

Notice du code HELIOS
et conditions aux limites ouvertes

Solène Le Bourdiec
LRC MESO,ENS de Cachan, CEA DAM,
61 Avenue du Pt Wilson 94235 Cachan
&
CEA DIF/DPTA/SPPE

Rapport Septembre 2007

Table des matières

1	Introduction	3
2	Descriptif du code HELIOS	4
2.1	Adimensionnement des équations	4
2.2	Discrétisation des équations	4
2.2.1	Méthodes employées	4
2.2.2	Validation	5
2.2.3	Intérêts d’une approche déterministe	5
2.3	Principe du code	5
2.3.1	Paramètres d’entrée	6
2.3.2	Initialisation des calculs	6
2.3.3	Boucle en temps	7
2.4	Algorithme de résolution de l’équation de Vlasov 1Dx-3Dv sur une itération en temps	8
2.5	Parallélisation	10
3	Conditions aux limites ”ouvertes”	12
3.1	Contexte physique et limitations des conditions périodiques	12
3.2	Réflexion des ondes	12
3.3	Réflexion des particules et cône de perte	15
3.4	Validation des conditions “ouvertes”	18
3.4.1	Test des conditions de réflexion des particules sans cône de perte .	18
3.4.2	Test des conditions de réflexion des particules avec cône de perte .	19
3.4.3	Test des conditions de réflexion partielle des ondes	19
4	Conclusion et perspectives	21

1 Introduction

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),

Le code cinétique 1Dx-3Dv HELIOS¹, développé dans le Département de Physique Théorique et Appliquée du CEA de Bruyères-Le-Châtel [4], résout ce système d'équations sur une dimension d'espace et trois dimensions d'impulsion (p_x, p_y, p_z) ou de vitesse (v_x, v_y, v_z). Il permet ainsi de décrire 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 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).

La première partie de cette note décrit le code HELIOS. Après avoir rappelé le système des équations adimensionnées de Vlasov-Maxwell ainsi que les différentes méthodes de discrétisation employées, nous présenterons les grandes étapes du code HELIOS et nous précisons l'algorithme principal de résolution du système d'équations. Dans une deuxième partie, sera détaillée l'implémentation de nouvelles conditions aux limites dans le code : des conditions aux limites ouvertes prenant 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. Ces conditions sont nécessaires pour 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.

¹Hermite spectral collocation method for the solution of the Vlasov-Maxwell System.

2 Descriptif du code HELIOS

Cette première partie a pour objectif de rappeler les principales caractéristiques du code HELIOS².

2.1 Adimensionnement des équations

Le code HELIOS résout de façon discrète le système des équations adimensionnées de Vlasov-Maxwell sur une dimension d'espace et trois dimensions de vitesse. Ces équations s'écrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \nabla \times \mathbf{B} = -\mathbf{j}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho - 1, \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (5)$$

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 :

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2}}, \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{1 + p^2}}, \quad (6)$$

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 $m_e \omega_{pe} / q_e$.

2.2 Discrétisation des équations

2.2.1 Méthodes employées

La méthode de discrétisation en impulsion retenue est la méthode de collocation HSCM (*Hermite Spectral Collocation Method*) [2]. En effet, cette méthode allie précision et efficacité et a l'avantage de s'étendre sans difficultés au problème relativiste tridimensionnel en impulsion. Un splitting d'ordre deux en temps est réalisé. La partie advection est discrétisée à l'aide d'un schéma de différences finies centrées d'ordre deux en espace et en temps : le schéma de Lax-Wendroff. Les parties de dérivation spectrale dans chacune des trois directions de vitesse sont résolues par une méthode de Runge Kutta

²Un fichier d'aide à l'utilisation du code, appelé `help`, est disponible avec les sources.

d'ordre quatre. Les équations de Maxwell sont discrétisées par la méthode FDTD (*Finite Difference Time Domain*). Les conditions aux bords de la boîte de simulation sont périodiques. L'ensemble de la discrétisation du système (1)-(5) est présenté dans [4]. Ces méthodes ont été implémentées dans le code HELIOS.

2.2.2 Validation

Cette approche originale a été validée à partir de différents cas tests : des instabilités Weibel dans des plasmas non magnétisés et des instabilités whistlers dans des plasmas magnétisés. Dans ces simulations, le code restitue bien le développement linéaire et la saturation non-linéaire des instabilités. Les taux de croissance obtenus sont comparables aux valeurs théoriques fournies par la théorie linéaire. Les résultats obtenus sont précis et de qualité comparable aux résultats PIC obtenus pour les mêmes simulations [5]. La précision dépend cependant de la perturbation initiale des modes introduits dans la simulation. Celle-ci doit être calibrée en fonction du taux de croissance et de la valeur de l'énergie magnétique à la saturation. Une valeur trop grande de la perturbation engendre des oscillations parasites.

