou (11) n'est rien d'autre qu'un schéma itératif de type Jacobi avec amortissement pour résoudre le problème (1) : la correction de Marder est une méthode itérative de potentiel correcteur.

Pour que la méthode converge, on peut vérifier (voir [8]) qu'il est nécessaire que les coefficients $(\omega_k)_{1 \leq k \leq m}$ soient tels que $|\omega_k| < 1$, ce qui est le cas dès que $k > 1$.

Remarque : Numériquement, on sait que la méthode itérative de Jacobi permet d'amortir les hautes fréquences au bout de quelques itérations, ce qui pourrait expliquer le bon comportement de la méthode de Marder. Néanmoins, ce résultat est connu lorsque ω_k reste constant et éloigné de zéro (par exemple $\omega_k = 1/2$ pour tout k), et le fait que les coefficients ω_k décroissent et tendent vers zéro nuance cette appréciation pour la méthode de Marder.

3.4 Condition au bord pour les champs

Le choix des conditions aux bords dans **Manet** donne lieu à deux possibilités pour fermer le domaine de calcul, comme on peut le voir sur la figure 10.

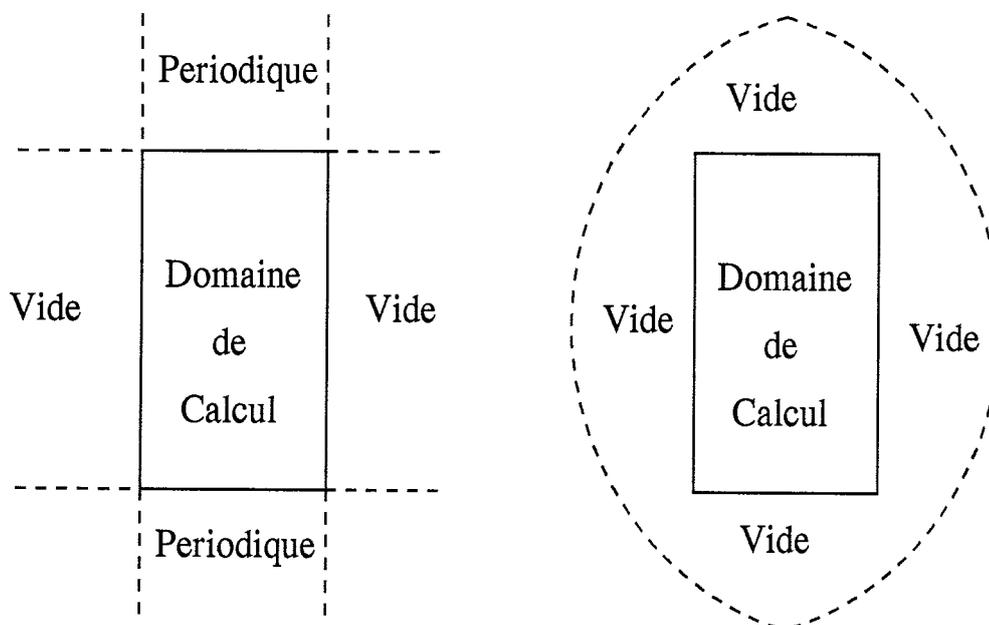


FIG. 10 - Fermeture du domaine de calcul

Dans les deux cas, nous remarquons la présence de vide qui s'étend à l'infini. Le domaine de calcul étant fini, il s'agit de fermer les équations de Maxwell de façon à obtenir l'équivalence suivante :

$$\begin{array}{l}
 \text{Intérieur} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_z}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} = 0 \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \vec{rot} B_z = -\vec{J} \\ \text{div } \vec{E} = \rho \end{array} \right. \\
 \\
 \text{Extérieur} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_z}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} = 0 \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \vec{rot} B_z = \vec{0} \\ \text{div } \vec{E} = 0 \end{array} \right. \\
 \\
 \text{Intérieur} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_z}{\partial t} + \text{rot } \vec{E} = 0 \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \vec{rot} B_z = -\vec{J} \\ \text{div } \vec{E} = \rho \end{array} \right. \\
 \\
 \text{+ conditions aux bords}
 \end{array}
 \quad \Leftrightarrow$$

Manet utilise le modèle des Couches Parfaitement Adaptées (CPA) de Bérenger [3] pour fermer le domaine. Dans [3], Bérenger s'intéresse à la propagation d'ondes électromagnétiques dans un milieu sans présence de matière, c'est-à-dire tel que ρ , et par conséquent \vec{J} , sont partout nuls. On définit alors les CPA afin d'absorber toute onde électromagnétique, quelle que soit son incidence (oblique ou non), aux bords du domaine où elles sont appliquées.

Une différence fondamentale dans notre cas est la présence de matière à l'intérieur du domaine de calcul. Les électrons et les ions du plasma créent alors des densités de charge et de courant non nulles.

A priori, si cette densité de charge est non nulle au bord, un champ électrique existe près du bord. En première approximation, on peut cependant supposer que les variations temporelles de la charge sont négligeables et que la variation spatiale de cette charge est faible. On se propose alors de lisser les valeurs de la charge dans les mailles voisines du bord.

Par la suite, il conviendra d'extrapoler la valeur de ρ dans les CPA, afin de généraliser la méthode de Bérenger au cas d'une charge statique non nulle.

3.5 Condition au bord pour les particules

Dans la version précédente de **Manet**, l'utilisateur avait le choix entre trois types de condition au bord pour les particules :

- périodique
- réflexion
- absorption

Une quatrième possibilité a été implémentée, en suivant l'idée de [7] : les particules qui touchent le bord sont réinjectées avec leur température initiale.

4 Un exemple de simulation

Nous présentons un exemple d'interaction entre une onde laser et un plasma surcritique. S'inspirant de [5], les paramètres du plasma sont :

$$n_e = 15 n_c; T_e = T_i = 5 \text{ keV}; m_i / m_e = 1836$$

Le domaine de calcul est choisi périodique suivant y avec une hauteur de $32.2 c / \omega_0$, ouvert suivant x avec une longueur de $25.2 c / \omega_0$. Le plasma est une couche dont la hauteur est celle du domaine de calcul, centrée en x et de longueur $7 c / \omega_0$. Ceci permet d'avoir environ $9.5 c / \omega_0$ de vide de chaque côté de la tranche de plasma suivant l'axe des x .

En calculant une longueur de Debye électronique de $0.025 c / \omega_0$, on choisit pour les pas d'espace Δx et Δy une valeur de $0.021 c / \omega_0$, et pour le pas de temps Δt une valeur de $0.014 \omega_0^{-1}$; de cette façon les conditions de stabilité numérique sont remplies.

L'onde laser a un éclairement maximal $I \lambda_0^2 = 2.2 \cdot 10^{19} \text{ W} \mu\text{m}^2 / \text{cm}^2$ de profil transverse gaussien de largeur à mi-hauteur $15 c / \omega_0$. L'impulsion dure $210 \omega_0^{-1}$ après une montée linéaire en $6 \omega_0^{-1}$. La durée totale de la simulation est de $280 \omega_0^{-1}$.

Le plasma possède des bords à montées linéaires, sur $0.25 c / \omega_0$. Les bords gauche et droit sont absorbants pour les particules, le bord droit est absorbant pour le champ électromagnétique.

La figure suivante présente à différents instants de la simulation les cartes de la densité ionique. Pour plus de clarté, nous avons dilaté deux fois l'axe des x afin de visualiser la partie la plus significative de la densité. Notons que les longueurs sont en unité plasma. Le temps s'écoule de gauche à droite et de haut en bas dans cet ordre, en prenant comme valeurs :

$$t = 112; 168; 224; 280 \omega_0^{-1}$$

Comme on pouvait s'y attendre, l'éclairement laser est d'intensité suffisante pour enfoncer le plasma surcritique. Ce qui est remarquable, c'est la formation de bulles de densité sous l'effet du gradient de densité à l'entrée du plasma et de la pression de l'onde. Cette instabilité de type Rayleigh-Taylor est à comparer aux résultats de [7].

Remarque: cette figure a été réalisée avec Psyché V2.0.

