

Modélisation le code Particle-in-Cell (PIC)

Le domaine de la simulation des plasmas est généralement compartimenté en deux approches. Lorsque les interactions coulombiennes dominent devant les effets cinétiques (si la densité d'énergie potentielle électrostatique est supérieure à la densité d'énergie cinétique), le plasma est dit couplé, ou dense, et présente des propriétés proches d'un fluide. Pour de très petits échantillons, il est possible de traiter les N^2 interactions nécessaires pour résoudre le problème à N corps ; c'est le cas dans les codes de dynamique moléculaire. Lorsque la taille de l'échantillon augmente, cette méthode devient trop coûteuse, et on résout alors les équations fluides du plasma. Dans le cas contraire, si les effets cinétiques sont prépondérants devant les interactions coulombiennes, le plasma est dit cinétique. Un grand nombre de données est alors nécessaire pour résoudre correctement le problème : on résout en fait la fonction de distribution de chaque espèce de particules qui est définie dans un espace à 6 dimensions (positions et impulsions). Les codes qui traitent de ce genre de plasmas sont les codes Vlasov et les codes particuliers. Les fonctions de distribution des différentes espèces sont discrétisées sur un maillage dans les codes Vlasov, et sur leurs caractéristiques dans les codes particuliers. Dans le cas des plasmas considérés en accélération par sillage laser, les codes utilisés appartiennent à cette dernière catégorie, et sont appelés codes PIC (pour Particle-In-Cell). Dans cette partie, nous allons tout d'abord présenter les caractéristiques générales des deux codes PIC qui ont été utilisés dans ce manuscrit, et que sont CALDER [Lefebvre *et al.*, 2003] et CALDER-Circ [Lifschitz *et al.*, 2009]. Ensuite, nous décrirons et validerons la méthode de calcul du rayonnement.

III.1 Fonctionnement d'un code PIC

III.1.1 Principe général de la méthode PIC

Prenons des ordres de grandeur typiques d'une simulation d'accélération par sillage laser. Afin de pouvoir prendre en compte la formation du sillage ainsi que la distribution transverse du laser, et en supposant une densité de $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le plasma qui doit être simulé peut être assimilé à une boîte carrée d'environ $100 \mu\text{m}$ de côté, ce qui représente $N = 5 \times 10^{12}$ particules.

Le nombre de particules n'est pas seulement trop grand pour pouvoir considérer les N^2 interactions entre particules ; il l'est déjà pour simplement traiter les N particules individuellement. Ainsi, plutôt que de considérer les N_i particules de l'espèce i , on considère la fonction de distribution f_i pour cette espèce. $f_i(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)\delta V \delta p^3$ représente alors le nombre de particules de l'espèce i présentes dans un petit volume δV centré en \mathbf{x} et dans un petit volume de l'espace des impulsions δp^3 centré en \mathbf{p} à un temps t . Dans l'approche cinétique et en négligeant

les collisions entre particules, l'évolution de f_i est alors donnée par l'équation de Vlasov :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \nabla f_i + q_i (\mathbf{E} + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}) \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{p}_i} = 0, \quad (93)$$

avec q_i la charge de l'espèce i . L'équation de Vlasov décrit l'évolution de la répartition des particules soumises à la force de Lorentz, qui dépend des champs électromagnétiques présents. Afin de pouvoir totalement résoudre le système (particules+champs), elle doit donc être couplée avec les équations de Maxwell (3)-(6).

Les équations de Maxwell permettent alors de décrire l'évolution des champs à partir des termes sources que sont la densité de courant \mathbf{J} et de charge ρ . Ces densités de charge totale et de courant total sont obtenues en sommant les deux premiers moments des distributions f_i pour chaque espèce i :

$$\rho = \sum_i \rho_i = \sum_i q_i \int f_i(x, p, t) d\mathbf{p}, \quad (94)$$

$$\mathbf{J} = \sum_i \mathbf{J}_i = \sum_i q_i \int \mathbf{v} f_i(x, p, t) d\mathbf{p}. \quad (95)$$

Toutes ces équations forment le système de Maxwell-Vlasov et suffisent à décrire complètement l'évolution du système (particules+champs). Cependant, la résolution numérique de l'équation de Vlasov sur un maillage des coordonnées \mathbf{x} et des impulsions \mathbf{p} serait trop coûteuse et limitée à 2×2 dimensions. Au lieu de cela, dans l'approche PIC, la résolution de Vlasov se fait en discrétisant la fonction de distribution f_i pour chaque espèce :

$$f_i(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \sum_j^{N_m} W_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j(t)). \quad (96)$$

C'est-à-dire que la fonction de distribution est maintenant définie comme une somme finie de diracs de poids W_j et centrés aux coordonnées $(\mathbf{x}_j(t), \mathbf{p}_j(t))$ au temps t , que l'on appelle macro-particules. Une macro-particule regroupe ainsi plusieurs particules ayant des coordonnées très proches dans l'espace des phases 6D et pouvant être approximées par $(\mathbf{x}_j(t), \mathbf{p}_j(t))$. Elle possède un poids W_j qui détermine le nombre d'électrons réels qu'elle représente. On peut alors résoudre l'équation de Vlasov par la méthode des caractéristiques en remarquant que f_i se conserve le long des trajectoires $(\mathbf{x}_j(t), \mathbf{p}_j(t))$. En conséquence de l'application de cette méthode, la macro-particule suit une trajectoire $(\mathbf{x}_j(t), \mathbf{p}_j(t))$ identique à celle qu'aurait suivie une particule réelle initialement placée à la même position. Ceci permet d'identifier les trajectoires des macro-particules à des trajectoires physiques.

Les équations de Maxwell sont quant-à elles en général résolues à l'aide d'un schéma aux différences finies, sur un maillage discrétisant l'espace. Ceci implique

d'interpoler successivement les champs connus aux points de ce maillage vers les positions des macro-particules $\mathbf{x}_j(t)$, puis de projeter les charges et les courants des macro-particules connues aux positions $\mathbf{x}_j(t)$ sur les points du maillage.

Au final, la résolution numérique du système impose de répéter les opérations suivantes à chaque itération temporelle (cf figure 13) :

- interpolation des champs $\mathbf{E}(t)$ et $\mathbf{B}(t)$ du maillage vers les positions des macro-particules $\mathbf{x}_j(t)$.
- résolution des équations du mouvement des macro-particules pour calculer les nouvelles positions $\mathbf{x}_j(t + \Delta t)$.
- projection des densités de charge $\rho_j(t + \Delta t)$ et de courant $\mathbf{J}_j(t + \Delta t)$ vers les nœuds du maillage
- résolution des équations de Maxwell pour le calcul des champs $\mathbf{E}(t + \Delta t)$ et $\mathbf{B}(t + \Delta t)$.

La simplicité de ce schéma rend la méthode PIC assez intuitive à implémenter, ce qui, avec la variété des problèmes physiques qu'elle permet de représenter, explique son succès en physique des plasmas à partir des années 60 [Dawson, 1983, Hockney & Eastwood, 1988, Birdsall & Langdon, 2004]. Après avoir vu le fonctionnement global de la méthode PIC, nous allons dans la suite développer successivement les différentes étapes de la boucle PIC pour introduire différents paramètres numériques importants.

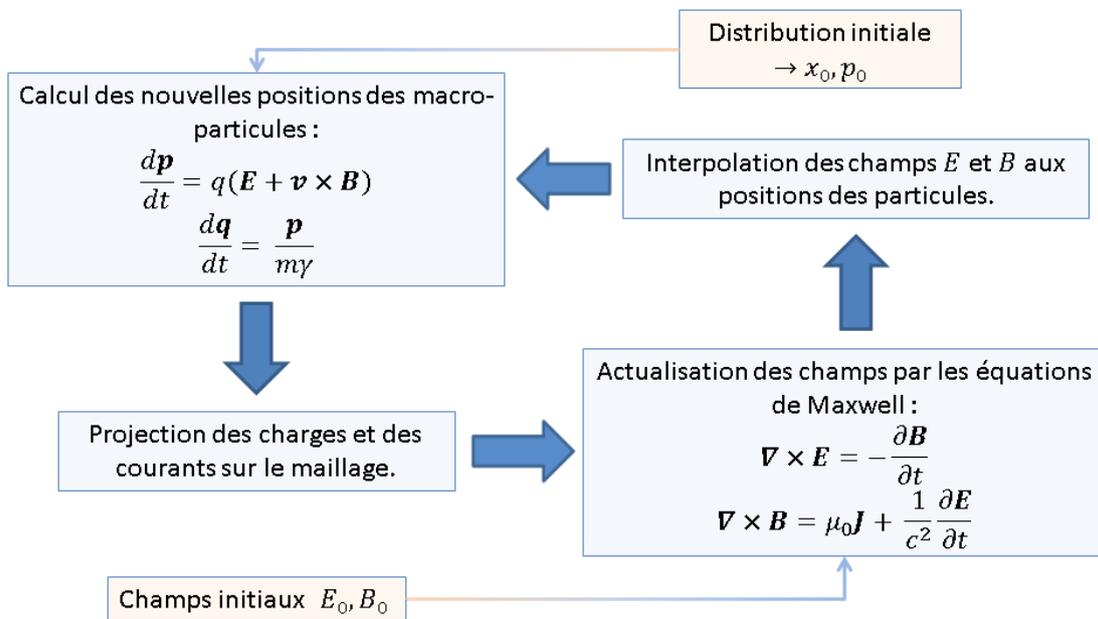


FIGURE 13 – Schéma de la boucle PIC. La boucle principale réalisée à chaque itération est représentée en bleu, et en orange sont indiquées les conditions initiales pour la première itération. À noter que les conditions aux limites qui interviennent dans la résolution du mouvement des particules et des équations de Maxwell en bord de boîte de simulation ne sont pas prises en compte dans ce schéma.