Des calculs plus complexes ont été réalisés avec le code HELIOS : des instabilités Weibel à deux espèces d'électrons relativistes et des calculs réalistes d'instabilités whistlers au niveau de l'orbite géostationnaire. Dans cette simulation, le plasma est composé de deux espèces électroniques : une espèce relativiste et une espèce classique. Dans les deux cas, les ions sont considérés immobiles. Les résultats obtenus sont précis et très satisfaisants (cf [4]).

2.2.3 Intérêts d'une approche déterministe

Contrairement à l'approche stochastique des codes PIC, une approche déterministe permet de contrôler le "bruit initial" introduit dans la simulation. Ainsi, le paramètre b_0 du code HELIOS, représentant l'amplitude du ou des modes perturbés, est choisi par l'utilisateur. Un autre avantage est le choix des modes que l'on souhaite voir évoluer dans la simulation.

La réalisation de calculs déterministes permet également des comparaisons avec des calculs PIC. Ainsi, à iso-qualité de résultats, on peut par exemple déterminer le nombre de macroparticules par maille nécessaire au calcul PIC.

Un avantage majeur de la méthode de type déterministe est la possibilité de réaliser des calculs dans les conditions pour lesquelles les méthodes PIC atteignent leurs limites. Ainsi les cas de simulations à faibles taux de croissance sont difficilement réalisables en PIC ; le bruit intrinsèque que la méthode particulière génère ne permet pas la distinction entre les modes physiques excités et les modes non-physiques générés par la méthode à l'initialisation du calcul [6].

2.3 Principe du code

Le code est implémenté en $C++$ et structuré de façon générique de la manière suivante.

2.3.1 Paramètres d'entrée

L'ensemble des paramètres d'entrée du code doivent être saisis dans le fichier `lanceur.txt`.

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 présentes dans le plasma,
- ◇ les caractéristiques de la distribution initiale pour chaque espèce de particule :
 - 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 conditions initiales actuellement traitées par le code HELIOS sont :

- ◇ Des maxwelliennes anisotropes centrées ou non en zéro :

$$f^0(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{\pi^{3/2} a v_{th}^3} e^{-p_x^2/v_{th}^2} e^{-(p_y^2+p_z^2)/(a v_{th}^2)}, \quad (7)$$

- ◇ Des fonctions de Maxwell-Juttner non centrées en zéro :

$$f^0(x, \mathbf{p}) = \frac{\mu}{4\pi\gamma^2 K_2(\mu/\gamma)} e^{-\mu(\gamma(\mathbf{p})-\beta p_y)}, \quad (8)$$

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 $i = 1, \dots, N_m$, où N_m est le nombre de modes perturbés.

2.3.2 Initialisation des calculs

A l'initialisation, sont calculés :

- ◇ les coefficients 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 $k = 0, \dots, N$,
- ◇ la taille L_x de la boîte spatiale, telle que le domaine contienne quelques longueurs d'ondes du mode dominant,
- ◇ le facteur d'échelle, en fonction de la condition initiale.

Le domaine des impulsions $[-K, K]^3$ est choisi tel que :

$$f^0(x, p_x, p_y, p_z) > 10^{-10}, \quad \forall (p_x, p_y, p_z) \in [-K, K]^3, \quad \forall x \in [0, L_x],$$

et le facteur d'échelle est donné par,

$$\alpha = \frac{\xi_N}{K}.$$

◇ la composante de champ perturbée, par exemple la composante B_y du champ magnétique :

$$B_y = b_0 \sum_{i=1}^{N_m} \cos(k_i x), \quad (9)$$

◇ les éléments nécessaires à la résolution spectrale : les poids et la matrice de dérivation spectrale D_{1D} 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),

$$\Delta t = \Delta x \min \left\{ 1, \frac{\alpha}{\xi_N} \right\}.$$

2.3.3 Boucle en temps

La boucle en temps est composée de trois principales étapes :

- ◇ la résolution de l'équation de Vlasov discrète (cf algorithme page 9) pour chacune des espèces de particule 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.

2.4 Algorithme de résolution de l'équation de Vlasov 1Dx-3Dv sur une itération en temps

L'ensemble des étapes de résolution de l'équation de Vlasov 1Dx-3Dv est résumé dans l'algorithme présenté à la page suivante.

De manière générale, on notera, dans l'algorithme :