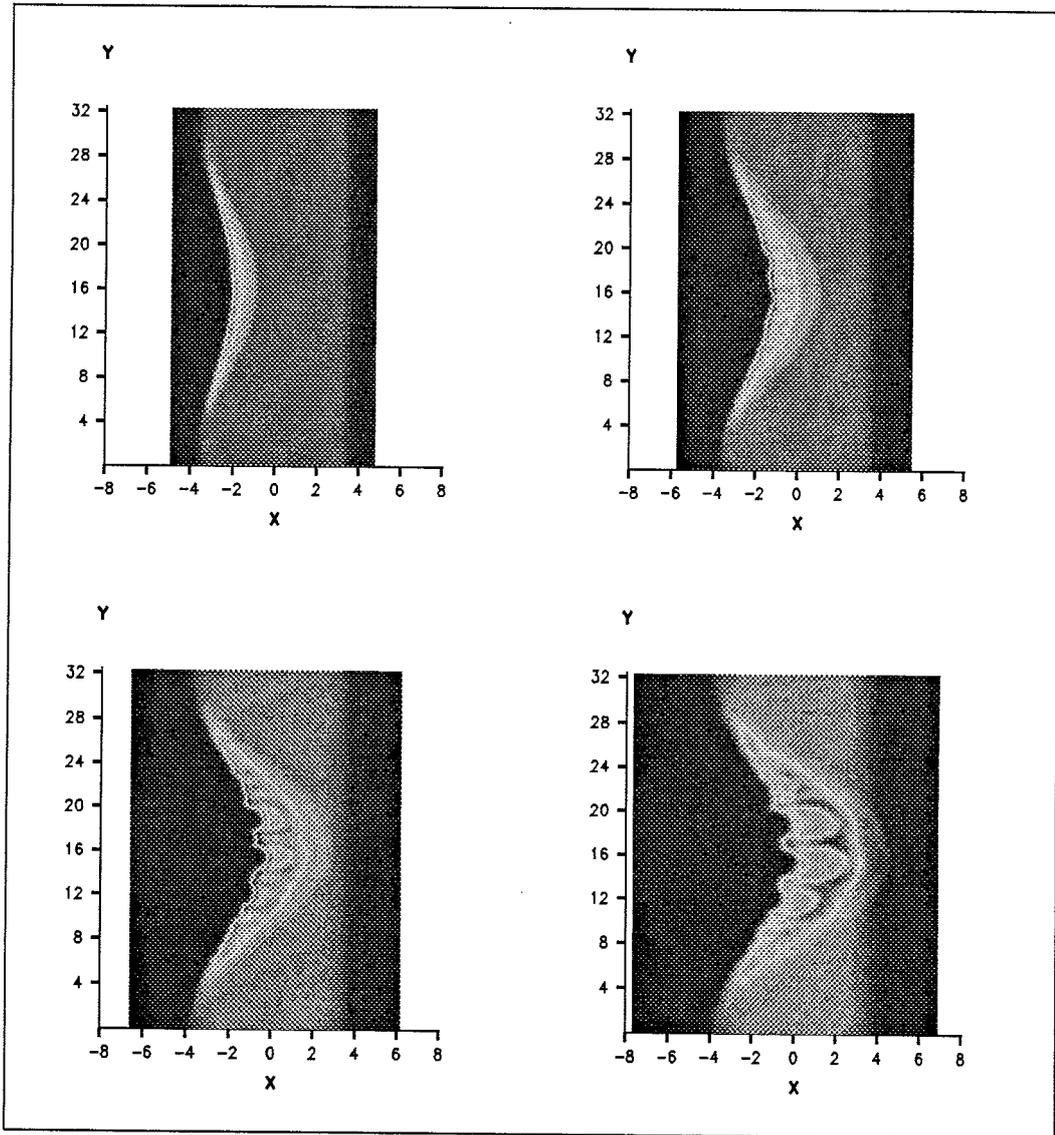


FIG. 11 - *Evolution de la densité ionique du plasma au cours du temps*

Perspectives

Concernant la correction de Poisson locale et le système de protection-reprise, nous avons répondu aux demandes de [5]. Pour un modèle simple de collisions, au sens de la mise en oeuvre informatique, l'approche de [6] semble la mieux adaptée dans un premier temps.

La mise en place sous CVS donne à **Manet** un caractère plus professionnel, plusieurs développeurs pouvant travailler simultanément tout en tenant à jour les modifications apportées au code.

L'effet double des optimisations apportées au code et du passage sous T3E nous a permis de gagner un facteur proche de cinq en vitesse d'exécution. Ceci permet d'envisager soit des simulations de tailles ou de durées plus longues, soit des simulations en plus grand nombre dans le cadre d'une étude systématique.

Le passage en FORTRAN 90 donne une meilleure lisibilité et une meilleure modularité au code. Néanmoins, la modularité de **Manet** pourrait être encore augmentée, ce qui serait utile pour de futurs développements. Par exemple la partie particulière du code serait facilement transposable en trois dimensions, ainsi que le modèle des couches parfaitement adaptées.

Enfin, l'extension du modèle des couches parfaitement adaptées en présence d'une charge non nulle nous semble essentiel. Ainsi, dès qu'il y a un gradient de densité ionique près d'un bord absorbant, il risque de se produire des effets de charge statique non négligeables, qui ne seraient pas correctement pris en compte par la fermeture actuelle des équations de Maxwell.

Références

- [1] A. Adolf. MANET. Un code particulaire de résolution des équations de Vlasov-Maxwell en 2D structuré pour machine massivement parallèle. *Rapport CEA/DAM/CELV/DMA/MCN DO 2744/95*, 1995.
- [2] C. K. Birdsall et A. B. Langdon. *Plasma physics via computer simulation*. Mc Graw-Hill, New York, U.S.A., 1985.
- [3] J.-P. Bérenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.*, Vol. 114, pp 185–200, 1994.
- [4] Patrick Ciarlet. *Etude de préconditionnements parallèles pour la résolution d'équations aux dérivées partielles elliptiques. Une décomposition de l'espace $L^2(\Omega)^3$* . Thèse de l'Université Pierre et Marie Curie, 1992.
- [5] E. Lefebvre, J. Chave et P. Bain. Code particulaire 2D MANET: développements et simulation-test de l'interaction laser-plasma. *Rapport CEA/DRIF/DPTA/PPE DO 35/97*, 1997.
- [6] T. Takizuka et H. Abe. A binary collision model for plasma simulation with a particle code. *J. Comput. Phys.*, Vol. 25, pp 205–219, 1977.
- [7] S. C. Wilks, W. L. Kruer, M. Tabak et A. B. Langdon. Absorption of ultra-intense laser pulses. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, No. 9, pp 1383–1386, 1992.
- [8] Jinchao Xu. *Multilevel methods for solving partial differential equations*. Ecole d'été d'Analyse Numérique, CEA-INRIA-EDF, 1997.

Ceci est une courte introduction a Concurrent Version System (CVS), dans le cadre du developpement du code Fortran90 - PVM "Manet".

P. Blaise 12/02/97

I. INTRODUCTION - MISE EN PLACE DE L'ENVIRONNEMENT

CVS est un produit GNU. Tout ce qui concerne CVS, (binaires, man pages, docs), se trouve dans l'arborescence /usr/local/gnu/(bin/, man/, divers/).

Je vous conseille des maintenant d'ajouter a votre environnement le produit GNU grace a la commande "xchoix_pdts" interne. Vous accederez ainsi directement aux binaires et aux pages du manuel CVS.

Pour une description detaillee, l'utilisateur pourra se referer au manuel postscript "Version Management with CVS" qui se trouve dans le repertoire /usr/local/gnu/divers/ fichier compresse "cvs.ps.gz", ou a l'aide en ligne "man cvs".

CVS est une surcouche de RCS (Revision Control System). La difference principale est la gestion des sous-repertoires et la possibilite d'edition simultanee d'un meme fichier par plusieurs utilisateurs.

CVS maintient une copie du code source Manet. Elle se trouve dans le repertoire ~manet/CVS/manet qui contient les repertoires

Autres_Modeles/ Cas/ Maxwell_Vlasov/ Notes/ Vieux_Fichiers/

Dans ces repertoires se trouvent les fichiers qui composent la version officielle du code Manet :

- . Maxwell_Vlasov : sources, makefile du code Manet
- . Autres_Modeles : sources des modeles fluides
- . Cas : fichiers cas de simulation

Ces fichiers sont proteges en ecriture : ATTENTION ! pour respecter le bon usage de CVS il est deconseille de modifier les protections.

b. Inclusion de fichiers dans la version officielle : cvs commit fichier
~ ~

Si par exemple vous decidez d'editer le fichier

```
$HOME/manet/Maxwell_Vlasov/creapa.f90
```

placez-vous dans ce repertoire puis editez. Une fois le travail d'edition fini, il vous faut inclure dans la version maintenue par CVS votre propre version du fichier, avec de preference un petit commentaire specifiant les modifications effectuees sur "creapa.f90" . Pour ce faire, entrez la commande :

```
cvs commit -m "Correction d'un bug dans creapa.f90" creapa.f90
```

CVS va tenter d'enregistrer la nouvelle version de creapa.f90 .
Si l'operation est un succes, CVS modifiera le fichier correspondant

```
~manet/CVS/manet/Maxwell_Vlasov/creapa.f90,v
```

dans lequel apparaitront les modifications apportees, l'auteur ainsi que la date de modification, et enfin le commentaire de modification.

Pour tout fichier modifie il faut executer la commande CVS commit :
on a le choix de le faire fichier par fichier comme precedemment
ou globalement pour un ensemble de fichiers

```
cvs commit -m "Nouveau fichier include" fichier1 fichier2 fichier3
```

N.B. : Si vous omettez l'option -m, vous entrerez dans un editeur
de texte vous demandant de taper un commentaire.

c. Probleme lors de l'inclusion : cvs update fichier
~ ~

Il se peut qu'a l'issue de la commande CVS commit il soit impossible de prendre immediatement en compte vos modifications. La raison est qu'un autre utilisateur a modifie le meme fichier, et l'a precedemment inclus avec un commit. Utilisez alors

```
cvs update fichier
```

pour obtenir dans le fichier les differences avec la version du collegue.

update : mise a jour d'un fichier de la version officielle
dans votre version
remove : destruction d'un fichier (a confirmer par un commit)
add : addition d'un fichier (a confirmer par un commit)
release -d : fin du travail - verification de tous les commit

c. Commandes complementaires

diff : differences entre votre fichier et la version officielle
log : numeros de version, dates, auteurs, commentaires
status : statut du fichier par comparaison au numero de version officiel

Annexe: Résolution des équations d'Euler, couplées aux équations de Maxwell.

rédigée par P. Bain et R. Sentis

December 22, 1997

Introduction

Rappelons que dans un plasma constitué de deux espèces, électrons et ions, le temps caractéristique des électrons est égal à l'inverse ω_{pe}^{-1} de la fréquence plasma ω_{pe} ($\omega_{pe} = C^{re} N^{1/2}$ où N désigne la densité électronique). Ce temps est de l'ordre de grandeur de la fréquence laser pour une densité électronique légèrement sous-critique (et égale pour la densité critique) et est très petit comparé au temps caractéristique des ions (ils sont dans le rapport $\sqrt{\frac{m_e}{m_i}}$).