III.1.2 La boucle PIC

Nous allons maintenant voir le fonctionnement plus précis de la boucle PIC. La résolution des équations de Maxwell impliquant un maillage spatial, on introduit les pas spatiaux $\Delta x, \Delta y$ et Δz dans les 3 directions de l'espace, ainsi que le pas de temps Δt . De plus, on introduit la notation $\mathbf{E}_{i,j,k}^n$ pour les champs, qui désigne le champ \mathbf{E} au temps $n\Delta t$ et au point de maillage $(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$. De même, on introduit la notation $(\mathbf{x}_m^n, \mathbf{p}_m^n)$ pour la macro-particule m (où on a abandonné la notation concernant le numéro de l'espèce).

La résolution des équations de Maxwell se fait en général en utilisant un schéma aux différences finies de type saute-mouton appelé schéma de Yee [Yee *et al.*, 1966]. Cette méthode de résolution implique de connaître \mathbf{E} et \mathbf{B} de manière décalée dans le temps d'un demi pas de temps $\Delta t/2$. De plus, les différentes composantes des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} ne sont pas connues en des points spatiaux identiques, mais en des points pouvant être décalés d'une demi maille selon le champ et la direction considérée, comme indiqué en figure 14. De la même manière, les positions des particules et leur impulsions sont connues à des temps séparés de $\Delta t/2$. Ces décalages spatiaux et temporels facilitent l'obtention de schémas centrés d'ordre 2.

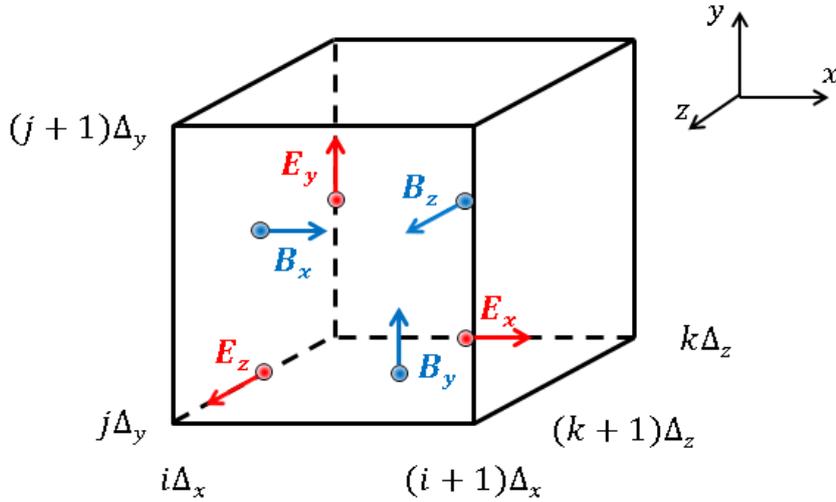


FIGURE 14 – Représentation de la maille dans le schéma de Yee. Le maillage représenté est le maillage primal passant par les nœuds i, j, k . On parle de maillage dual pour celui défini par les nœuds $i + 1/2, j + 1/2, k + 1/2$.

Interpolation des champs

Les équations de Maxwell étant résolues sur un maillage spatial, les champs \mathbf{E} et \mathbf{B} sont uniquement connus en certains points de ce maillage. Avec les notations définies précédemment, on a un accès direct dans le code aux valeurs calculées aux

points du maillage : $E_{x_{i+1/2,j,k}}^n$, $E_{y_{i,j+1/2,k}}^n$, $E_{z_{i,j,k+1/2}}^n$, $B_{x_{i,j+1/2,k+1/2}}^{n+1/2}$, $B_{y_{i+1/2,j,k+1/2}}^{n+1/2}$ et $B_{z_{i+1/2,j+1/2,k}}^{n+1/2}$.

Une macro-particule m étant libre d'évoluer dans tout l'espace, on interpole les champs en \mathbf{x}_m^n pour calculer son mouvement. On donne l'exemple de l'interpolation des champs E_x et B_x :

$$E_x^n(\mathbf{x}_m^n) = \sum_{i,j,k} E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n W_m S^\alpha(\mathbf{x}_m^n, \mathbf{x}_{i+\frac{1}{2},j,k}), \quad (97)$$

$$B_x^n(\mathbf{x}_m^n) = \sum_{i,j,k} B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^n W_m S^\alpha(\mathbf{x}_m^n, \mathbf{x}_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}), \quad (98)$$

où une interpolation temporelle linéaire est généralement effectuée pour obtenir \mathbf{B}^n : $\mathbf{B}^n = (\mathbf{B}^{n-1/2} + \mathbf{B}^{n+1/2})/2$. Les autres composantes des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} sont interpolées de manière similaire. La fonction S^α est appelée facteur de forme d'ordre α . En théorie, la sommation se fait sur tous les points du maillage, mais en pratique, l'ordre du facteur de forme choisi limite la sommation sur les quelques nœuds les plus proches de la particule.

Le facteur de forme le plus basique S^0 consiste à ne prendre en compte que le nœud le plus proche. On parle alors de méthode NGP (de l'anglais Nearest Grid Point) : en une dimension, $S^0(x_m, x_i) = 1$ si x_m est compris dans l'intervalle $[x_i - 1/2, x_i + 1/2]$ et 0 sinon. Les facteurs de forme d'ordres supérieurs sont alors construits récursivement par produits de convolution : $S^{\alpha+1}(x_m, x_i) = S^\alpha(x_m, x_i) * S^0(x_m - x_i, 0)$.

Dans le code CALDER utilisé dans cette thèse, il est possible de choisir entre les trois premiers ordres d'interpolation. L'augmentation du facteur de forme conduit à une diminution du bruit numérique, au détriment du temps de calcul.

Mouvement des particules et pousseur

Au terme de l'étape précédente, on a donc connaissance des champs $\mathbf{E}^n(\mathbf{x})$ et $\mathbf{B}^n(\mathbf{x}) = (\mathbf{B}^{n+1/2}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}^{n-1/2}(\mathbf{x}))/2$. Les équations du mouvement peuvent être résolues de plusieurs manières. Un choix classique est de les résoudre à l'aide du pousseur de Boris [Boris, 1970]. Selon ce schéma, l'impulsion $\mathbf{p}^{n+1/2}$ est calculée à partir de l'impulsion $\mathbf{p}^{n-1/2}$ par

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}_m^1 - \mathbf{p}_m^{n-1/2}}{\Delta t/2} &= q_m \mathbf{E}^n, \\ \frac{\mathbf{p}_m^2 - \mathbf{p}_m^1}{\Delta t} &= q_m \frac{\mathbf{p}_m^2 + \mathbf{p}_m^1}{2m_m \gamma_m^1} \times \mathbf{B}^n, \\ \frac{\mathbf{p}_m^{n+1/2} - \mathbf{p}_m^2}{\Delta t/2} &= q_m \mathbf{E}^n, \end{aligned}$$

avec $\gamma_m^1 = \sqrt{1 + \mathbf{p}_m^1{}^2}$. La mise en pratique de ce schéma implicite sépare l'action du champ électrique et la rotation due au champ magnétique en trois temps :

- une impulsion intermédiaire \mathbf{p}^1 est calculée après l'action du champ électrique pendant $\Delta t/2$,
- à partir de \mathbf{p}^1 , une deuxième impulsion intermédiaire \mathbf{p}^2 est calculée après l'action du champ magnétique sur tout le pas de temps Δt ,
- enfin, l'impulsion finale $\mathbf{p}^{n+1/2}$ est calculée à partir de l'action du champ électrique pendant le demi pas de temps restant sur \mathbf{p}_2 .

La nouvelle impulsion connue, il suffit de mettre à jour la position des macro-particules par :

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \Delta t \frac{\mathbf{p}^{n+1/2}}{m_e \gamma^{n+1/2}}. \quad (99)$$

D'autres pousseurs peuvent également être employés, notamment celui défini dans [Vay, 2008], qui réduit certains effets numériques néfastes lorsque les particules dérivent à une vitesse proche de c [Lobet, 2015].