- $T_1[N_b]$ le tableau T_1 monodimensionnel de N_b réels, où N_b est un entier,
- $T_1[i]$ le $i^{\text{ème}}$ élément du tableau T_1 , où i est un indice entier,
- $T_2[N_{b1}, N_{b2}]$ le tableau T_2 bidimensionnel de taille $N_{b1} \times N_{b2}$ et d'éléments réels,
- $T_2[i,j]$ l'élément (i,j) du tableau T_2 où i et j sont des indices entiers,
- $T_2[i; :]$ la $i^{\text{ème}}$ ligne du tableau T_2 ,
- $T_2[:j]$ la $j^{\text{ème}}$ colonne du tableau T_2 ,
- $R_1(a,b)$ la routine R_1 dont les attributs sont les éléments a et b ,
- $a \leftarrow R_1(a,b)$ l'instruction remplaçant la variable a par le résultat 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,
- $F[I, (N + 1)^3]$ le tableau des coefficients g_{klm} (cf [4]),
- $F_i[(N+1)^3]$ le tableau des éléments de la $i^{\text{ème}}$ ligne du tableau F pour $i = 1, \dots, I$,
- $F_n[I]$ le tableau des éléments de la $n^{\text{ème}}$ colonne du tableau F pour $n = 1, \dots, (N + 1)^3$,
- LW la routine d'advection par le schéma de Lax Wendroff,
- $RK4_1$, $RK4_2$ et $RK4_3$ 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,
- $v_x[(N+1)^3]$ le tableau des vitesses d'advection constitué des points de collocation ξ_k ,
- $D_{1D}[N+1,N+1]$ le tableau contenant les éléments de la matrice de dérivation spectrale du problème monodimensionnel.

Données : $E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z, \Delta t, \Delta x, l, N, v_x, v_y, v_z$

1. **pour** $n=1, (N+1)^3$ **faire** //Boucle sur les colonnes de F
2. $F_n \leftarrow \text{LW}(F_n, v_x[n], l, \Delta x, \Delta t/2)$
3. $F[:,n] \leftarrow F_n$
4. **fin pour**
5. **pour** $i=1, l$ **faire** //Boucle sur les lignes de F
6. $F_i \leftarrow \text{RK4}_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$
7. $F_i \leftarrow \text{RK4}_2(F_i, \Delta t/2, D_{1D}, E_y[i], B_x[i], B_z[i], v_z, v_x)$
8. $F_i \leftarrow \text{RK4}_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$
9. $F_i \leftarrow \text{RK4}_3(F_i, \Delta t, D_{1D}, E_z[i], B_y[i], B_x[i], v_x, v_y)$
10. $F_i \leftarrow \text{RK4}_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$
11. $F_i \leftarrow \text{RK4}_2(F_i, \Delta t/2, D_{1D}, E_y[i], B_z[i], B_y[i], v_z, v_x)$
12. $F_i \leftarrow \text{RK4}_1(F_i, \Delta t/4, D_{1D}, E_x[i], B_z[i], B_y[i], v_y, v_z)$
13. $F[i, :] \leftarrow F_i$
14. **fin pour**
15. **pour** $n=1, (N+1)^3$ **faire** //Boucle sur les colonnes de F
16. $F_n \leftarrow \text{LW}(F_n, v_z[n], l, \Delta x, \Delta t/2)$
17. $F[:,n] \leftarrow F_n$
18. **fin pour**

2.5 Parallélisation

Afin de réaliser des calculs réalistes avec des boîtes de simulation de taille importante, des pas d'espace assez petits (de l'ordre de la longueur de Debye) et un grand nombre d'itérations en temps, et de manière à exploiter la puissance de calcul des machines massivement parallèles du CEA DAM, le code HELIOS a été parallélisé.

Pour ce faire, on a utilisé une méthode par décomposition de domaine et on fait le choix de découper le domaine $1Dx - 3Dv$ selon les impulsions. Comme l'indique la figure 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 9), en N_p sous tableaux F^{loc} de tailles $(N + 1)^3/N_p \times I$.

Afin de minimiser les communications entre processeurs, la parallélisation, implémentée en MPI³, est réalisée dans une seule direction de vitesse, la direction v_x (cf figure 2). Ainsi le nombre maximal de processeurs est égal à $N + 1$ le nombre de points de collocation dans cette direction.

Les gains de temps obtenus grâce à la parallélisation sont présentés dans [2].

³*Message Passing Interface.*

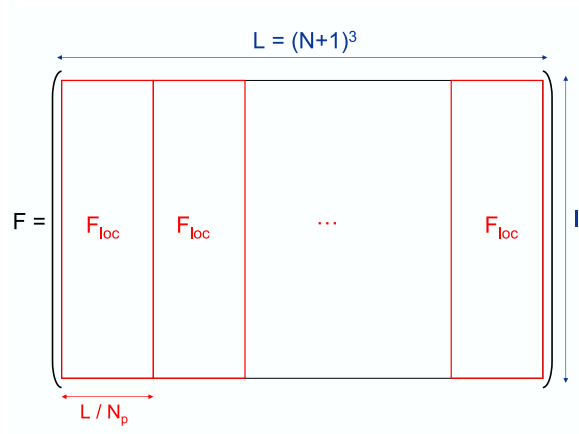


FIG 1 - Découpage sur N_p processeurs du tableau F des inconnues du problème.

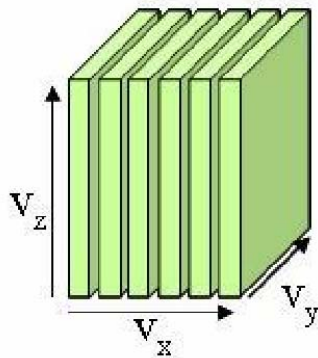


FIG 2 - Découpage de l'espace des vitesses dans la direction v_x .