Si l'on s'intéresse à des effets cinétiques électroniques fins, le comportement des électrons doit être décrit par une équation de Vlasov. Cependant, pour modéliser schématiquement l'interaction entre l'onde laser et les ondes plasma électroniques (problème de diffusion Raman), on peut se placer à l'échelle de temps électronique et faire l'hypothèse que les électrons sont à l'équilibre thermodynamique ; ceci permet en effet d'accélérer le calcul si l'on souhaite regarder l'évolution ces phénomènes sur des échelles de temps longues par rapport à ω_{pe}^{-1} . Dans ce cadre, les électrons ont une distribution Maxwellienne et leur comportement peut être modélisé par des équations fluides du type des équations d'Euler. Ce type de modèle est classique, voir par exemple [BB]. Par ailleurs, les ions peuvent être traités par un modèle cinétique, leur fonction de distribution étant solution d'une équation de Vlasov.

Remarque: Le temps de collision des électrons entre eux est égal à τ_e on a (avec $\Lambda \simeq \frac{4\pi}{3} N^{-1/2} (\epsilon_0 k T e^{-2})^{3/2}$):

$$\tau_e^{-1} = (\log \Lambda) N e^4 \left[8\pi \epsilon_0^2 m_e^{1/2} (kT)^{3/2} \right]^{-1} \ll \omega_{pe}$$

A priori, il faudrait se placer à l'échelle de τ_e^{-1} pour pouvoir supposer que les électrons sont Maxwelliens, mais s'ils sont Maxwelliens initialement, alors on peut faire l'hypothèse qu'ils restent Maxwelliens sur les échelles de temps de ω_{pe}^{-1} sans faire une erreur trop importante. \square

Dans cette annexe, on décrit une méthode de résolution des équations d'Euler complètes (le schéma serait du même type avec les équations d'Euler isentropiques) couplées avec les équations de Maxwell.

On se place en géométrie bidimensionnelle plane (x, y) avec une onde électromagnétique ayant la polarisation p.

Notations

On note $m_e, e_0, c, k, \epsilon_0$ les constantes classiques: masse et charge de l'électron, vitesse de la lumière, constante de Boltzmann, permittivité du vide

N : la densité électronique

U : la vitesse électronique

u, v : les deux composantes selon x, y de U

T : la température électronique

$P = NkT$: la pression électronique

$V_T = (kTm_e^{-1})^{1/2}$: la vitesse thermique des électrons.

E, B : les champs électrique et magnétique, $E = (E_x, E_y)$

ω_0 : la fréquence de l'onde laser

$\omega_{pe} = \left(\frac{Ne_0^2}{m_e \epsilon_0}\right)^{1/2}$: la fréquence plasma

1 Etablissement du modèle

Les équations fluides

En présence d'un champ électromagnétique, les équations d'Euler modélisant l'évolution des électrons s'écrivent, en deux dimensions d'espace:

$$\partial_t \mathbf{W} + \partial_x F(\mathbf{W}) + \partial_y G(\mathbf{W}) = S(\mathbf{W}, E, B) \quad (1)$$

avec

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} N \\ Nu \\ Nv \\ N\mathcal{E} \end{pmatrix} \quad F(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} Nu \\ Nu^2 + P/m_e \\ Nu v \\ Nu\mathcal{E} + uP/m_e \end{pmatrix} \quad G(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} Nv \\ Nu v \\ Nv^2 + P/m_e \\ Nv\mathcal{E} + vP/m_e \end{pmatrix}$$

où \mathcal{E} est l'énergie totale électronique :

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}|U|^2 + \frac{3}{2}kT/m_e$$

Le second membre des équations de quantité de mouvement et d'énergie :

$$S(\mathbf{W}, E, B) = \frac{e_0}{m_e} \begin{pmatrix} 0 \\ -N(\mathbf{E} + \mathbf{U} \times \mathbf{B}) \\ -NUE \end{pmatrix} = \frac{e_0}{m_e} \begin{pmatrix} 0 \\ -N(E_x + vB) \\ -N(E_y - uB) \\ -N(uE_x + vE_y) \end{pmatrix}$$

fait intervenir les champs E_x, E_y, B qui sont solutions des équations de Maxwell.

Les équations de Maxwell

Les équations de Maxwell en géométrie bidimensionnelle s'écrivent

$$\begin{aligned} \partial_t B + \partial_x E_y - \partial_y E_x &= 0 \\ \partial_t E_x - c^2 \partial_y B &= \frac{e_0}{\epsilon_0} (Nu) \\ \partial_t E_y + c^2 \partial_x B &= \frac{e_0}{\epsilon_0} (Nv) \end{aligned} \quad (2)$$

Il faut rajouter l'équation de Poisson:

$$\partial_y E_y + \partial_x E_x = \frac{e_0}{\epsilon_0} (N - ZN^{ion})$$

On suppose que la charge des ions est égale à Z et (pour présenter le schéma numérique de façon simple) que la densité ionique N^{ion} est indépendante du temps (on a $N^{ion} = \int f(x, w) dw$ si f est la densité des ions dans l'espace des phases).

2 Principe de la résolution temporelle

Dans le cadre d'un modèle Euler-Poisson (c'est à dire que les équations de Maxwell sont remplacées par un modèle électrostatique avec seulement une équation de Poisson) il est nécessaire de traiter le champ électrique de façon implicite (voir par exemple [Fa]). De même, dans le cadre unidimensionnel pour Euler-Maxwell, on montre dans ([Fa]) qu'il faut évaluer à chaque pas de temps le champ électrique après avoir calculé l'impulsion électronique.

On utilisera pour Maxwell le schéma saute-mouton classique selon l'algorithme de Langdon-Lasinski. Le principe du schéma retenu s'inspire de celui proposé dans [BB]. La méthode se traduit par le schéma suivant en notant par n , $^{n+1/2}$ et $^{n+1}$ les quantités au début, au milieu et à la fin du pas de temps. Sur un pas de temps, on opère en 4 étapes

- Résolution des équations d'Euler sans terme de couplage

$$\begin{aligned}\partial_t N + \partial_x(Nu) + \partial_y(Nv) &= 0 \\ \partial_t(Nu) + \partial_x(Nu^2 + P/m_e) + \partial_y(Nuv) &= 0 \\ \partial_t(Nv) + \partial_x(Nuv) + \partial_y(Nv^2 + P/m_e) &= 0 \\ \partial_t(N\mathcal{E}) + \partial_x(Nu\mathcal{E} + uP/m_e) + \partial_y(Nv\mathcal{E} + vP/m_e) &= 0\end{aligned}$$

Ce qui permet de passer des valeurs $(\bullet)^n$ aux valeurs $(\tilde{\bullet})$

- Résolution des équations de Maxwell en tenant compte du courant (\widetilde{Nu}) , (\widetilde{Nv}) pour passer de E^n et $B^{n+1/2}$ à E^{n+1} et $B^{n+3/2}$
- Résolution de l'accélération due aux champs électromagnétiques

$$\begin{aligned}\partial_t Nu &= -\frac{e_0}{m_e} NE_x \\ \partial_t Nv &= -\frac{e_0}{m_e} NE_y\end{aligned}$$

puis

$$\begin{aligned}\partial_t Nu &= -\frac{e_0}{m_e} NvB \\ \partial_t Nv &= \frac{e_0}{m_e} NuB\end{aligned}$$

avec les champs électrique et magnétique calculés précédemment et centrés en $n + 1/2$, ce qui permet de passer des valeurs $(\tilde{\bullet})$ aux valeurs $(\bullet)^{n+1}$

- Termes source dans l'équation d'énergie.

3 Discrétisation spatiale des équations d'Euler et de Maxwell

On se place dans le cadre d'un maillage bidimensionnel rectangulaire de maille $]x_i, x_{i+1}[\times]y_i, y_{i+1}[$. Les densités, impulsion et énergie \mathcal{E} sont évaluées sur les noeuds du maillage primal.

3.1 Discrétisation spatiale des équations d'Euler

Les équations d'Euler sans second membre sont discrétisées par une méthode de Volumes finis.

$$\begin{aligned}\tilde{N}_{i,j} - N_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2,j}^N - f_{i-1/2,j}^N) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (g_{i,j+1/2}^N - g_{i,j-1/2}^N) &= 0 \\ (\widetilde{Nu})_{i,j} - (Nu)_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2,j}^u - f_{i-1/2,j}^u) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (g_{i,j+1/2}^u - g_{i,j-1/2}^u) &= 0 \\ (\widetilde{Nv})_{i,j} - (Nv)_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2,j}^v - f_{i-1/2,j}^v) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (g_{i,j+1/2}^v - g_{i,j-1/2}^v) &= 0 \\ (\widetilde{NE})_{i,j} - (NE)_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2,j}^{\mathcal{E}} - f_{i-1/2,j}^{\mathcal{E}}) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (g_{i,j+1/2}^{\mathcal{E}} - g_{i,j-1/2}^{\mathcal{E}}) &= 0\end{aligned}$$

où f^* et g^* sont les flux numériques de densité, de quantités de mouvement et d'énergie à travers les facettes du maillage dual.