Projection des charges et des courants

Cette étape permet de déterminer des densités de charge $\rho_{i,j,k}^{n+1}$ et de courant $\mathbf{J}_{i,j,k}^{n+1/2}$ sur les nœuds du maillage à partir de la nouvelle position des particules \mathbf{x}_m^{n+1} . Cette projection se fait en utilisant le même facteur de forme que dans l'étape d'interpolation des champs :

$$\rho = \sum_m q_m W_m S^\alpha(\mathbf{x}_{i,j,k}, \mathbf{x}_m), \quad (100)$$

$$\mathbf{J} = \sum_m q_m \mathbf{v}_m W_m S^\alpha(\mathbf{x}_{i,j,k}, \mathbf{x}_m). \quad (101)$$

Pour être valide physiquement, la projection des charges et des courants sur les nœuds de maillage doit néanmoins respecter l'équation de continuité ($\partial\rho/\partial t + \nabla\mathbf{J} = 0$). Cette méthode de projection faisant intervenir les facteurs de forme S^α n'inclut cependant pas la vérification de cette équation. Afin de respecter cette condition, la méthode de projection du courant couramment utilisée à la place est connue sous le nom d'algorithme d'Esirkepov [Esirkepov, 2001].

Résolution de Maxwell : Schéma de Yee

Une fois les termes de charge $\rho_{i,j,k}^{n+1}$ et de courant $\mathbf{J}_{i,j,k}^{n+1/2}$ connus, il reste maintenant à calculer les nouveaux champs \mathbf{E}^{n+1} et $\mathbf{B}^{n+3/2}$ avec les équations de Maxwell. Celles-ci sont résolues par le schéma de Yee [Yee *et al.*, 1966], qui présente la structure de calcul suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} - E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^n}{\Delta t} &= \frac{B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - \frac{B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - J_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+\frac{1}{2}}, \\
 \frac{E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+1} - E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^n}{\Delta t} &= \frac{B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta z} - \frac{B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - J_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}, \\
 \frac{E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+1} - E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^n}{\Delta t} &= \frac{B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \frac{B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}} - B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} - J_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}, \\
 \frac{B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{3}{2}} - B_{x_{i,j+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+1} - E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+1}}{\Delta y} - \frac{E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+1} - E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+1}}{\Delta z}, \\
 \frac{B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{3}{2}} - B_{y_{i+\frac{1}{2},j,k+\frac{1}{2}}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} - E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1}}{\Delta z} - \frac{E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+1} - E_{z_{i,j,k+\frac{1}{2}}}^{n+1}}{\Delta x}, \\
 \frac{B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{3}{2}} - B_{z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+1} - E_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1} - E_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}^{n+1}}{\Delta y},
 \end{aligned}$$

À noter que seules les équations (5) et (6) sont résolues par ce schéma pour le calcul des champs. Il faut cependant vérifier les deux autres équations de Maxwell. Le calcul de $\mathbf{B}^{n+3/2}$ par ces équations assure la conservation de la divergence du champ magnétique, ainsi si (4) est vérifiée au temps initial, elle le restera tout au long de la simulation. De même, si l'équation (3) est initialement vérifiée, alors on peut montrer qu'elle reste vérifiée si l'équation de continuité l'est aussi. L'utilisation de l'algorithme d'Esirkepov pour la projection des courants assure donc sa vérification.

La résolution des équations de Maxwell par le schéma de Yee impose certaines contraintes numériques sur les paramètres à utiliser. La méthode de Von Neumann permet d'analyser la stabilité de ce schéma aux différences finies, et d'en déduire la condition de Courant-Friedrichs-Levy (condition CFL) à vérifier :

$$c\Delta t \leq \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}. \quad (102)$$

La condition CFL liée au schéma de Yee limite le pas de temps Δt , pour assurer la stabilité du schéma. En pratique, pour l'étude du sillage laser, on doit résoudre longitudinalement la longueur d'onde laser, tandis que transversalement, on doit résoudre la longueur d'onde plasma $\lambda_p \gg \lambda_0$ dans les plasmas sous-denses considérés. On prend alors généralement $\Delta x \ll \Delta y = \Delta z$, et on se retrouve avec une condition CFL du type $c\Delta t < \Delta x$.

Une autre condition limite le choix de ces paramètres numériques. Dans le

code, la vitesse de l'impulsion laser est en effet légèrement faussée, car la relation de dispersion numérique d'une onde électromagnétique n'est pas strictement équivalente à la relation de dispersion physique. En considérant une onde de la forme $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$, on peut écrire sa relation de dispersion numérique dans le vide :

$$\frac{1}{c^2 \Delta t^2} \sin^2 \left(\frac{\omega \Delta t}{2} \right) = \frac{1}{c^2 \Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k_x \Delta x}{2} \right) + \frac{1}{c^2 \Delta y^2} \sin^2 \left(\frac{k_y \Delta y}{2} \right) + \frac{1}{c^2 \Delta z^2} \sin^2 \left(\frac{k_z \Delta z}{2} \right).$$

En simplifiant à une onde plane se propageant selon x , on peut alors calculer une vitesse de groupe numérique dans le vide donnée par

$$\frac{v_{g,n}}{c} = \frac{\partial \omega}{c \partial k_x} = \frac{\cos(k_x \Delta x / 2)}{\sqrt{1 - \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \sin^2(k_x \Delta x / 2)}}. \quad (103)$$

La vitesse numérique calculée est égale à la vitesse physique dans le vide si la condition $c\Delta t = \Delta x$ est respectée. On a vu que la condition CFL imposait de prendre $c\Delta t < \Delta x$, donc le schéma de Yee impose $v_{g,n} < c$. Cette restriction est gênante, car elle provoque une sous-estimation de la vitesse du laser, et donc une sous-estimation de celle de l'onde de sillage. Bien que très petite, cette sous-estimation de la vitesse du laser et des modes électromagnétiques en général peut avoir des conséquences néfastes, pour principalement trois raisons : (i) la vitesse de déphasage $c - v_g$ des électrons dans l'onde de sillage peut être mal modélisée si l'erreur $v_{g,n} - v_g$ est du même ordre de grandeur, ce qui conduira à mal estimer l'énergie finale des électrons ; (ii) les électrons relativistes peuvent avoir une vitesse supérieure à la vitesse de phase des ondes électromagnétiques même dans le vide, ce qui conduit à l'émission d'un rayonnement Cerenkov numérique non physique, et peut perturber significativement l'évolution du faisceau accéléré [Lehe *et al.*, 2013]; et (iii) la vitesse réduite du laser peut produire une injection d'électrons artificielle et mener à une surestimation de la charge piégée. Dans les simulations utilisant le schéma de Yee, il est donc nécessaire d'utiliser un pas de temps Δt le plus proche possible de $\Delta x/c$ afin de reproduire correctement la physique de l'accélération par sillage laser, même si utiliser $c\Delta t \ll \Delta x$ ne provoquera pas de divergence du calcul.

Cependant, la vitesse des particules accélérées peut-être très proche de c , et cette dernière condition ne suffit pas forcément à faire disparaître l'effet Cerenkov numérique, qui entraîne alors une croissance fallacieuse de l'émittance dans les simulations par rétro-action sur les électrons accélérés (l'émittance normalisée ϵ est définie dans la direction transverse y par $\epsilon_y = (1/m_e c) \sqrt{\langle y \rangle^2 \langle p_y \rangle^2 - \langle y p_y \rangle^2}$, où $\langle \cdot \rangle$ désigne la moyenne établie sur les électrons du faisceau). De manière générale, la rétroaction sur le faisceau des champs électromagnétiques créés par l'effet Cerenkov numérique a tendance à perturber le mouvement transverse des électrons, et donc leur oscillation bétatron. Au final, ceci peut conduire à une mauvaise estima-

tion du rayonnement émis. Pour calculer un mouvement des particules correct, en s'affranchissant de ces conditions, un autre schéma numérique pour la résolution de Maxwell a été implémenté dans CALDER, et peut être utilisé quand ces effets entrent en considération [Lehe *et al.*, 2013].

III.1.3 CALDER-Circ et autres codes

La partie précédente a présenté le fonctionnement général d'un code PIC cartésien tel que CALDER. Afin d'accélérer les calculs, ce code a été massivement parallélisé à l'aide de la bibliothèque MPI, ce qui permet d'utiliser les ressources des super-calculateurs : le code est lancé sur de nombreux processeurs qui se partagent le calcul en découpant le maillage spatial en sous-domaines. Pour les simulations habituelles de sillage laser, on ne simule pas toute l'étendue du plasma à chaque pas de temps, mais on utilise une fenêtre glissante qui suit l'impulsion laser pour minimiser la taille du maillage nécessaire.

Cependant, même avec ces techniques et avec les moyens numériques croissants qui sont à disposition, les études complètes en 3 dimensions restent très coûteuses, et restent par exemple inaccessibles pour réaliser des simulations lorsque la densité du plasma est très faible, ce qui implique des accélérations sur de plus grandes distances, ou lorsque la durée du laser considéré devient grande (sachant qu'il faut toujours résoudre la longueur d'onde laser dans la direction de propagation). Pour ces raisons, l'amélioration des codes PIC passe non seulement par l'implémentation d'effets nouveaux (collisions, ionisation, effets d'électrodynamique quantique...), mais aussi par le développement de nouveaux codes réduits permettant d'accélérer le calcul en profitant d'approximations pouvant être réalisées dans certains cas. Nous présentons dans la suite les autres codes qui ont été utilisés au cours de cette thèse.