3 Conditions aux limites "ouvertes"

3.1 Contexte physique et limitations des conditions périodiques

Sur une ligne de champ magnétique terrestre, les électrons énergétiques effectuent, après injection, des mouvements de rebonds entre leurs points miroir conjugués. Quand ils traversent la zone équatoriale de la ligne de champ, ils peuvent interagir fortement avec des ondes présentes à l'état naturel, en particulier avec des ondes électromagnétiques de mode whistler. Ces ondes peuvent à leur tour interagir avec les électrons quand leur amplitude est suffisamment grande. Des électrons sont alors dépiégés par diffusion en vitesse dans le cône de perte et la fonction de distribution électronique est ainsi globalement modifiée. Les interactions onde-particule déterminent donc l'évolution de la densité et du flux d'électrons piégés sur une ligne de champ. On s'intéresse en particulier à mettre en évidence une valeur limite de flux correspondant à une injection donnée d'électrons énergétiques.

Les conditions aux limites périodiques, les seules conditions aux limites disponibles dans une première version du code HELIOS, s'avèrent inadaptées à la simulation de ces phénomènes et des conditions aux limites dites "ouvertes", prenant en compte la réflexion des particules, la réflexion partielle des ondes aux bords du domaine spatial et la présence du cône de perte dans l'espace des vitesses doivent nécessairement être implantées dans le code.

3.2 Réflexion des ondes

Les ondes électromagnétiques se réfléchissent partiellement aux extrémités du domaine spatial de simulation. Ce phénomène est modélisé par une condition simple aux deux bords de la boîte de calcul qui permet d'obtenir en incidence normale le coefficient de réflexion voulu sur les amplitudes des champs.

Les champs électromagnétiques sont calculés via la résolution numérique des équations de Maxwell dans le domaine. Ces équations sont discrétisées par un schéma de différences finies d'ordre deux en espace et en temps : le schéma de Yee. En deux dimensions d'espace, il s'écrit comme suit :

$$\begin{cases} B_{i+1/2}^{n+1} &= B_{i+1/2}^n + s \frac{\Delta t}{\Delta x} (E_{i+1}^{n+1/2} - E_i^{n+1/2}), \\ E_i^{n+3/2} &= E_i^{n+1/2} + s \frac{\Delta t}{\Delta x} (B_{i+1/2}^{n+1} - B_{i-1/2}^{n+1}) - \Delta t j_i^{n+1}, \end{cases} \quad (10)$$

où les variables génériques E, B et j représentent les composantes (E_y, B_z, j_y) puis (E_z, B_y, j_z) et où s est un paramètre prenant la valeur -1 puis la valeur 1 .

La condition discrète de réflexion partielle des ondes est obtenue [1] à partir d'une condition d'absorption des ondes. Celle-ci s'écrit, pour le champ E par exemple, au bord gauche :

$$\partial_t E - s \partial_x E = 0, \text{ en } x = x_1,$$

et au bord droit :

$$\partial_t E + s\partial_x E = 0, \text{ en } x = x_I.$$

A ces égalités est ajouté un terme prenant en compte la réflexion partielle de l'onde pour une propagation dans le vide uniquement. On obtient au bord gauche l'expression suivante :

$$\partial_t E - s\partial_x E = r_g(\partial_t E + \partial_x E), \text{ en } x = x_1,$$

et au bord droit,

$$\partial_t E + s\partial_x E = r_d(\partial_t E - \partial_x E), \text{ en } x = x_I,$$

où l'on a noté r_g et r_d les coefficients de réflexion des ondes respectivement à gauche et à droite. Après discrétisation, ces conditions s'écrivent :

$$\begin{cases} E_1^n &= E_2^{n-1} + \beta(E_1^{n-1} - E_2^n), \\ E_I^n &= E_{I-1}^{n-1} + \beta(E_I^{n-1} - E_{I-1}^n). \end{cases} \quad (11)$$

où le coefficient β a l'expression suivante :

$$\beta = \frac{(1-r)/(1+r) - s\Delta t/\Delta x}{(1-r)/(1+r) + s\Delta t/\Delta x}. \quad (12)$$

Afin d'obtenir la réflexion partielle des ondes dans le domaine de simulation $[x_1, x_I]$, qui est non vide et que l'on appellera simplement "le domaine", il apparaît nécessaire d'ajouter des zones de vide de part et d'autre de la boîte, soit une maille de vide au bord gauche ainsi qu'au bord droit. On appellera le nouveau domaine de calcul $[x_0, x_{I+3/2}]$, "le domaine étendu". On obtient la valeur des champs sur l'ensemble du domaine en couplant les équations (10), donnant les valeurs des champs à l'intérieur du domaine : les $B_{i+1/2}^{n+1}$ pour $i = 1, \dots, I-1$ et les $E_i^{n+3/2}$ pour $i = 2, \dots, I-1$, aux équations donnant les champs aux bords : les équations (13-19).