Pour résoudre ces équations nous avons choisi d'utiliser des schémas de type Lagrange + projection: le schéma P.V.U. (Pecular Velocity Upwind) modifié par la prise en compte de la vitesse du problème de Riemann à l'interface, que nous détaillons tout d'abord en 1D.

Schéma monodimensionnel

Rappelons le schéma PVU classique (voir [DRR]) en géométrie monodimensionnelle. Avec les notations précédentes (et en prenant toutes les quantités N, u, V_T, \mathcal{E} au début du pas de temps) les flux numériques $f^N, f^u, f^{\mathcal{E}}$ s'écrivent comme une somme d'une partie advective $F^N, F^u, F^{\mathcal{E}}$ et d'une partie Lagrangienne ou acoustique, notée $\widehat{F}^N, \widehat{F}^u, \widehat{F}^{\mathcal{E}}$. Les flux F sont des flux upwind associés au champ de vitesse u :

$$\begin{pmatrix} F_{i+1/2}^N \\ F_{i+1/2}^u \\ F_{i+1/2}^{\mathcal{E}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(u_i + |u_i|) \begin{pmatrix} N_i \\ (Nu)_i \\ (NE)_i \end{pmatrix} + \frac{1}{2}(u_{i+1} - |u_{i+1}|) \begin{pmatrix} N_{i+1} \\ (Nu)_{i+1} \\ (NE)_{i+1} \end{pmatrix}$$

alors que la partie Lagrangienne s'écrit avec $\zeta = (2\pi)^{-1/2}$

$$\begin{aligned}\widehat{F}_{i+1/2,j}^N &= ((V_T N)_i - (V_T N)_{i+1}) (2\pi)^{-1/2} \\ \widehat{F}_{i+1/2,j}^u &= \frac{1}{2m_e} (P_i + P_{i+1}) + ((V_T Nu)_i - (V_T Nu)_{i+1}) (2\pi)^{-1/2} \\ \widehat{F}_{i+1/2,j}^{\mathcal{E}} &= \frac{1}{2m_e} (P_i u_i + P_{i+1} u_{i+1}) + ((V_T N\mathcal{E} + V_T P/2m_e)_i - (V_T N\mathcal{E} + V_T P/2m_e)_{i+1}) (2\pi)^{-1/2}\end{aligned}$$

Ces formules de flux s'apparentent comme un schéma classique "Lagrange plus Projection".

Nous allons modifier ces formules notamment pour faire en sorte que si la vitesse et la pression sont uniformes en espace alors le profil de densité reste inchangé pendant la phase Lagrangienne. Pour cela on va modifier la vitesse d'advection à l'interface entre i et $i+1$, et on prend la vitesse donnée par le problème de Riemann simplifié :

$$u_{i+1/2}^* = .5(u_i + u_{i+1}) + \frac{1}{2m_e \sqrt{\frac{5}{3}} (NV_T)_{i+1/2}} (P_i^n - P_{i+1}^n)$$

sachant que $(NV_T)_{i+1/2} = (NV_{T,i} + NV_{T,i+1})/2$, et on définit pour $Q = N, u, \mathcal{E}$

$$\begin{aligned}F_{i+1/2}^Q &= u_{i+1/2}^* Q_i, \quad \text{si } u_{i+1/2}^* > 0 \\ &= u_{i+1/2}^* Q_{i+1}, \quad \text{sinon}\end{aligned}$$

puis on pose

$$\begin{aligned}\widehat{F^N}_{i+1/2,j} &= 0 \\ \widehat{F^u}_{i+1/2,j} &= \frac{1}{2m_e}(P_i + P_{i+1}) + (u_i - u_{i+1})(NV)_{T,i+1/2}(2\pi)^{-1/2} \\ \widehat{F^\mathcal{E}}_{i+1/2,j} &= \frac{1}{2m_e}(P_i u_i + P_{i+1} u_{i+1}) + \frac{1}{4\pi}((u^2)_i - (u^2)_{i+1})(NV)_{T,i+1/2} \\ &\quad + \frac{1}{m_e 2\pi} V_{T,i+1/2}(P_i - P_{i+1})\end{aligned}$$

Les flux ainsi construits sont alors très proches de ceux donnés par les schémas de type Gudounov-Lagrange suivi de projection et de ceux proposés par Desprès [De], d'autre part, on vérifie que si la vitesse et la pression sont uniformes en espace, alors le profil de densité est simplement déplacé avec la vitesse uniforme. Les formules sont particulièrement simples à programmer et peu coûteuses en temps calcul.

En fait on prendra

$$u_{i+1/2}^* = .5(u_i + u_{i+1}) + \frac{\xi}{2\sqrt{5/3}m_e(NV_T)_{i+1/2}}(P_i^n - P_{i+1}^n)$$

Le coefficient en facteur de ξ correspond au terme de viscosité et contribue à la stabilité du schéma; $\xi = 1$ de façon standard mais on verra par la suite que l'on peut prendre ξ inférieur à 1, à condition qu'il ne soit pas nul.

Schéma bidimensionnel

La méthode est de type "volumes finis" et les flux numériques $f^N, f^u, f^v, f^\mathcal{E}, g^N, \dots$ s'écrivent comme une somme d'une partie advective $F^N, F^u, F^v, F^\mathcal{E}, G^N, \dots$ et d'une partie Lagrangienne notée $\widehat{F^N}, \widehat{F^u}, \widehat{F^v}, \widehat{F^\mathcal{E}}, \widehat{G^N}, \dots$.

En notant $u^*[a, b] = a$ si u^* positif et b sinon, on pose:

$$\begin{pmatrix} F_{i+1/2,j}^N \\ F_{i+1/2,j}^u \\ F_{i+1/2,j}^v \\ F_{i+1/2,j}^\mathcal{E} \end{pmatrix} = u_{i+1/2,j}^* \begin{bmatrix} N_{i,j}^n & N_{i+1,j}^n \\ (Nu)_{i,j}^n & (Nu)_{i+1,j}^n \\ (Nv)_{i,j}^n & (Nv)_{i+1,j}^n \\ (N\mathcal{E})_{i,j}^n & (N\mathcal{E})_{i+1,j}^n \end{bmatrix}$$

alors que la partie Lagrangienne s'écrit :

$$\begin{aligned}\widehat{F^N}_{i+1/2,j} &= 0 \\ \widehat{F^u}_{i+1/2,j} &= \frac{1}{2m_e}(P_{i,j} + P_{i+1,j}) + (u_{i,j}^n - u_{i+1,j}^n) \frac{\xi}{\sqrt{2\pi}} (NV_T)_{i+1/2,j} \\ \widehat{F^v}_{i+1/2,j} &= 0 \\ \widehat{F^\mathcal{E}}_{i+1/2,j} &= \frac{1}{2m_e}(P_{i,j} u_{i,j} + P_{i+1,j} u_{i+1,j}) + [(u_{i,j}^n)^2 - (u_{i+1,j}^n)^2] \frac{\xi}{2\sqrt{2\pi}} (NV_T)_{i+1/2,j} \\ &\quad + (P_{i,j} - P_{i+1,j}) \frac{2\xi(V_T)_{i+1/2,j}}{m_e \sqrt{2\pi}}\end{aligned}$$

3.2 Discrétisation des équations de Maxwell et des termes électromagnétiques

A l'intérieur du domaine de calcul, les équations de Maxwell sont discrétisées par des différences finies centrées de pas $\Delta t, \Delta x, \Delta y$ sur des grilles décalées :

$$\begin{aligned}
& B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - B_{i+1/2,j+1/2}^{n-1/2} = \\
& \quad -\frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{y\ i+1,j+1/2}^n - E_{y\ i,j+1/2}^n) + \\
& \quad \frac{\Delta t}{\Delta y} (E_{x\ i+1/2,j+1}^n - E_{x\ i+1/2,j}^n) \\
& E_x^{n+1}{}_{i+1/2,j} - E_x^n{}_{i+1/2,j} = \\
& \quad c^2 \frac{\Delta t}{\Delta y} (B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - B_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2}) + \frac{e\Delta t}{\epsilon_0} (f_{i+1/2,j}^N) \\
& E_y^{n+1}{}_{i,j+1/2} - E_y^n{}_{i,j+1/2} = \\
& \quad -c^2 \frac{\Delta t}{\Delta x} (B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - B_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2}) + \frac{e\Delta t}{\epsilon_0} (g_{i,j+1/2}^N)
\end{aligned}$$

Résolution de la partie électromagnétique de l'accélération

Pour l'accélération, on utilise la méthode de Boris qui consiste à découpler l'action des champs électriques et magnétiques.