Code PIC en géométrie cylindrique : CALDER-Circ

L'importance de considérer une géométrie 3D pour la modélisation de l'accélération par sillage laser, ainsi que le coût élevé des simulations 3D ont motivé l'élaboration de codes réduits. Pour le sillage laser, il est possible de tirer partie de la symétrie de révolution de l'enveloppe du laser ainsi que des champs plasma présents dans son sillage pour se "rapprocher" d'une géométrie cylindrique et réduire le coût des calculs. Cette approche a été utilisée pour la première fois par [Lifschitz *et al.*, 2009] dans le code CALDER-Circ.

Le fonctionnement de ce code est basé sur la décomposition en séries de Fourier des champs électromagnétiques. Pour cela, les champs sont exprimés dans le repère cylindrique (r, θ, x) , où x désigne toujours la direction de propagation, et on peut

écrire pour un champ quelconque F :

$$F(r, \theta, x) = \Re \left(\sum_{l=0}^{\infty} \tilde{F}^l(r, x) e^{-il\theta} \right), \quad (104)$$

où

$$\tilde{F}^0(r, x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(r, \theta, x) d\theta, \quad (105)$$

$$\tilde{F}^l(r, x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} F(r, \theta, x) e^{il\theta} d\theta, \quad l > 0. \quad (106)$$

Ici F représente n'importe quelle composante des champs \mathbf{E} , \mathbf{B} et \mathbf{J} ou ρ , et \tilde{F}^l est le coefficient de Fourier du mode l . Pour ces coefficients de Fourier, on a la relation suivante reliant les coefficients de $\partial\tilde{F}/\partial\theta$ avec ceux de \tilde{F} :

$$\frac{\partial(\tilde{F}^l(r, x)e^{-ilx})}{\partial\theta} = -il\tilde{F}^l(r, x)e^{ilx} \quad (107)$$

ce qui fait que pour chaque mode l , on peut écrire les équations de Maxwell (5) et (6) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \frac{\partial \tilde{E}_r^l}{\partial t} &= -\frac{il}{r} \tilde{B}_x^l - \frac{\partial \tilde{B}_\theta^l}{\partial x} - \mu_0 \tilde{J}_r^l, \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial \tilde{E}_\theta^l}{\partial t} &= \frac{\partial \tilde{B}_r^l}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{B}_x^l}{\partial r} - \mu_0 \tilde{J}_\theta^l, \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial \tilde{E}_x^l}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tilde{B}_\theta^l)}{\partial r} + \frac{il}{r} \tilde{B}_r^l - \mu_0 \tilde{J}_x^l, \\ \frac{\partial \tilde{B}_r^l}{\partial t} &= \frac{il}{r} \tilde{E}_x^l + \frac{\partial \tilde{E}_\theta^l}{\partial x}, \\ \frac{\partial \tilde{B}_\theta^l}{\partial t} &= -\frac{\partial \tilde{E}_r^l}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{E}_x^l}{\partial r}, \\ \frac{\partial \tilde{B}_x^l}{\partial t} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial(r\tilde{E}_\theta^l)}{\partial r} - \frac{il}{r} \tilde{E}_r^l. \end{aligned}$$

Chaque équation ne fait intervenir qu'un seul mode, ce qui en facilite la résolution, puisqu'on pourra les calculer pour chaque mode indépendamment. Ceci permet aussi de tronquer la série et de ne garder qu'un nombre de modes fini, même si le couplage avec le plasma rend non nuls l'ensemble des modes a priori.

Dans notre cas, la structure axisymétrique (donc indépendante de θ) de l'onde de sillage permet de la décrire uniquement à l'aide du mode $l = 0$. De même, si on considère une impulsion laser de polarisation quelconque selon $\mathbf{e}_\psi = \cos\psi\mathbf{e}_y + \sin\psi\mathbf{e}_z$, on peut écrire le champ laser dans les coordonnées cylindriques sous la

forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(r, \theta, x) &= E_0(r, x)\mathbf{e}_\psi = E_0(r, x)[\cos \psi(\cos \theta \mathbf{e}_r - \sin \theta \mathbf{e}_\theta) + \sin \psi(\sin \theta \mathbf{e}_r + \cos \theta \mathbf{e}_\theta)] \\ &= \Re(\tilde{E}_r^1(r, x)e^{-i\theta})\mathbf{e}_r + \Re(\tilde{E}_\theta^1(r, x)e^{-i\theta})\mathbf{e}_\theta. \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la définition (104) et identifié $\tilde{E}_r^1(r, x) = E_0(r, x)e^{i\psi}$ et $\tilde{E}_\theta^1(r, x) = -iE_0(r, x)e^{i\psi}$. Le mode $l = 1$ est donc suffisant pour décrire une impulsion laser dont l'enveloppe est axisymétrique.

Dans ces hypothèses, on voit donc que les deux premiers modes de Fourier sont suffisants pour décrire l'interaction globale entre le laser et le plasma.

En pratique, l'utilisation de CALDER-Circ avec deux modes pour la décomposition de Fourier permet de réduire fortement le temps de calcul (les modes $\tilde{F}^l(r, x)$ sont discrétisés sur un maillage 2D, ce qui permet de réduire considérablement le nombre de mailles et donc de macro-particules, même si en contrepartie, certaines étapes du calcul comme celles de projection des courants ou d'interpolation des champs devront être faites autant de fois qu'il y a de modes). Un nombre de modes plus élevé permet cependant d'augmenter la complexité des phénomènes physiques étudiés dans la simulation, avec par exemple la simulation d'impulsions non-axisymétriques [Corde *et al.*, 2013b].

Plus de détails sur ce modèle réduit, ainsi que sa validation quant-au nombre de modes utilisés, et par comparaison avec des simulation tri-dimensionnelles effectuées avec CALDER 3D, peuvent se trouver dans [Lifschitz *et al.*, 2009, Davoine, 2009]. À noter que la condition CFL à respecter dans CALDER-Circ est légèrement modifiée pour devenir

$$c\Delta_t \leq \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{l_{max}^2}{\Delta r^2}}} \quad (108)$$

où l_{max} est le mode le plus élevé gardé dans la troncature de la série de Fourier, et Δr désigne le pas spatial radial. Le pas de temps à utiliser diminue donc lorsque le nombre de modes considérés augmente.

Code PIC en approximation quasi-statique : WAKE

Afin de pouvoir réaliser des études paramétriques ou dans les cas plus coûteux pour étudier la propagation (longue impulsion laser, faible densité plasma), il est possible d'accélérer encore davantage le calcul en recourant à des approximations fortes supplémentaires. Le code relativiste et cinétique WAKE, qui a été développé par [Mora & Antonsen, 1997], en est un exemple.

Utilisant aussi la symétrie de révolution de l'enveloppe laser autour de son axe de propagation, ce code utilise de plus l'approximation quasi-statique : les électrons sont supposés interagir avec l'impulsion laser durant un temps faible devant le temps caractéristique d'évolution de celle-ci. Ceci permet de supprimer une di-

mension supplémentaire au problème en travaillant avec la variable $\xi = x - ct$, plutôt qu'avec x et t indépendamment. Cependant, cette approximation ne permet plus de modéliser l'injection des électrons. De plus une équation d'enveloppe est utilisée pour le laser, ce qui permet l'utilisation d'un maillage plus grossier car la longueur d'onde du laser ne doit plus être résolue (on doit alors seulement résoudre λ_p).

La géométrie de révolution réclamée par ce modèle ainsi que l'utilisation de l'approximation quasi-statique qui interdit d'étudier les phénomènes d'injections rend ce code adapté à l'étude de la propagation du laser et des phénomènes d'auto-focalisation ou de déplétion. Excepté en cas d'auto-injection où le code peut diverger, les résultats donnés restent bien physiques malgré le temps de calcul très réduit, ce qui fait de WAKE un outil de choix pour étudier le guidage laser et l'évolution de l'onde de sillage.

En dehors des codes utilisés dans cette thèse, et présentés jusqu'ici, beaucoup d'autres codes PIC sont rencontrés dans la littérature. Une liste fournie de ces codes peut être trouvée dans [Lobet, 2015].

L'arrivée de nouvelles générations de calculateurs, mais aussi de nouvelles installations laser plus puissantes requérant des simulations plus robustes et modélisant des plasmas plus longs placent les codes PIC en pleine période de mutation. L'amélioration future de leurs performances passe par un travail d'optimisation des codes [Fonseca *et al.*, 2013] avec une meilleure répartition de la charge de travail entre les processeurs (load balancing) et l'adaptation à de nouvelles architectures [Nakashima, 2015, Surmin *et al.*, 2016]. Parallèlement à cette optimisation numérique, la décomposition azimutale des champs telles que présentée dans CALDER-Circ peut être complétée avec le développement d'un algorithme spectral [Lehe *et al.*, 2016], où les équations de Maxwell ne sont plus résolues par différences finies, ce qui est prometteur pour l'utilisation de codes PIC non plus dans le référentiel du laboratoire, mais en référentiel accéléré (on parle de boosted frame) [Vay, 2007, Martins *et al.*, 2010], ce qui réduirait drastiquement les temps de calcul.

III.2 Implémentation du calcul du rayonnement

Les codes PIC présentés ci-dessus permettent la simulation de l'interaction laser-plasma et le calcul de l'accélération des électrons. On a vu dans la partie II.4 que seule la trajectoire de la particule était nécessaire pour calculer le rayonnement émis ; la connaissance des champs appliqués sur la particule est donc superflue.