- **Conditions sur les champs dans la maille de vide à gauche :**

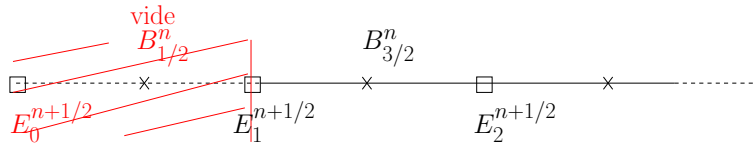


FIG 3 - Notation des variables dans la maille de vide à gauche.

Au bord gauche de la boîte étendue, on peut appliquer la condition de réflexion partielle des ondes dans le vide :

$$E_0^{n+1/2} = E_1^{n-1/2} + \beta(E_0^{n-1/2} - E_1^{n+1/2}). \quad (13)$$

On en déduit le champ B dans la maille de vide :

$$B_{1/2}^{n+1} = B_{1/2}^n + s \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(E_1^{n+1/2} - E_0^{n+1/2} \right), \quad (14)$$

ainsi que le champ E au bord gauche de la boîte physique :

$$E_1^{n+3/2} = E_1^{n+1/2} + s \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(B_{3/2}^{n+1} - B_{1/2}^{n+1} \right) - \Delta t j_1^{n+1}. \quad (15)$$

• **Conditions sur les champs dans la maille de vide à droite :**

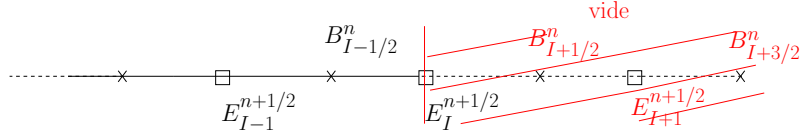


FIG 4 - Notation des variables dans la maille de vide à droite.

Le champ E est calculé au bord droit de la boîte physique à partir de l'expression suivante :

$$E_I^{n+3/2} = E_I^{n+1/2} + s \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(B_{I+1/2}^{n+1} - B_{I-1/2}^{n+1} \right) - \Delta t j_I^{n+1}, \quad (16)$$

avec les champs suivants dans la maille de vide :

$$B_{I+1/2}^{n+1} = B_{I+1/2}^n + s \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(E_{I+1}^{n+1/2} - E_I^{n+1/2} \right), \quad (17)$$

et

$$E_{I+1}^{n+3/2} = E_{I+1}^{n+1/2} + s \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(B_{I+3/2}^{n+1} - B_{I+1/2}^{n+1} \right). \quad (18)$$

Au bord droit du domaine étendu, la condition de réflexion des ondes dans le vide s'écrit sur le champ B de la manière suivante :

$$B_{I+3/2}^{n+1} = B_{I+1/2}^n + \beta (B_{I+3/2}^n - B_{I+1/2}^{n+1}). \quad (19)$$

Cette méthode de simulation de la réflexion partielle des ondes a été implémentée dans la routine `Maxwell_reflechissant()`⁴ dans le code HELIOS.

⁴Cette routine est écrite dans le fichier `Maxwell.cpp`.

3.3 Réflexion des particules et cône de perte

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 à ajouter dans le schéma de Lax-Wendroff, utilisé pour traiter l'advection des fonctions de distribution, 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.

On applique le schéma de Lax-Wendroff pour le calcul de la distribution de particules à tout point intérieur au domaine (x_2, \dots, x_{I-1}) . On rappelle que ce schéma, d'ordre deux en espace et en temps, s'écrit pour la discrétisation de l'équation de transport,

$$\partial_t f + \gamma \partial_x f = 0,$$

où γ est une constante réelle, de la manière suivante :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} - \gamma \frac{\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n}{\Delta x} = 0, \quad (20)$$

où $\phi_{i+1/2}^n$ est un flux numérique, qui a pour expression :

$$\phi_{i+1/2}^n = \frac{f_i^n + f_{i+1}^n}{2} - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{2}. \quad (21)$$

Aux bords de la boîte de simulation, on suppose que l'on a les égalités :

$$\begin{cases} f_{I+1}^n = f_I^n, \\ f_0^n = f_1^n. \end{cases} \quad (22)$$

Celles-ci conduisent aux expressions (23-24) pour les flux sortants et (25-26) pour les flux entrants dans le cas où les particules ne sont pas perdues, c'est à dire, si elles ne sont pas dans le cône de perte à leurs sortie du domaine.