L'accélération dû au champ électrique est discrétisée sous la forme

$$\begin{aligned}
(u)_{i,j}^\# - (\tilde{u})_{i,j} &= \Delta t \frac{e_0}{m_e} E_x^{n+1/2}{}_{i,j} \\
(v)_{i,j}^\# - (\tilde{v})_{i,j} &= \Delta t \frac{e_0}{m_e} E_y^{n+1/2}{}_{i,j}
\end{aligned}$$

où les champs utilisés sont interpolés en temps et en espace sur les champs calculés (avec la notation naturelle pour $E^{n+1/2}$):

$$\begin{aligned}
E_x^{n+1/2}{}_{i,j} &= \frac{1}{2} (E_x^{n+1/2}{}_{i+1/2,j} + E_x^{n+1/2}{}_{i-1/2,j}) \\
E_y^{n+1/2}{}_{i,j} &= \frac{1}{2} (E_y^{n+1/2}{}_{i,j+1/2} + E_y^{n+1/2}{}_{i,j-1/2})
\end{aligned}$$

Et d'autre part pour la rotation magnétique, on pose :

$$\begin{aligned}
(u)_{i,j}^{n+1} - (u)_{i,j}^\# &= \Delta t \frac{e_0}{m_e} \frac{1}{2} ((v)_{i,j}^{n+1} + (v)_{i,j}^\#) B_{i,j}^{n+1/2} \\
(v)_{i,j}^{n+1} - (v)_{i,j}^\# &= -\Delta t \frac{e_0}{m_e} \frac{1}{2} ((u)_{i,j}^{n+1} + (u)_{i,j}^\#) B_{i,j}^{n+1/2}
\end{aligned}$$

On interpole aussi le champ magnétique :

$$B_{i,j}^{n+1/2} = \frac{1}{4} (B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} + B_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} + B_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} + B_{i-1/2,j-1/2}^{n+1/2})$$

Bien sûr on écrit: $N^{n+1} = \tilde{N}$

Terme source dans l'équation d'énergie

La discrétisation de ce terme est faite de façon à ce que l'évaluation de la variation d'énergie interne due au champ électrique soit nulle. C'est pourquoi on prend :

$$(NUE)_i = \tilde{N}_i \left[(\tilde{u}_{i,j} + \frac{\Delta t e_0}{2m_e} E_x^{n+1/2}{}_{i,j}) E_x^{n+1/2}{}_{i,j} + (\tilde{v}_{i,j} + \frac{\Delta t e_0}{2m_e} E_y^{n+1/2}{}_{i,j}) E_y^{n+1/2}{}_{i,j} \right]$$

3.3 Conservation de l'équation de Poisson

Les ions étant supposés fixes, pour résoudre les équations de Maxwell, on a évalué les densités de courant électronique grâce aux flux calculés pour les équations d'Euler. On en déduit alors le résultat suivant:

Proposition 1 *Si la relation suivante*

$$0 = \frac{e_0}{\epsilon_0} (N_{i,j}^n - N_{i,j}^{ion}) + \frac{1}{\Delta x} (E_{x\ i+1/2,j}^n - E_{x\ i-1/2,j}^n) + \frac{1}{\Delta y} (E_{y\ i,j+1/2}^n - E_{y\ i,j-1/2}^n)$$

est vraie initialement, elle est vraie pour tout n.

(donc, l'équation de Poisson sera automatiquement conservée à chaque pas de temps).

En effet, il suffit de prendre la divergence des équations

$$E_{x\ i+1/2,j}^{n+1} - E_{x\ i+1/2,j}^n - c^2 \frac{\Delta t}{\Delta y} (B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - B_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2}) = \frac{e_0}{\epsilon_0} f_{i+1/2,j}^N$$

$$E_{y\ i,j+1/2}^{n+1} - E_{y\ i,j+1/2}^n + c^2 \frac{\Delta t}{\Delta x} (B_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - B_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2}) = \frac{e_0}{\epsilon_0} g_{i,j+1/2}^N$$

et d'utiliser l'équation de densité

$$N_{i,j}^{n+1} - N_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1/2,j}^N - f_{i-1/2,j}^N) + \frac{\Delta t}{\Delta y} (g_{i,j+1/2}^N - g_{i,j-1/2}^N) = 0$$

pour obtenir la dérivée temporelle de l'équation de Poisson discrétisée :

$$0 = \frac{e_0}{\epsilon_0} (N_{i,j}^{n+1} - N_{i,j}^n) + \frac{1}{\Delta x} ((E_{x\ i+1/2,j}^{n+1} - E_{x\ i+1/2,j}^n) - (E_{x\ i-1/2,j}^{n+1} - E_{x\ i-1/2,j}^n)) \\ + \frac{1}{\Delta y} ((E_{y\ i,j+1/2}^{n+1} - E_{y\ i,j+1/2}^n) - (E_{y\ i,j-1/2}^{n+1} - E_{y\ i,j-1/2}^n))$$

car la divergence du rotationnel de B est nulle en différences finies.

3.4 Stabilité du schéma

Nous ne pouvons ici, faire une analyse exhaustive des critères de stabilité. Donnons en les grandes lignes. Rappelons que $\lambda_0 = 2\pi\omega_0 c$ et que la longueur de Debye est définie par

$$l_{De} = V_T \omega_{pe}$$

(c'est à dire $l_{De} = 6.9 (T/N)^{1/2}$, où T est exprimé en degré Kelvin et N en cm^{-3} et la longueur en cm). Pour le pas d'espace, on doit avoir la majoration suivante

$$\Delta x \leq \lambda_0/10,$$

et d'après les études bien connues de Birsall et Langdon(cf[BL],chap8):

$$\Delta x \leq 3l_{De}$$

D'autre part à cause du critère de CFL, on doit avoir

$$\Delta t \leq \Delta x/c$$

et pour la stabilité du schéma de discrétisation des équations d'Euler couplées aux champs électromagnétiques, on doit avoir

$$\Delta t \leq 2\omega_{pe}^{-1}$$

(ceci sera toujours réalisé si $\omega_{pe} \leq \omega_0$ c'est à dire si le plasma est sous-critique)

4 Résultats numériques

Dans tous les tests présentés ici, nous avons pris les ions immobiles mais on peut utiliser la méthode avec des ions mobiles.

Nous avons tout d'abord mis en oeuvre la méthode décrite ci-dessus avec $\xi = 1$. Et nous l'avons testé sur un cas purement électrostatique (c'est à dire avec une condition d'onde entrante nulle) où le profil de densité initiale est un créneau dont les bords présentent un gradient assez raide (voir ci-dessous cas n° 1); on s'aperçoit alors que le champ électrique sur les bords du créneau présente une valeur qui ne cesse de croître en fonction du temps alors qu'il devrait tendre vers une valeur limite (voir figure 2). Or, ce phénomène de croissance de la composante électrostatique du champ électrique vient du fait que même si les vitesses de part et d'autre d'un bras sont nulles, le flux de densité du schéma hydrodynamique peut ne pas être nul.

C'est pourquoi, nous proposons de modifier le schéma avec $\xi = 1$ (appelé schéma A), en prenant la formule suivante pour ξ dans la formule donnant $u_{i+1/2}^*$ entre les mailles i et $i + 1$:

$$\xi_{i+1/2} = \text{Inf} \{1., \varepsilon + \xi^0 |(Nu)_i - (Nu)_{i+1}|\}$$

On doit ajuster la valeur de ε , ici on a pris $\varepsilon = 0.08$, de plus ξ^0 est tel que ξ est inférieur à 1 tant que $|(Nu)_i - (Nu)_{i+1}| < (NV)_{T i+1/2}$.

On verra ci dessous que ce schéma modifié, noté B, donne de meilleurs résultats.

On ne présente ici que des cas tests monodimensionnels.

1. Cas test Electrostatique (c'est à dire sans onde entrante).

Le domaine de calcul a une largeur de 44×10^{-4} cm. La partie centrale du domaine est occupé par une tranche de plasma dont le profil est celui indiqué sur la figure 1. L'état initial est le suivant:

$$T = 3 \times 11.6 10^6 \text{ Kelvin}, \quad N_e = N^{ion} = 2.2 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$$

On prend $\Delta x = \Delta y = 6.10^{-6}$ cm, $\Delta t = 2.10^{-16}$ s. Comme $l_{Debye} = 4.2 \cdot 10^{-6}$ cm on voit que $\Delta x = 1.4 l_{Debye}$.

On fait figurer sur les planches 2 et 3 les résultats avec les schémas A et B.

2. Cas test avec onde entrante

Le cas test est identique au précédent sauf que l'on fait entrer une onde électromagnétique tel que le champ électrique soit orthogonale a la direction principale. Sa longueur d'onde est de $1 \mu\text{m}$ (ce qui correspond à une densité critique égale à $1.1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, donc $\omega_0^{-1} = .5 \cdot 10^{-15} \text{ s}$) et son intensité de $.08 E_{compton}$.

On montre le profil de densité au bout de $800 \omega_0^{-1}$ et les profils de champ électrique longitudinal (c'est à dire) au bout de $400 \omega_0^{-1}$ et de $800 \omega_0^{-1}$ sur les figures 4,5 et 6 avec le schéma A et sur les figures 7,8 et 9 avec le schéma B.

Les oscillations du champ électrique longitudinal sont caractéristiques d'une onde électromagnétique pour la diffusion Raman, néanmoins nous n'obtenons pas exactement la bonne longueur d'onde pour cette onde.

5 Conclusion

On constate ici que le terme de viscosité (qui doit être présent dans le schéma pour qu'il soit stable) a une influence notable sur les résultats, en particulier s'il est trop important le champ électrique longitudinal ne cesse d'augmenter aux endroits où il y a un fort gradient de densité. D'autre part, on s'aperçoit qu'il n'y a pas de propriété de conservation de l'énergie globale. Des améliorations doivent donc être apportées au schéma numérique décrit ci-dessus; néanmoins des

résultats convenables peuvent être obtenus avec le schéma B notamment s'il n'y a pas de gradient de densité trop raide.