Le calcul du rayonnement est basé sur la formule (77) que l'on rappelle ici :

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 c \epsilon_0} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}]}{(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^3} e^{i\omega(t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(t)/c)} dt \right|^2. \quad (109)$$

Cette formule permet de calculer l'énergie rayonnée par un électron par unité de fréquence et par unité d'angle solide. Même si elle paraît plus simple, car elle évite notamment de calculer l'accélération, on n'utilise pas la formule (78), car il a été montré qu'elle conduisait à un calcul du rayonnement incorrect à cause de l'influence des termes de bords négligés [Chen *et al.*, 2013] (correspondant au début et à la fin du mouvement) lorsque le nombre d'oscillations est petit < 10 , ce qui est le cas dans le calcul du rayonnement émis par une source bétatron.

Le calcul du rayonnement bétatron ne nécessitant pas plus d'informations que la trajectoire de la particule, deux solutions sont possibles : l'implémentation directe dans le code PIC, ou bien le calcul en post-traitant les trajectoires des particules accélérées qui ont été préalablement enregistrées pendant la simulation PIC. Dans cette section, nous allons voir comment calculer le rayonnement, et quelles sont les conditions qui s'appliquent pour que ce calcul soit correct.

III.2.1 Incohérence du rayonnement

Pour pouvoir calculer le rayonnement émis par tout le faisceau électronique, il est nécessaire de faire une hypothèse sur la nature du rayonnement. En effet, le rayonnement total s'écrit comme la somme du rayonnement émis par chacun des N_e électrons :

$$\frac{d^2 I_{tot}}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 c \epsilon_0} \left| \sum_{i=1}^{N_e} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}_i) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}_i]}{(1 - \boldsymbol{\beta}_i \cdot \mathbf{n})^3} e^{i\omega(t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_i(t)/c)} dt \right|^2, \quad (110)$$

où on remarque que la somme est effectuée avant le calcul du module : il faut considérer que les contributions de chaque électron peuvent s'ajouter de manière cohérente ou non.

On peut simplifier le raisonnement en supposant que les électrons partent de positions initiales différentes, mais suivent ensuite le même mouvement, et donc émettent tous le même rayonnement, à un facteur de phase près. On considère l'émission à une longueur d'onde $\lambda_\delta = 2\pi c/\omega_\delta$. Si la distribution des électrons est uniforme, alors les maxima de l'onde électromagnétique émise par un électron en x_e vont se compenser avec les minima de l'onde émise par l'électron situé en $x_e + \lambda_\delta/2$, et le rayonnement total sera nul.

À l'inverse, si les électrons sont regroupés périodiquement, tous les λ_δ , en faisceaux de longueur très courte devant λ_δ (ou si la taille totale du faisceau d'électrons est très petite devant λ_δ), les champs émis vont se superposer et se sommer, et le rayonnement sera cohérent. Dans ce cas, l'énergie rayonnée totale sera proportionnelle au nombre de particules au carré :

$$\frac{d^2 I_{tot}}{d\omega d\Omega} = N_e^2 \frac{d^2 I_e}{d\omega d\Omega}, \quad (111)$$

où I_e désigne l'énergie rayonnée par un seul électron.

Dans le cas intermédiaire où la distribution électronique est aléatoire, alors le rayonnement total est incohérent ; l'énergie totale correspond à la somme des énergies émises par chaque électron et devient ainsi :

$$\frac{d^2 I_{tot}}{d\omega d\Omega} = N_e \frac{d^2 I_e}{d\omega d\Omega}, \quad (112)$$

Dans le cas du rayonnement bétatron, on peut considérer que les électrons sont aléatoirement répartis sur la longueur du faisceau qui est de l'ordre de la longueur d'onde plasma λ_p . Le rayonnement émis est donc incohérent pour toutes les longueurs d'ondes d'intérêt (de l'ordre de $2\pi c/\omega_c \ll \lambda_p$). On fera cette hypothèse dans la suite pour le calcul du rayonnement.

III.2.2 Fréquence limite

L'implémentation du rayonnement total peut donc être déterminée à partir des équations (110) et (112), en tenant compte que la sommation doit se faire non pas sur les N_e électrons mais sur les N_m macro-particules, ce qui donne :

$$\frac{d^2 I_{tot}}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^3 c \varepsilon_0} \sum_{m=1}^{N_m} W_m \left| \sum_{n'=1}^{N_T} \frac{\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}_m^{n'}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}_m^{n'}]}{(1 - \boldsymbol{\beta}_m^{n'} \cdot \mathbf{n})^3} e^{i\omega(t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_m^{n'}(t)/c)} \Delta t' \right|^2, \quad (113)$$

où le mouvement des électrons a été échantillonné selon un intervalle de temps $\Delta t'$, N_T désignant le nombre total de pas de temps et $X_m^{n'}$ la grandeur X pour la macro-particule m considérée au pas de temps $n' \Delta t'$. On rappelle que W_m est le poids de la macro-particule m .

La trajectoire des particules étant échantillonnée, il existe une fréquence limite au delà de laquelle on ne pourra pas calculer le rayonnement à cause du phénomène de repliement de spectre rencontré en théorie du signal. La fréquence d'échantillonnage de la trajectoire est $1/\Delta t'$, ce qui correspond à une fréquence de Nyquist $1/(2\Delta t')$. Dans le référentiel du laboratoire d'observation des électrons, cette fréquence devient $\gamma^2/\Delta t'$ par effet Doppler relativiste (de même que dans la formule (85)), ce qui, en terme de pulsation, se traduit par

$$\omega_l = \frac{2\pi\gamma^2}{\Delta t'}. \quad (114)$$

Dans le calcul du rayonnement, on filtrera le rayonnement émis aux pulsations supérieures à la pulsation limite ω_l caractéristique de chaque électron d'énergie γ .

Pour une simulation d'accélération par sillage laser réalisée par un code PIC, il faut résoudre λ_0 dans la direction de propagation, c'est-à-dire choisir $\Delta x \sim \lambda_0/50$, ce qui implique l'utilisation d'un pas de temps Δt de l'ordre de $0.1 \omega_0^{-1}$ en suivant la condition CFL (102). La pulsation limite associée à cet échantillonnage

des trajectoires due à la méthode des différences finies du code PIC est donc $\omega_l \sim 20\pi\gamma^2\omega_0$. La pulsation critique du rayonnement bétatron émis par le même électron est donnée par l'équation (87), donc on a la relation suivante :

$$\frac{\omega_l}{\omega_c} \sim \frac{80}{y_0\omega_0/c} \frac{\omega_0^2}{\omega_p^2}$$

L'amplitude du mouvement bétatron étant inférieure à la dizaine de microns, on a donc généralement $\omega_l/\omega_c > \omega_0^2/\omega_p^2 \gg 1$. Le pas de temps du code PIC permet donc de calculer l'intégralité du spectre bétatron. En pratique, les trajectoires calculées par le code PIC sont même re-échantillonnées sur de plus grands intervalles de temps $\Delta t' > \Delta t$ afin d'accélérer le calcul, sans perdre d'informations sur le rayonnement. Cependant, il est nécessaire de faire attention à cette fréquence limite lors du choix de $\Delta t'$, en particulier pour le calcul d'autres types de rayonnement émis à plus hautes fréquences alors que des énergies électroniques similaires sont utilisées, comme pour le calcul du rayonnement Compton [Ta Phuoc *et al.*, 2012].

III.2.3 Code 'tout-en-un' ou post-traitement ?

Plusieurs possibilités s'offrent à nous pour l'implémentation de l'équation (113). Dans le code parallélisé CALDER, chaque processeur s'occupe d'une partie du maillage. Ainsi, dans les cas d'accélération par sillage laser, la forte charge électronique (représentée par un nombre important de macro-particules) qui se retrouve de manière très localisée à l'arrière de la cavité accélératrice confère une surcharge de travail aux quelques cœurs qui traitent cette région. Cette surcharge de quelques cœurs ralentit le calcul global. Ce sont de plus ces électrons qui émettent le rayonnement bétatron, et il n'y a pas d'intérêt à calculer le rayonnement émis par les électrons du plasma ambiant. Seuls les électrons ayant dépassé une énergie seuil sont comptabilisés dans le calcul du rayonnement. Le calcul du rayonnement, qui est assez lourd à cause de la discrétisation du résultat selon la fréquence ω et l'angle solide Ω (qui implique de calculer l'expression (113) pour chaque point fréquentiel et d'angle solide voulu) a pour effet d'accentuer drastiquement cette surcharge de travail pour les quelques cœurs traitant les particules accélérées. Il n'est pas viable d'un point de vue calculatoire de modéliser directement le rayonnement bétatron dans une simulation PIC.