• Flux sortants du domaine :



FIG 5 -

Le flux sortant à gauche du domaine, dans le cas $\gamma < 0$, s'écrit :

$$\phi_{1/2}^n = f_1^n, \quad (23)$$

et le flux sortant à droite, dans le cas $\gamma > 0$ vérifie l'égalité :

$$\phi_{I+1/2}^n = f_I^n. \quad (24)$$

• Flux entrants dans le domaine :

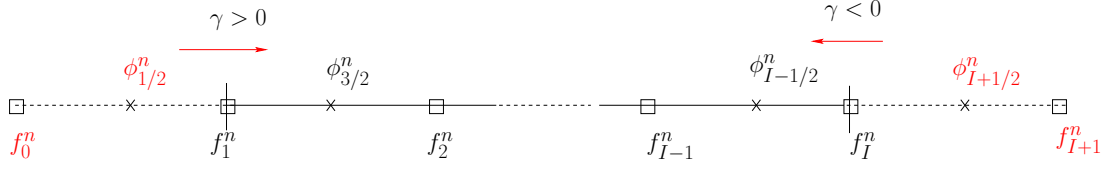


FIG 6 -

Si les particules ne sont pas dans le cône de perte, les flux entrants dans le domaine sont calculés à partir des flux sortants avec une vitesse opposée. Ainsi, on trouve les expressions suivantes pour le flux entrant à gauche, dans le cas $\gamma > 0$:

$$\phi_{3/2}^n = \frac{f_2^n + f_1^n}{2} + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_2^n - f_1^n}{2}, \quad (25)$$

et pour le flux entrant à droite, dans le cas $\gamma < 0$:

$$\phi_{I-1/2}^n = \frac{f_I^n + f_{I-1}^n}{2} + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_I^n - f_{I-1}^n}{2}. \quad (26)$$

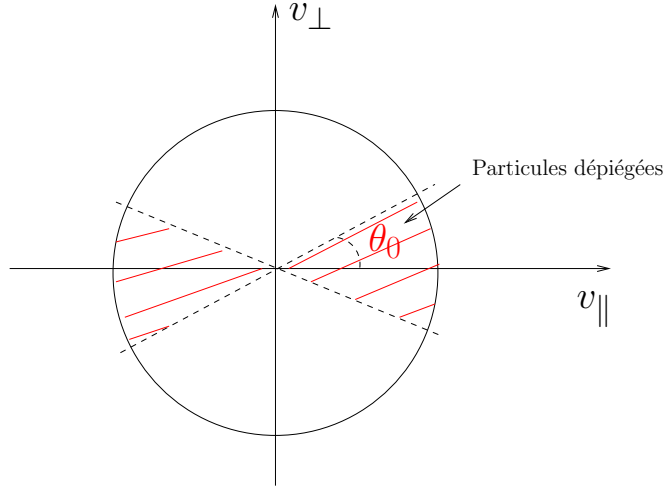


FIG 7 - Espace des vitesses et cône de perte.

En pratique, on doit résoudre $(N + 1)^3$ équations d'advection par itération dans le code et les vitesses d'advection associées sont les vitesses ξ_k , pour $k = 1, \dots, N$ correspondant aux points de collocation dans la direction v_x (cf l'algorithme au paragraphe 9). Si ces vitesses vérifient l'inégalité,

$$|\xi_k| < \sqrt{\xi_k^2 + \xi_l^2 + \xi_m^2} \cos \theta_0, \quad (27)$$

où l'on a noté θ_0 l'angle de cône de perte et où (ξ_k, ξ_l, ξ_m) est le vecteur de points de collocation associé, dans l'espace des vitesses⁵, on dira que les particules sont dans le cône de perte. Dans ce cas, les particules sont dépiégées et les flux entrants sont nuls :

$$\phi_{1/2} = \phi_{I+1/2} = 0. \quad (28)$$

Le calcul de la fonction de distribution aux bords de la boîte s'obtient alors à partir des égalités suivantes :

si $\gamma > 0$ on a,

$$\begin{aligned} f_1^{n+1} &= f_1^n + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_2^n - f_1^n}{2} \left(1 + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), & \text{si (27) vérifié,} \\ &= f_1^n - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_2^n + f_1^n}{2} + \gamma^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \frac{f_2^n - f_1^n}{2}, & \text{sinon,} \\ f_I^{n+1} &= f_I^n - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_I^n - f_{I-1}^n}{2} \left(1 + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), \end{aligned} \quad (29)$$

et si $\gamma < 0$,

$$\begin{aligned} f_1^{n+1} &= f_1^n - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_2^n - f_1^n}{2} \left(1 - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), \\ f_I^{n+1} &= f_I^n + \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_I^n - f_{I-1}^n}{2} \left(1 - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \right), & \text{si (27) vérifié,} \\ &= f_I^n - \gamma \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{f_I^n + f_{I-1}^n}{2} - \gamma^2 \left(\frac{\Delta t}{\Delta x} \right)^2 \frac{f_I^n - f_{I-1}^n}{2}, & \text{sinon.} \end{aligned} \quad (30)$$

Cette méthode a été implémentée dans la routine `advectionLW_refl()`⁶ dans le code HELIOS.

⁵Les indices k, l et m sont fixés pour chaque équation.

⁶Cette routine est écrite dans le fichier `Advection.cpp`.