En fait en plus des équations 1 et 2, il convient de résoudre l'équation de Vlasov pour la fonction de répartition des ions $f = f(t, x, \omega)$ où ω représente la vitesse et x la position:

$$\partial_t f + \vec{w} \cdot \nabla f + \frac{Ze}{m_i} (E + \vec{w} \times B) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{w}} = 0$$

Cette équation est couplée à (2) par l'intermédiaire de l'impulsion ionique

$$\vec{j}^{ion}(t, x) = \int \vec{w} f(t, x, \vec{w}) d\vec{w}$$

Comme cela a été évoqué plus haut, on utilise une technique de "sous-cycles" (cf [AG-S]). On fait un pas de temps ionique pour un certain nombre de pas de temps électronique (en fait au moins une vingtaine) donc à chaque pas de temps électronique, il convient d'interpoler les courants j^{ion} entre les pas de temps ioniques correspondant (et de faire une correction de Poisson comme indiquée ci-dessus).

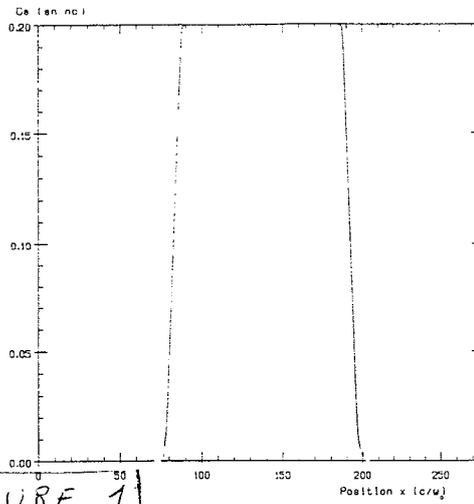


FIGURE 1

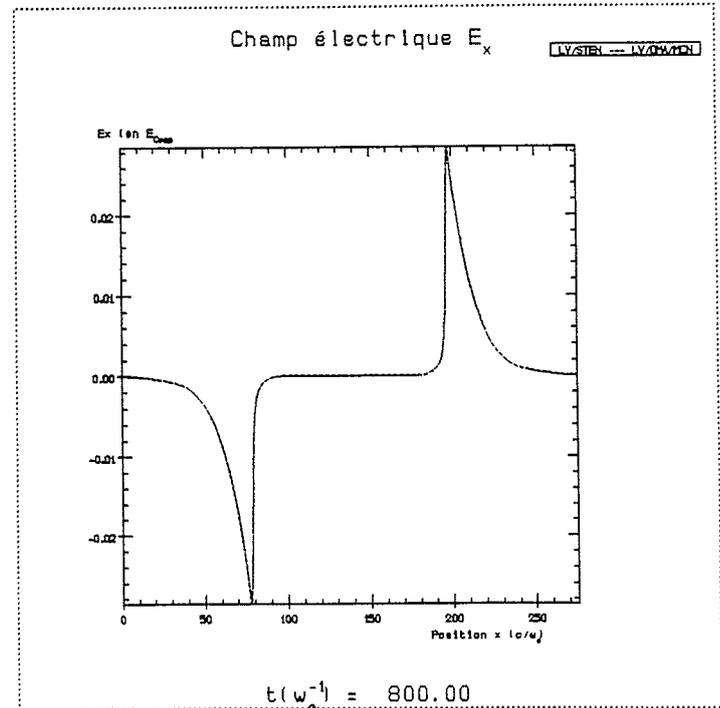
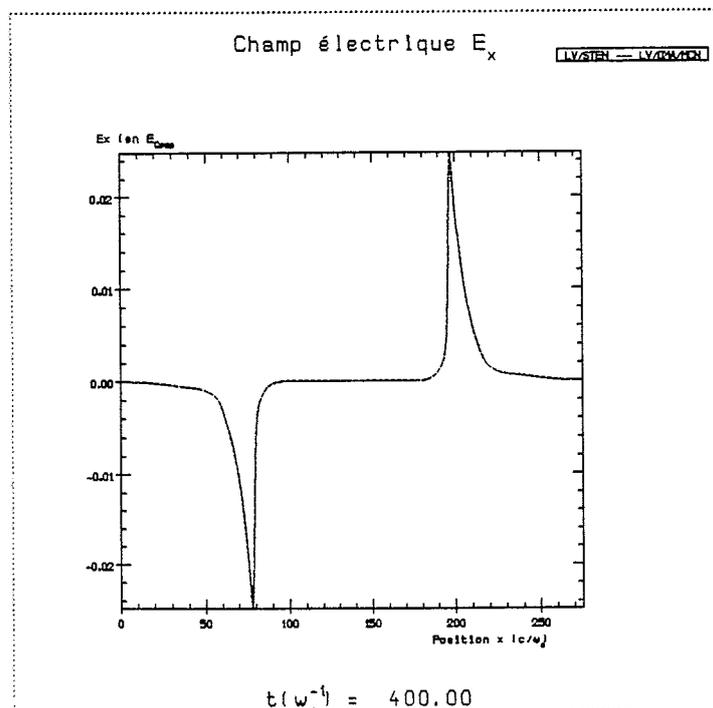
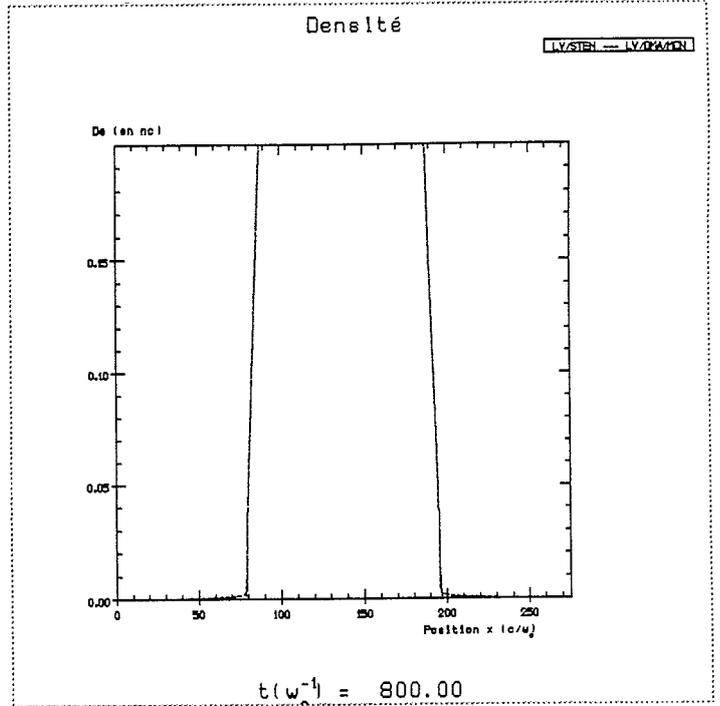
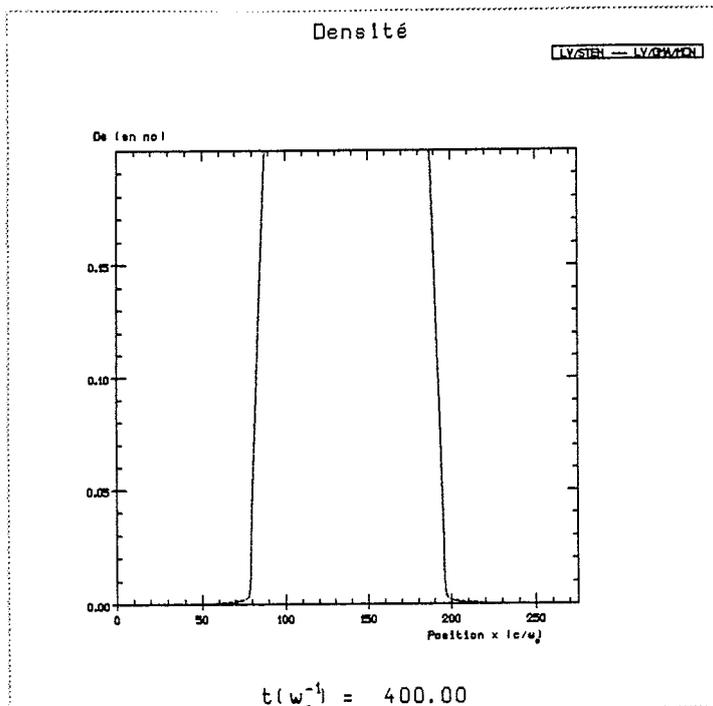
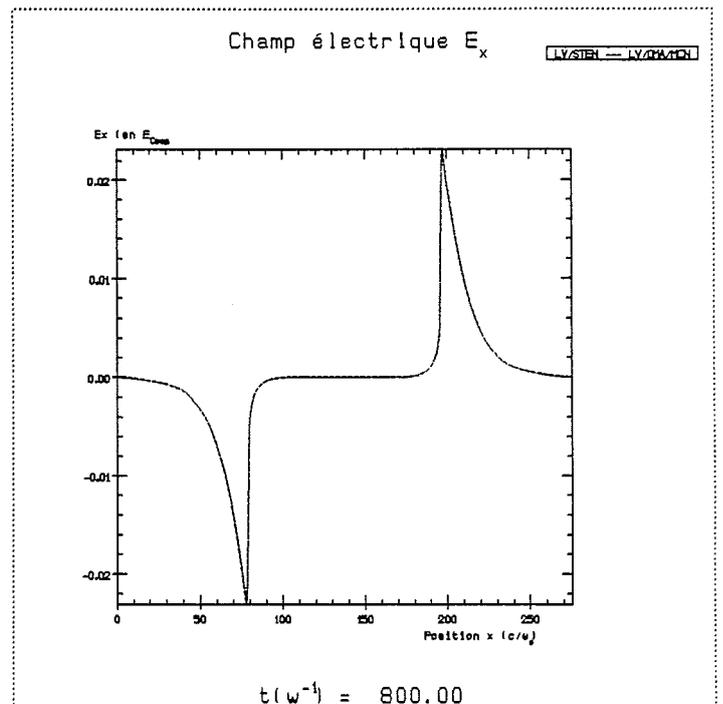
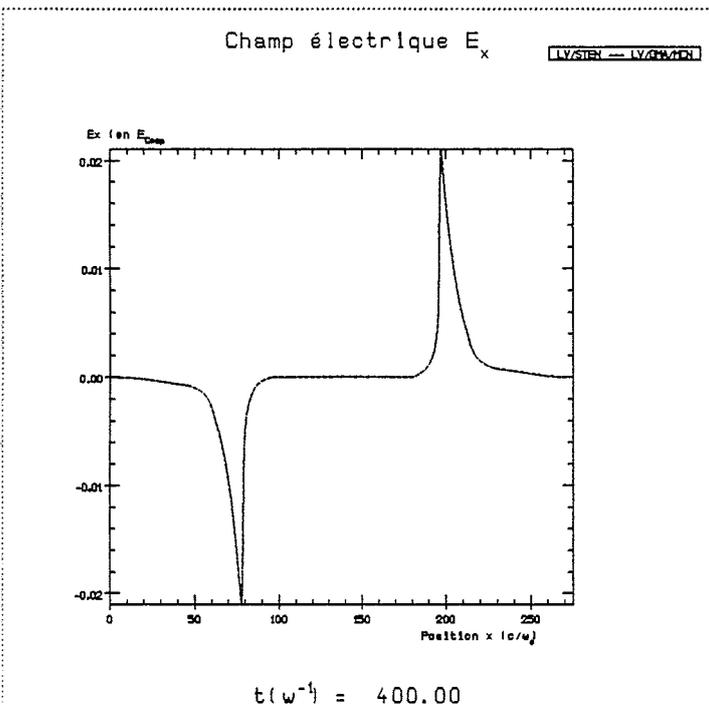
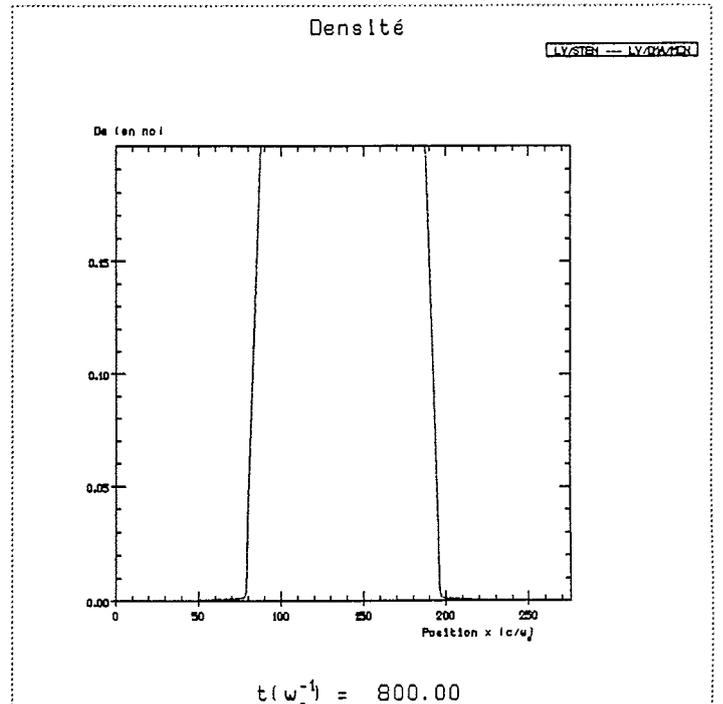
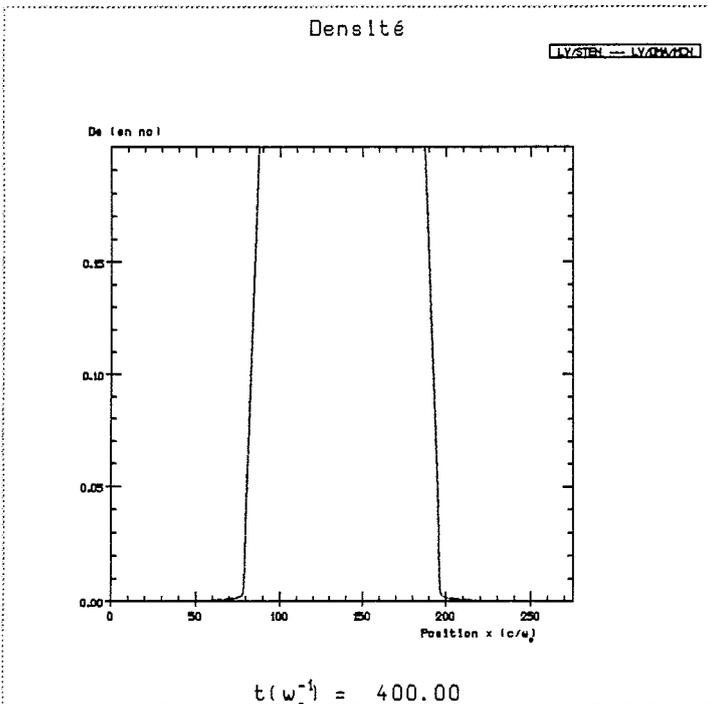