Dans le cas du rayonnement bétatron, il est donc préférable d'enregistrer les positions des particules énergétiques au cours de leur accélération, et de calculer le rayonnement dans un module de post-traitement dont la parallélisation a pour effet de redistribuer les macro-particules vers tous les processeurs. C'est ce choix qui sera fait dans la suite du manuscrit, à chaque fois qu'un calcul de rayonnement bétatron sera présenté. Cependant, dans certains cas, l'implémentation directe dans le code

PIC du calcul du rayonnement peut présenter l'avantage de promouvoir un code 'tout-en-un', sans pour autant dégrader complètement le coût du calcul. C'est par exemple le cas pour le calcul de certaines sources comme le rayonnement Compton : l'interaction d'un faisceau d'électrons seul (i.e. sans plasma autour) avec une impulsion laser permet de bien répartir l'ensemble des particules dans la boîte de simulation, de manière à avoir une répartition homogène de la charge de calcul. Nous avons donc tout de même implémenté l'équation (113) dans les codes CALDER et CALDER-Circ, même si l'intérêt est limité pour l'étude des sources bétatrons. La modélisation d'une source Compton avec CALDER-Circ est en cours, en collaboration avec un autre groupe du CEA. Cependant cette étude n'est pas encore assez avancée pour être présentée dans cette thèse. Le travail préparatoire à cette étude, qui a consisté à implémenter et valider le calcul du rayonnement synchrotron dans CALDER et CALDER-Circ est néanmoins présenté dans la partie qui suit.

III.2.4 Validation du code

Premier test : rayonnement synchrotron

Pour valider le module de rayonnement implémenté dans CALDER et CALDER-Circ, on s'intéresse au rayonnement émis par les trajectoires de quelques particules tests. Pour commencer, on considère le cas d'une particule en mouvement synchrotron idéal, c'est-à-dire dans le vide et soumise uniquement à un champ magnétique B_z statique et uniforme. L'électron considéré possède une impulsion initiale p_0 selon l'axe y , et sa trajectoire est donc circulaire dans le plan (x, y) , son rayon étant le rayon de Larmor $R_L = p_0/eB_z$.

Dans le régime relativiste, la pulsation fondamentale du rayonnement est donnée par $\omega_{f,theo} = c/R_L$ et le rayonnement est émis à la pulsation $\omega_{f,theo}$ et aux harmoniques $\omega_n = n\omega_{f,theo}$, avec n entier naturel. D'après l'équation (80) appliquée dans le plan (x,y) , l'amplitude de ces harmoniques est modulée par une enveloppe de la forme :

$$\frac{d^2I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2}{12\pi^3 c \varepsilon_0} \left(\frac{\omega}{\omega_f} \right) \frac{1}{\gamma^4} K_{2/3}^2 \left(\frac{\omega}{3\gamma^3 \omega_f} \right). \quad (115)$$

Sur la figure 15, on peut voir les résultats de simulations CALDER-Circ avec différents paramètres, choisis de manière à ce que le rayon de Larmor reste constant. L'observation est réalisée dans la direction $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_x$, et on peut voir que le rayonnement est effectivement émis uniquement à certaines pulsations. De plus, le nombre d'harmoniques présentes dans le spectre augmente rapidement avec l'énergie de l'électron (on rappelle que la pulsation critique ω_c du rayonnement est proportionnelle à γ^3). Pour le cas où $p_0 = 1.25 m_e c$, l'amplitude des harmoniques ne correspond pas à celle prédite par l'enveloppe théorique (cf equation (115)). En effet, ce cas est encore faiblement relativiste, avec $\beta = 0.78$, si bien que l'hypo-

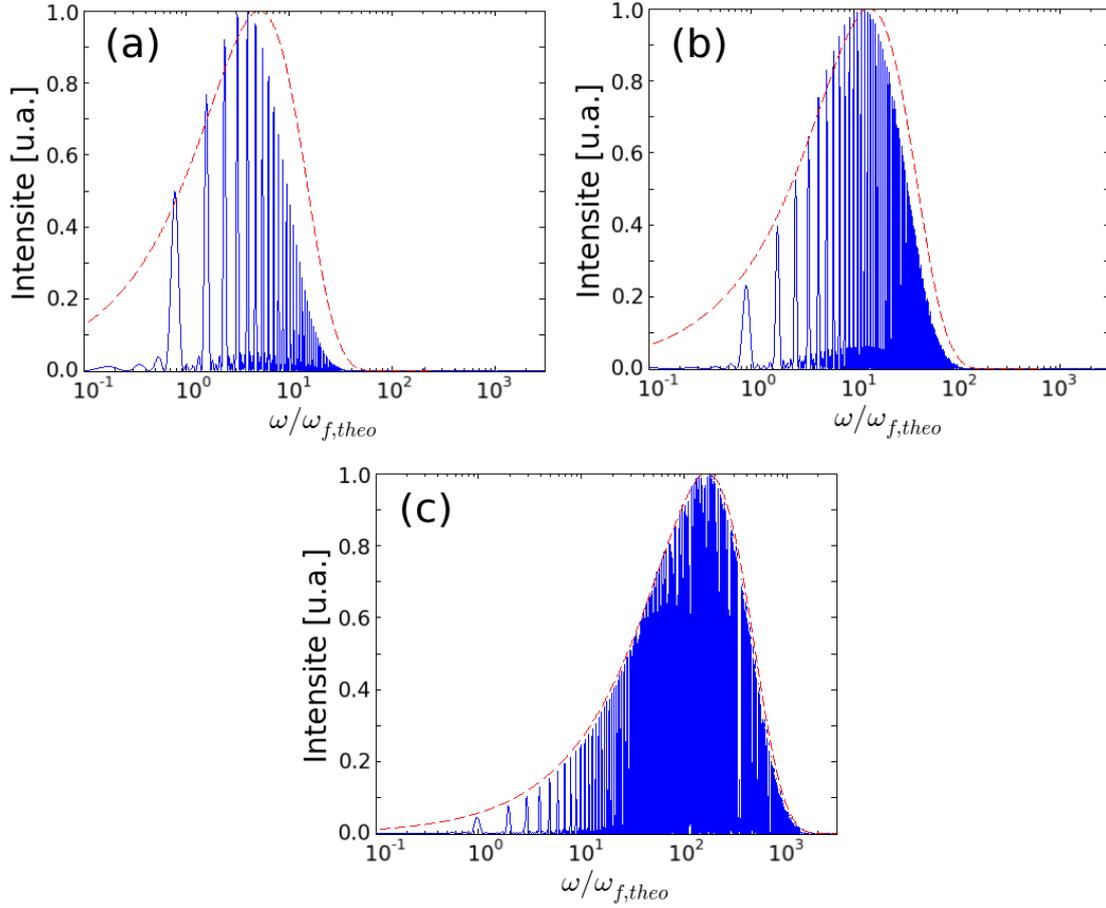


FIGURE 15 – Spectre rayonné dans le plan (x, y) par un électron dans un champ magnétique B_z uniforme et constant. En bleu, la simulation de l'énergie rayonnée par unité d'angle solide et par unité de fréquence $d^2I/d\omega d\Omega$ pour un électron en mouvement synchrotron de rayon de Larmor $R_L = c/\omega_f$. (a) $B_z = 1.25 m_e \omega_f / e$ et $p_{y,0} = 1.25 m_e c$, (b) $B_z = 2 m_e \omega_f / e$ et $p_{y,0} = 2 m_e c$. et (c) $B_z = 5 m_e \omega_f / e$ et $p_{y,0} = 5 m_e c$. En pointillés rouges, l'enveloppe théorique donnée par l'équation (115).

thèse $\beta \sim 1$ n'est pas vérifiée. En conséquence, la théorie surestime la pulsation fondamentale, comme on peut le constater, avec $\omega_{f,obs}/\omega_{f,theo} < 1$. Cependant, on peut voir que lorsque la particule devient plus relativiste, alors $\omega_{f,obs}/\omega_{f,theo} \sim 1$ et l'amplitude des harmoniques épouse la forme de l'enveloppe théorique (l'écart entre $\omega_{f,obs}$ et $\omega_{f,theo}$ et alors inférieur au millième, c'est-à-dire de l'ordre du pas de discrétisation du spectre dans la simulation).

Deuxième test : rayonnement Compton

Le test précédent réalisé dans le cas d'un mouvement simple a validé la forme du spectre rayonné, avec une émission X aux harmoniques attendues, et avec une

amplitude relative de ces harmoniques correcte. On réalise maintenant un test un peu plus compliqué, impliquant l'émission de rayonnement par un électron énergétique soumis à une onde laser contra-propagative, générant ainsi une source appelée source Compton. Dans ce schéma, les électrons oscillent fortement dans le champ laser et émettent un rayonnement fortement collimaté dans leur direction de propagation.

Pour des faisceaux d'électrons accélérés par sillage laser, l'avantage d'un tel schéma est de produire un rayonnement beaucoup plus énergétique que celui émis par la source bêatron, tout en conservant la petite taille et la courte durée de source issues du faisceau d'électrons. De plus, avec des faisceaux d'électrons monoénergétiques et une impulsion laser contra-propagative d'intensité modérée ($a_0 \ll 1$), il peut potentiellement conduire à l'obtention de rayonnement quasi-monoénergétique, contrairement à l'émission large bande de la source bêatron [Esarey *et al.*, 1993, Powers *et al.*, 2014]. Cependant, sa réalisation expérimentale nécessite deux impulsions lasers [Schwoerer *et al.*, 2006] et est donc plus complexe, même si la technique du miroir plasma permet d'utiliser la même impulsion pour accélérer les électrons et générer la source Compton [Ta Phuoc *et al.*, 2012].