3.4 Validation des conditions “ouvertes”

Le cas test choisi pour la validation de conditions “ouvertes” dans le code HELIOS est une simulation d’instabilité whistler dans un plasma anisotrope. Les paramètres physiques de l’instabilité sont ceux donnés par Ossakow *et al.* [5] : l’anisotropie $a = 4$ et la vitesse thermique $v_{th} = 0.31$. Le domaine est de longueur 4π , la perturbation initiale est choisie d’amplitude 10^{-3} . On prend $N = 40$ points de collocation par direction de vitesse et $I = 80$ points en espace. Le pas de temps est pris de manière à vérifier les CFL des schémas numériques employés $\Delta t = 0.029$. Les calculs sont réalisés sur le super-calculateur du CEA, sur 40 processeurs.

Dans ce contexte, trois calculs différents doivent être réalisés afin de valider les méthodes mises en œuvre pour la simulation des conditions “ouvertes” : la réflexion des particules et la réflexion partielle des ondes.

3.4.1 Test des conditions de réflexion des particules sans cône de perte

Dans ce calcul, les conditions aux bords pour les ondes restent périodiques et l’angle de cône de perte θ_0 est nul.

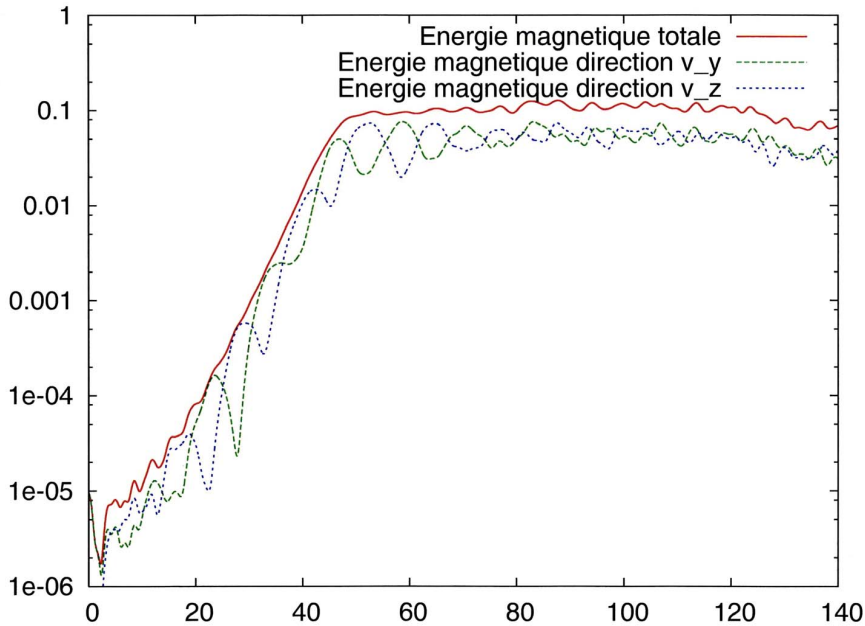


FIG 8 - Variation au cours du temps des composantes transverses de l’énergie magnétique pour une instabilité whistler avec $a = 4$, $v_{th} = 0.31$, $I = 80$, $N = 40$, $N_p = 40$, $L_x = 4\pi$, $\Delta t = 0.029$, $b_0 = 10^{-3}$.

Sur la figure 8 est représentée l’évolution, au cours du temps, des composantes transverses de l’énergie magnétique ainsi que leur somme. On peut observer sur cette

courbe que les composantes transverses sont bien en opposition de phase et que l'énergie magnétique totale croît de façon exponentielle au cours du temps. On vérifie également que le taux de croissance obtenu est comparable à la valeur théorique fournie par la théorie linéaire : $\gamma \approx 0.125$. Ce résultat confirme la validité du calcul réalisé.

3.4.2 Test des conditions de réflexion des particules avec cône de perte

La condition de cône de perte a bien été implantée dans le code HELIOS, mais n'a cependant pas été testée par manque de temps. Le calcul peut être facilement réalisé à l'aide des mots clés `cone_perte` et `angle_cone_perte` présents dans le fichier de lancement du code `lanceur.txt`. Le premier spécifie la présence d'un cône de perte et le second la valeur de l'angle θ_0 voulu pour la simulation.

3.4.3 Test des conditions de réflexion partielle des ondes

Ce test a été réalisé mais n'a malheureusement pas conduit à des résultats satisfaisants. Le calcul peut cependant être relancé avec de petites modifications dans l'algorithme de la routine `Maxwell_reflechissant()`, celui-ci ne correspondant pas exactement aux formules énoncées au paragraphe 3.2.