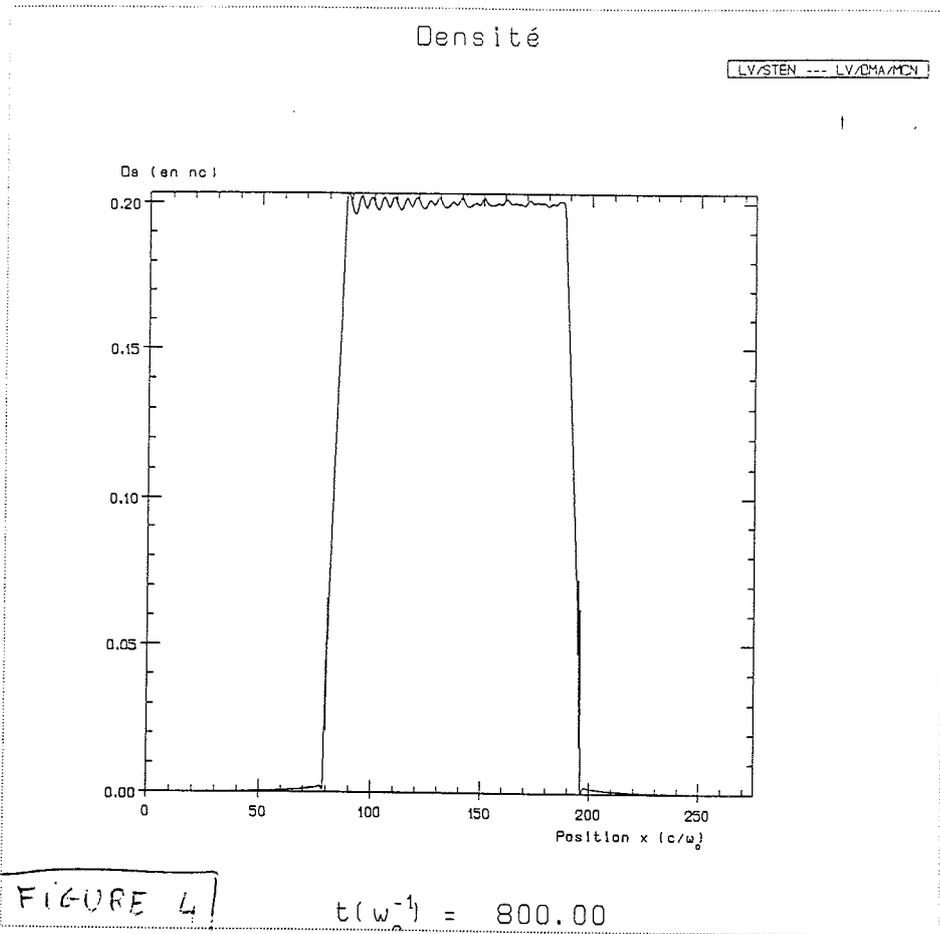
FIGURE 2

cas electrostatique $\xi = 1$ schema A



cas electrostatique -- avec adaptation de ksi schéma B

FIGURES 3



Champ électrique E_x LV/STEN ---

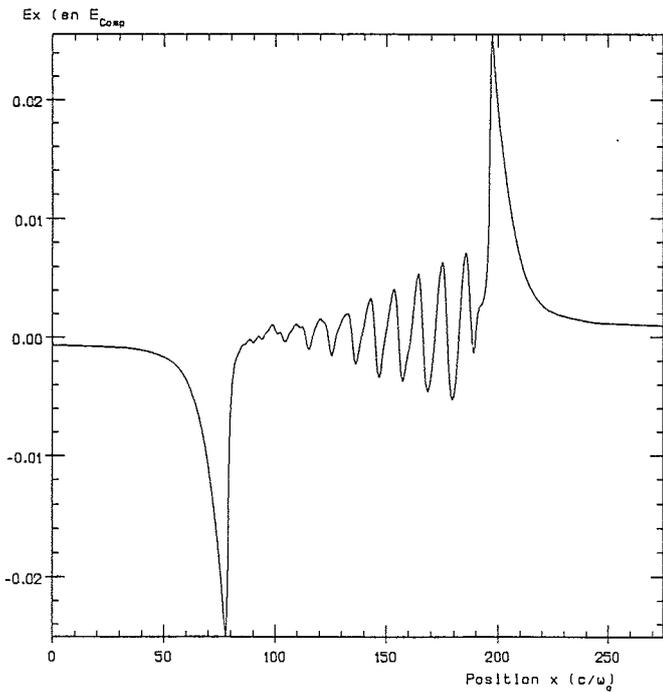


FIGURE 5 | $t(w_0^{-1}) = 400.00$

Champ électrique E_x LV/STEN ---

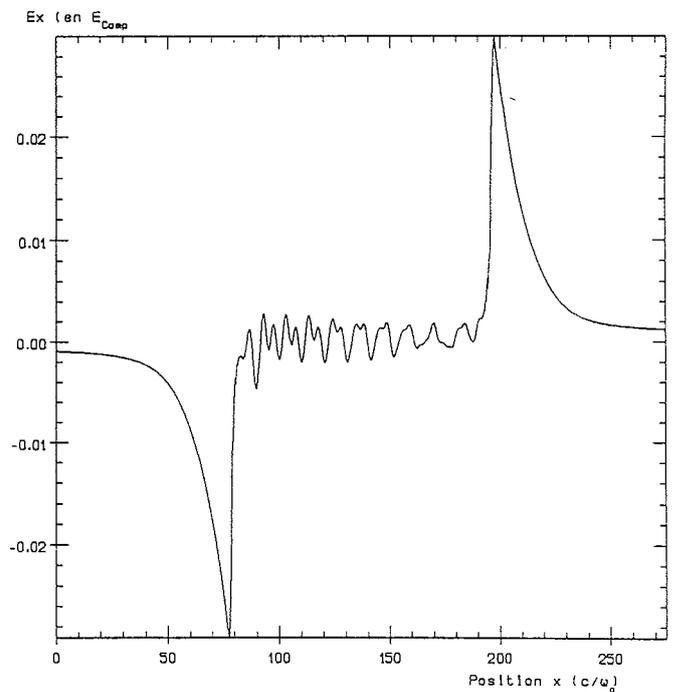


FIGURE 6 | $t(w_0^{-1}) = 800.00$

Densité

LV/STEN --- LV/DMA/MCN

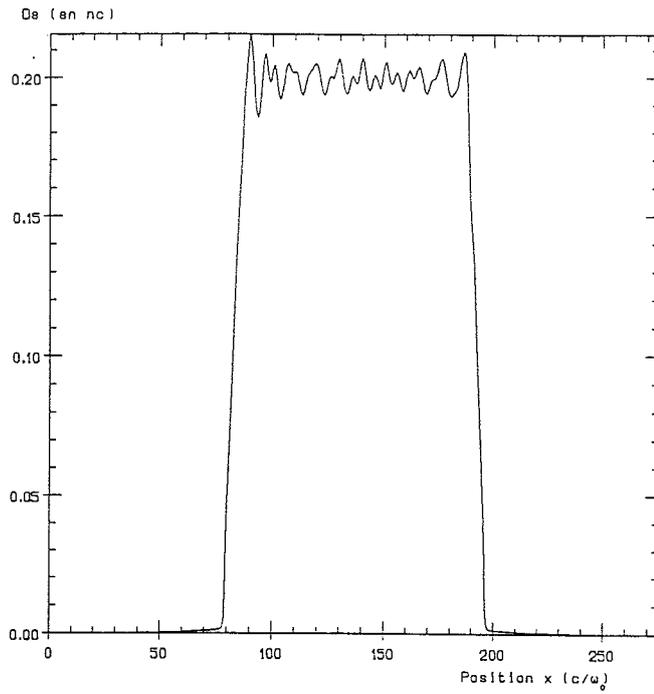


FIGURE 7

$t(\omega^{-1}) = 800.00$

Champ électrique E_x

LV/STEN

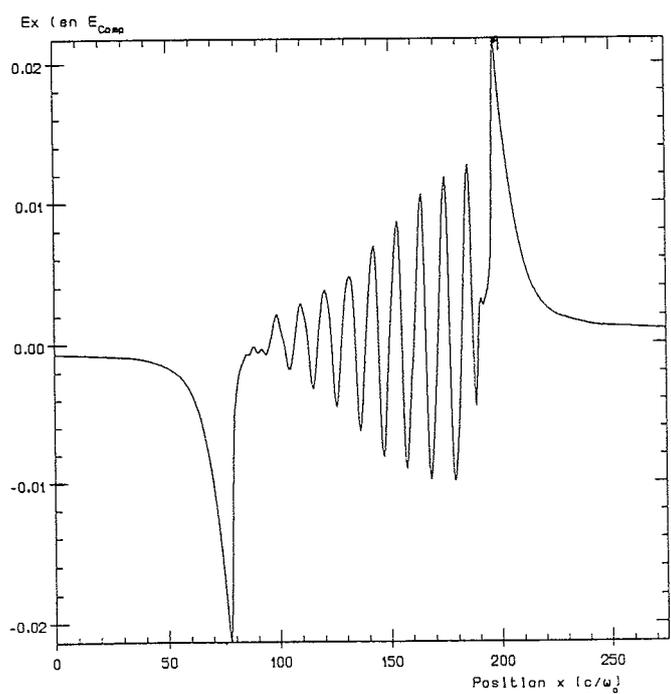


FIGURE 8

$t(\omega^{-1}) = 400.00$

Champ électrique E_x

LV/STEN --- LV

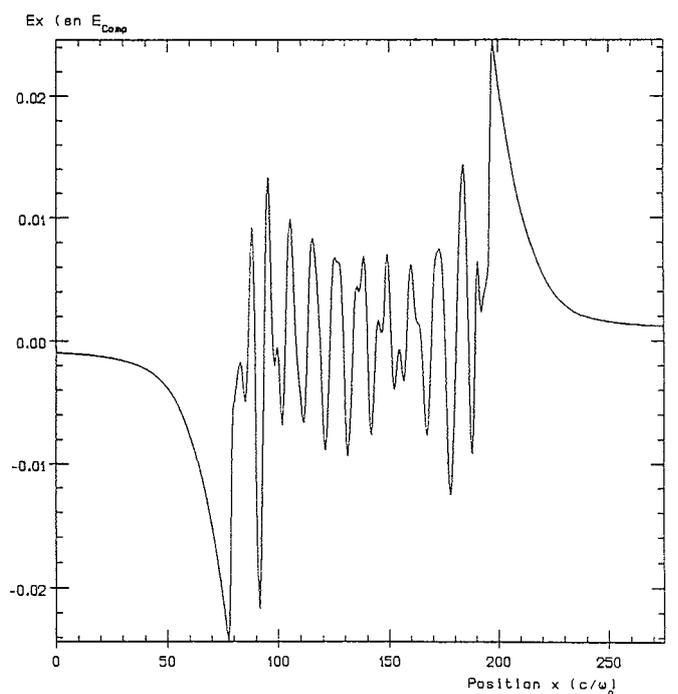


FIGURE 9

$t(\omega^{-1}) = 800.00$

References

- [Ad] A. Adolf, Le code Manet, Rapport DAM DO 2744 (1995)
- [AG-S] J.C. Adam- A. Gourdin-Serveniére, Seminaire LULI (1990)
- [BL] C.K. Birdsall- A.B. Langdon *Plasma Physics via Computer simulation*, Mc Graw Hill (1985)
- [BB] G.Bonnaud- Bouchut Résolution des équations de Maxwell-Euler, Préprint U. Orléans (1995)
- [De] B. Desprès Inégalités entropiques pour un solveur conservatif de la dynamique des gaz, *Comptes Rendus Ac. Sc. Paris* (1997)
- [DRR] S.M. Deshpande-S. Raghurama Rao, A Genuinely Multidimensional Upwind Scheme for Euler equations. *CFD Journal (Japan)*3 p. 415-432 (1995)
- [Fa] S. Fabre, Modélisation bidimensionnelle de la transmission d'une onde électromagnétique dans un plasma, Thèse, Ecole Polytechnique (1991)

DIFFUSION

- CEA/DAM/DAN/B3	2 ex. (dont 1 ex à l'att. de D. Verwaerde)
- CEA/DRIF/EC/B3	1 ex.
- CEA/DRIF/2C2E/B3	1 ex.
- CEA/DRIF/CCSS/B3	1 ex.
- CEA/DRIF/CDEI/B3	1 ex.
- CEA/DRIF/DPTA/B3	2 ex. (dont 1 ex à l'att. de G. Bonnaud)
- CEA/CESTA/DEV/IS	1 ex.
- CEA/DRIF/DCSA/EC/B3	1 ex.
- CEA/DRIF/DCSA/SET/B3	2 ex. (dont 1 ex à l'att. M. Casanova)
- CEA/DRIF/DCSA/MLS/B3	3 ex. (dont 1 ex à l'att. de R. Sentis, F. Robin)
- CHRONO	1 ex.
- ARCHIVES/MLS	8 ex.
- CEA/BCA/CESTA	1 ex.