On considère donc maintenant l'interaction d'un électron d'énergie initiale γ_0 , et de vecteur vitesse selon \mathbf{e}_x avec une onde plane contra-propagative polarisée linéairement selon y , telle que son potentiel vecteur normalisé est donné par $\mathbf{A} = A_0(\omega_0 t + k_0 x)\mathbf{e}_y$, avec $A_0 = \tilde{A}_0(\omega_0 t + k_0 x) \cos(\omega_0 t + k_0 x)$ où \tilde{A}_0 est l'enveloppe temporelle de l'impulsion laser. Dans la suite, les impulsions sont normalisées à $m_e c$. En utilisant les symétries du problème et le théorème de Noether, il est possible de montrer la conservation de l'impulsion généralisée transverse, de qui conduit à $p_y(t) = A_0(\omega_0 t + k_0 x(t))$, où $x(t)$ est la position de la particule, ainsi que la conservation de la quantité $\gamma + p_x$ [Esarey *et al.*, 1993]. On pose $C = \gamma_0 + p_{x,t=0} = \gamma_0 + \sqrt{\gamma_0^2 - 1}$, et on a alors $(p_x - C)^2 = \gamma^2 = 1 + p_x^2 + A_0^2(\omega_0 t + k_0 x)$, puis $p_x = (C^2 - 1 - A_0^2(\omega_0 t + k_0 x))/2C$. En injectant ce résultat dans $\gamma = C - p_x$, on obtient finalement :

$$\gamma = \frac{1 + C^2 + A_0^2(\omega_0 t + k_0 x)}{2C}. \quad (116)$$

Si on considère maintenant une impulsion laser de faible amplitude, telle que $a_0 \ll 1 \ll \gamma_0$, alors $\gamma \sim \gamma_0$ est constant durant l'interaction, et la position transverse de l'électron peut être décrite localement par une sinusoïde d'amplitude \tilde{A}_0/C , et de longueur d'onde $\lambda_u = \lambda_0/2$. De plus, le paramètre de force K de l'oscillation est égal à \tilde{A}_0 , et correspond donc à l'enveloppe de p_y .

Ceci peut être vérifié dans la figure 16, qui présente les résultats d'une simulation CALDER avec $\gamma_0 = 34.3$ pour l'électron, et où l'impulsion laser est une onde plane décrite par $\lambda_0 = 1.064 \mu\text{m}$, $\tau_{rms} = 100 \text{ fs}$ et $a_0 = 0.008$. Au centre de la gaussienne (avec $\tilde{A}_0 = a_0$), les électrons atteignent bien les valeurs attendues avec

$$y_{max}\omega_0/c = 1.17 \times 10^{-4} = a_0/2\gamma \text{ et } p_{y,max}/m_e c = 0.008 = a_0.$$

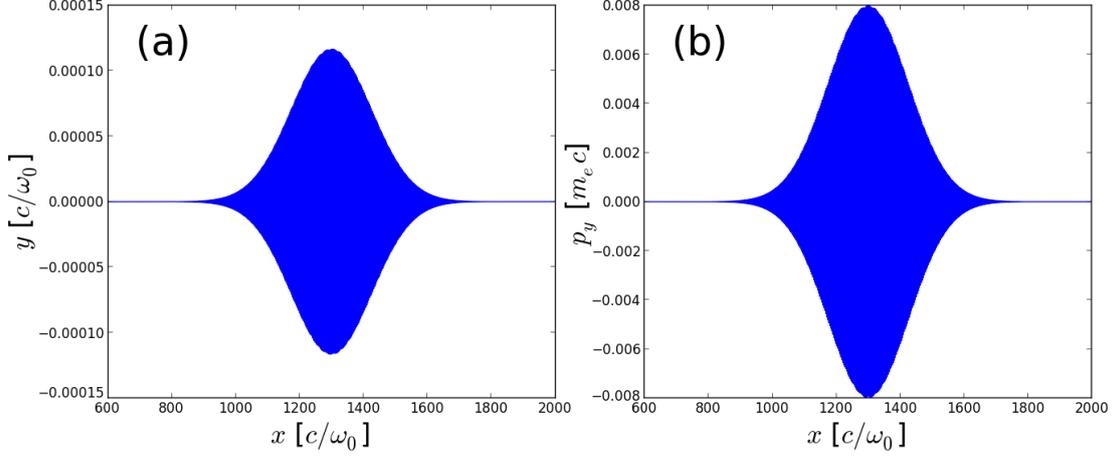


FIGURE 16 – Mouvement de l'électron lors de son interaction avec une onde plane contra-propagative. (a) Position transverse y et (b) impulsion transverse p_y en fonction de la position longitudinale x normalisée.

On peut donc écrire le mouvement transverse de l'électron sous la forme :

$$y(x) = \frac{K}{\gamma k_u} \cos(k_u x), \quad (117)$$

avec $k_u = 2\pi/\lambda_u$. La trajectoire est la même que celle qui a permis d'établir les caractéristiques de la source bétatron en considérant une énergie de l'électron constante. On peut donc appliquer le même raisonnement que dans la section II.4, avec $\lambda_\beta \rightarrow \lambda_u$, pour obtenir que le rayonnement Compton se fait à la pulsation fondamentale ω_f et ses harmoniques $n\omega_f$, avec n entier naturel, jusqu'à une pulsation critique ω_c où :

$$\omega_f = 2\gamma^2\omega_u \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2\theta^2\right)^{-1} = 4\gamma^2\omega_0 \left(1 + \frac{a_0^2}{2} + \gamma^2\theta^2\right)^{-1}, \quad (118)$$

$$\omega_c = \frac{3}{2}K\gamma^2\omega_u = 3\gamma^2a_0\omega_0, \quad (119)$$

avec θ l'angle d'émission du rayonnement par rapport à l'axe x .

De plus, en injectant l'expression du mouvement de la particule dans l'équation (72), on aboutit à la puissance moyenne rayonnée sur une oscillation dans le cas Compton :

$$\bar{P} = \frac{4\pi e^2 c \gamma^2 a_0^2}{3\varepsilon_0 \lambda_0^2}. \quad (120)$$

Dans la simulation précédente, on calcule le rayonnement uniquement pour une faible portion de la trajectoire de l'électron, lorsque son interaction avec l'impul-

sion laser est maximale ($\tilde{A}_0 \sim a_0$). La trajectoire concernée est représentée sur la figure 17. Sur cette distance, la trajectoire peut-être approximée comme sinusoïdale d'amplitude a_0/C . La puissance moyenne rayonnée calculée dans le code à l'aide de l'équation (113) est de $\bar{P} = 2.3 \times 10^{-7}$ W, ce qui correspond à l'estimation fournie par l'équation (120). Ainsi l'énergie rayonnée est correcte.

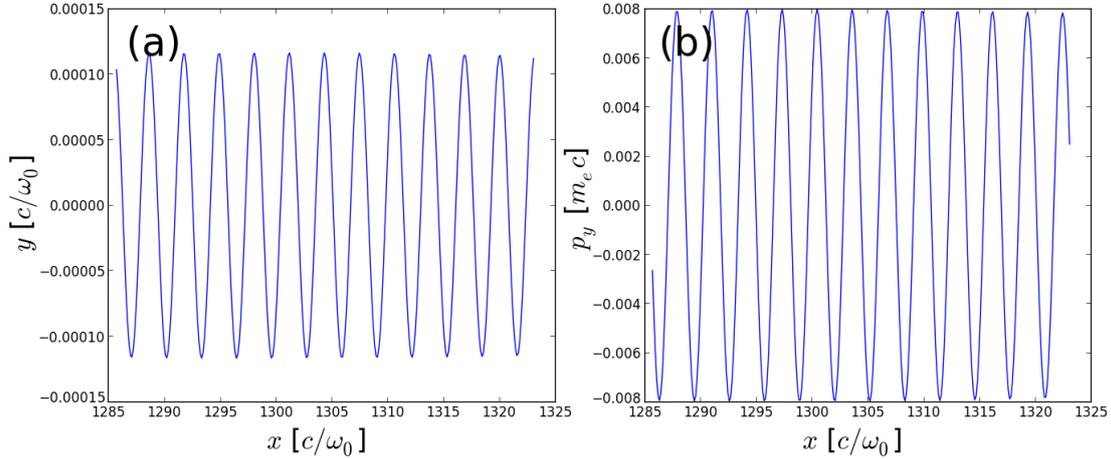


FIGURE 17 – Mouvement de l'électron lors de son interaction avec une onde plane contra-propagative au maximum de l'amplitude de cette onde. (a) Position transverse y et (b) impulsion transverse p_y en fonction de la position longitudinale x normalisée.