On introduit les notations suivantes pour le nouvel algorithme de calcul des ondes avec la condition de réflexion partielle aux bords du domaine :

$$\begin{array}{l|l}
 E[i] \leftarrow E_{i+1}^{n+3/2} & B[i] \leftarrow B_{i+3/2}^{n+1} \\
 E_{prec}[i] \leftarrow E_{i+1}^{n+1/2} & B_{prec}[i] \leftarrow B_{i+3/2}^n \\
 Ed \leftarrow E_{I+1}^{n+3/2} & Bd \leftarrow B_{I+3/2}^{n+1} \\
 Ed_{prec} \leftarrow E_{I+1}^{n+1/2} & Bd_{prec} \leftarrow B_{I+3/2}^n \\
 Eg_{prec} \leftarrow E_0^{n+1/2} & Bg \leftarrow B_{1/2}^{n+1} \\
 Eg_{pprec} \leftarrow E_0^{n-1/2} & Bg_{prec} \leftarrow B_{1/2}^n
 \end{array} \quad (31)$$

Algorithme corrigé :

// A gauche

$$\begin{array}{l}
 Eg_{prec} = E_{pprec}[0] + \beta (Eg_{pprec} - E_{prec}[0]); \\
 Bg = Bg_{prec} + s\Delta t/\Delta x (E_{prec}[0] - Eg_{prec}); \\
 B[0] = B_{prec}[0] + s\Delta t/\Delta x (E_{prec}[1] - E_{prec}[0]); \\
 E[0] = E_{prec}[0] + s\Delta t/\Delta x (B[0] - Bg) - \Delta t j[0];
 \end{array} \quad (32)$$

// A droite

$$\begin{aligned} Bd &= B_{prec}[I-1] + \beta (Bd_{prec} - B[I-1]); \\ B[I-1] &= B_{prec}[I-1] + s\Delta t/\Delta x (Ed_{prec} - E_{prec}[I-1]); \\ E[I-1] &= E_{prec}[I-1] + s\Delta t/\Delta x (B[I-1] - B[I-2]) - \Delta t j[I-1]; \\ Ed &= Ed_{prec} + s\Delta t/\Delta x (Bd - B[I-1]); \end{aligned} \tag{33}$$

for($i = 1; i \leq I - 2; i++$)
{

$$\begin{aligned} B[i] &= B_{prec}[i] + s\Delta t/\Delta x (E_{prec}[i+1] - E_{prec}[i]); \\ E[i] &= E_{prec}[i] + s\Delta t/\Delta x (B[i] - B[i-1]) - \Delta t j[i]; \end{aligned} \tag{34}$$

}

4 Conclusion et perspectives

La précision de l'intégration directe du système d'équations par une méthode numérique déterministe est obtenue au prix d'une complexité algorithmique importante. Les méthodes employées dans le code HELIOS permettent une forte réduction de cette complexité. Ainsi, le code parallélisé a permis l'obtention de simulations en des temps raisonnables. Par exemple, une simulation à deux espèces électroniques nécessitant le calcul de $2 \times 400 \times (40)^3 = 25.6 \cdot 10^6$ variables par pas de temps a été obtenue en 230 heures, ce qui correspond à 17000 itérations. Ces temps de calcul sont comparables aux temps de calcul de codes PIC non parallèles (par exemple TELSAT). Ils sont cependant encore grands devant les temps de calculs obtenus avec un code PIC parallélisé (par exemple CALDER). Toutefois, la performance du code peut encore être améliorée. La parallélisation, 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. Une parallélisation par décomposition de domaine en espace avec recouvrement pourrait être envisagée. Elle permettrait de réduire fortement les temps de calcul en diminuant le nombre de communications et d'utiliser ainsi un nombre plus important de processeurs.

D'autre part, des conditions aux limites "ouvertes", nécessaires pour simuler de manière "réaliste" la dynamique des populations d'électrons énergétiques dans les ceintures de radiation sur des temps courts après l'injection des particules, ont été implantées dans le code HELIOS. Trois cas tests ont été proposés afin de valider les routines associées. La condition de réflexion des particules sans cône de perte a été validée, ce même calcul avec un cône de perte n'a pas été lancé par manque de temps et un calcul avec des conditions de réflexion partielle des ondes n'a pas permis de valider la méthode employée car l'algorithme écrit dans le code actuel présente une erreur de calcul. La correction de cet algorithme est donnée dans ce rapport.

Références

- [1] ENGQUIST B. AND MAJDA A., *Math. Comput.*, **31**, 629, 1977.
- [2] 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.
- [3] LE BOURDIEC S., *Premiers résultats de validation du code HELIOS basé sur une méthode pseudo-spectrale pour la résolution numérique du système de Vlasov-Maxwell 1Dx-3Dv*, Rapport CEA/DIF/DPTA/SPPE N°67/DO, 2006.
- [4] LE BOURDIEC S., *Méthodes déterministes de résolution des équations de Vlasov-Maxwell relativistes en vue du calcul de la dynamique des ceintures de Van Allen*, Thèse de l'Ecole Centrale Paris, 2007.
- [5] OSSAKOW S.L., OTT E. AND HABER I., *Nonlinear evolution of whistler instabilities*, *Phys. Fluids*, 15(12), 2314-2326, 1972.
- [6] SYDORA R. D., *Low-noise electromagnetic and relativistic particle-in-cells plasma simulation models*, *J. Comput. and Applied Mathematics*, 109, 243-259, 1999.