Le calcul théorique fournit de plus l'expression de l'énergie rayonnée sur l'axe de la n -ième harmonique par unité de fréquence et par unité d'angle [Esarey *et al.*, 1993] :

$$\left. \frac{d^2 I_n}{d\Omega d\omega} \right|_{\theta=0, \omega=\omega_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} k_0 N_0 M_0^2 F_n(a_0) G_n(\omega), \quad (121)$$

avec N_0 le nombre d'oscillations de l'électron, $M_0 = (\gamma(1+\beta)^2)/(1 + \frac{a_0^2}{2})$, $F_n(a_0) = n\alpha_n [J_{(n-1)/2}(\alpha_n) - J_{(n+1)/2}(\alpha_n)]^2$ et $G(\omega) = \frac{1}{\Delta\omega} \text{sinc}(\omega - nM_0\omega_0\bar{T})$ où J désigne la fonction de Bessel de première espèce, $\alpha_n = \frac{a_0^2}{4}(1 + a_0^2/2)$, $\Delta\omega = \omega_n/nN_0$ et $\bar{T} = L_0/2cM_0$, L_0 étant la longueur d'interaction. Dans notre cas, $a_0 \ll 1$ et $\gamma \gg 1$, et le rayonnement est seulement émis à la pulsation fondamentale, qui sur l'axe est donnée par $\omega_f \sim 4\gamma^2\omega_0$. Cette formule se simplifie, pour donner :

$$\left. \frac{d^2 I_f}{d\Omega d\omega} \right|_{\theta=0} (\omega_f) = \frac{e^2(4\gamma^2)^2 N_0^2}{2\epsilon_0\lambda_0\omega_f} \alpha_1 [J_0(\alpha_1) - J_1(\alpha_1)]^2. \quad (122)$$

On montre en figure 18, le résultat du calcul du rayonnement sur la portion de trajectoire indiquée dans la figure 17. La figure 18a montre le nombre de photons émis par unité d'angle solide et par unité de fréquence sur l'axe. L'énergie du pic d'émission correspond à celle prévue pour l'harmonique fondamentale par

l'équation (118) ($E_f = 5.5$ keV). De plus, en cette valeur, on obtient la valeur $\max(d^2 I/d\Omega d\omega) = 1.2 \times 10^{-20} J/eV/sr$, qui est à comparer avec la valeur théorique prévue issue de l'équation (122) appliquée à 12 oscillations d'un électron : $d^2 I/d\Omega d\omega(\theta = 0, \omega = \omega_f) = 1.3 \times 10^{-20} J/eV/sr$. Les valeurs sont très proches, la faible différence s'expliquant aussi par le fait qu'on a moins de 12 oscillations complètes sur la portion de trajectoire considérée dans la simulation.

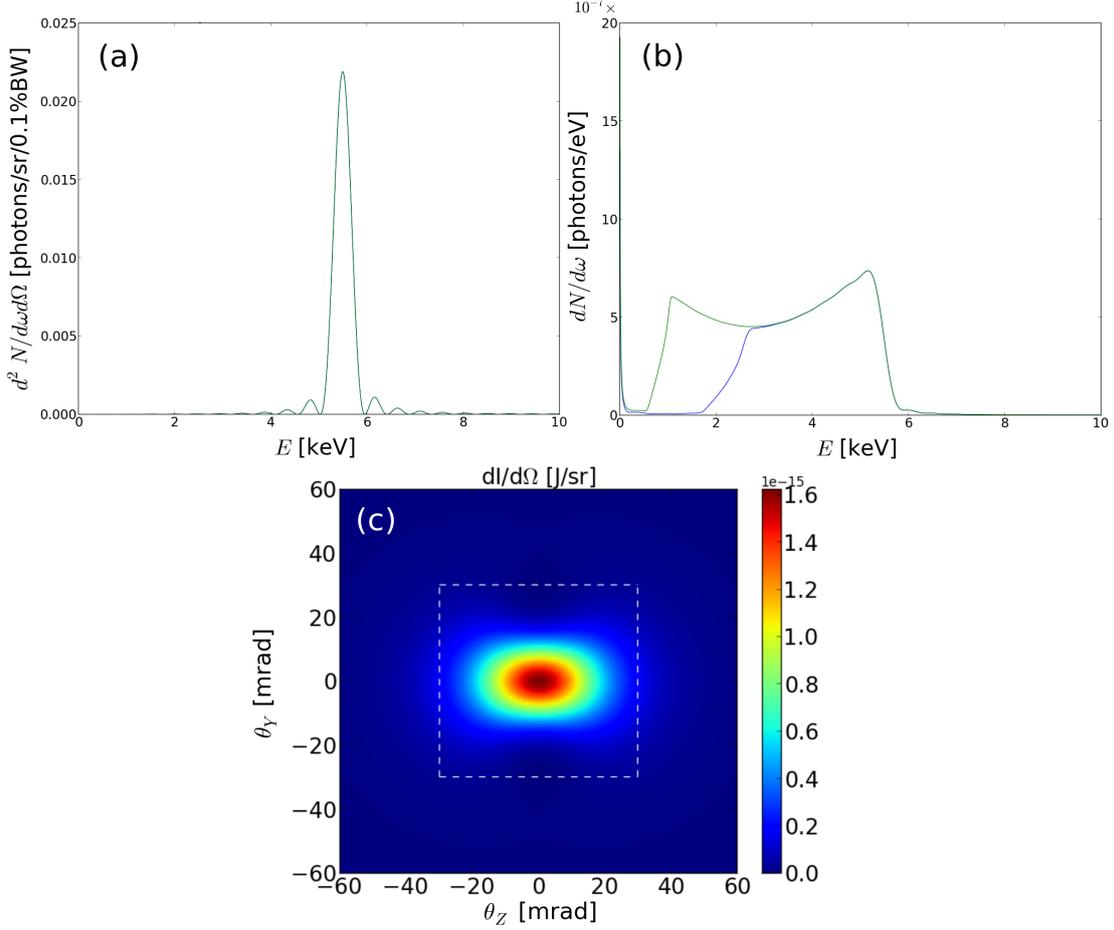


FIGURE 18 – Rayonnement Compton calculé par le code CALDER à partir de la trajectoire représentée en figure 17. (a) Nombre de photons émis par unité d'angle solide et par unité de fréquence $d^2 N/d\omega d\Omega$ sur l'axe. (b) Distributions fréquentielles photoniques $dN/d\omega$ émises en intégrant les photons contenus dans un angle de 30×30 mrad² (bleu) et 60×60 mrad² (vert). (c) Énergie rayonnée par unité d'angle solide $dI/d\Omega$; les pointillés blancs délimitent l'angle de 30×30 mrad².

En intégrant $d^2 N/d\omega d\Omega$ sur l'angle solide, on obtient le nombre de photons émis par unité de fréquence $dN/d\omega$, représentée en figure 18b. On remarque que plus l'angle d'intégration est important, plus l'émission de photons de basse énergie augmente. Les photons émis loin de l'axe de propagation sont d'énergie inférieure à ceux étant émis proches de l'axe (ω_f diminue avec θ). Malgré leur grand nombre, ils

contribuent peu à l'énergie totale rayonnée. On peut néanmoins montrer qu'en intégrant sur tout l'angle solide, l'énergie moyenne des photons émis est de $\hbar\omega_{f,\theta=0}/2$, et que par conséquent, le nombre total de photons émis par oscillation est [Corde *et al.*, 2013a] :

$$N_X = \frac{2\pi}{3}\alpha_F a_0^2, \quad (123)$$

avec $\alpha_F = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar c)$ la constante de structure fine. Le nombre total de photons émis sur l'angle de 60×60 mrad² par oscillation est $N_X = 7.4 \times 10^{-7}$ ($N_X = 5.1 \times 10^{-7}$ pour un angle de 30×30 mrad²). Pour obtenir le nombre de photons théorique total ($N_X = 9.8 \times 10^{-7}$), il faudrait intégrer sur tout l'angle solide. Ce processus est fastidieux à réaliser avec CALDER, et n'est généralement pas comparable avec les chiffres obtenus dans les expériences, où les photons sont comptés par caméra CCD sur des petits angles d'émission. C'est pourquoi, dans la suite, le nombre de photons sera calculé en coupant l'intégration sur l'angle, quitte à perdre une partie des photons émis à plus basse énergie. Cependant, comme on peut le voir sur la figure 18b, cette restriction à de petits angles ne change pas la description du spectre à hautes fréquences.

Enfin en intégrant fréquemment $d^2I/d\omega d\Omega$, on peut obtenir l'énergie angulaire rayonnée $dI/d\Omega$, qui est donnée sur la figure 18c. On peut voir que l'ouverture typique du faisceau dans la direction z orthogonale à la direction de polarisation, et donc au mouvement transverse de l'électron, est de l'ordre de $1/\gamma$ (~ 30 mrad). C'est un peu plus compliqué dans la direction de polarisation : lorsque $a_0 > 1$, alors l'angle typique d'émission est de l'ordre de K/γ . Ici $a_0 \ll 1$, et on peut montrer qu'un minimum de rayonnement est atteint en un angle $1/\gamma$, créant un angle d'émission inférieur (mais qui reste tout de même proche de $1/\gamma$), ce qui est bien vérifié dans la simulation.

Finissons par quelques considérations sur les spécificités du calcul numérique du rayonnement Compton. On a vu précédemment que compte tenu de l'échantillonnage des trajectoires, le rayonnement calculé devait être coupé pour une fréquence limite ω_l . Cette fréquence n'était pas gênante dans le cas du rayonnement bêta-tron, mais elle devient plus problématique pour le rayonnement Compton, plus énergétique. Si on veut maintenant pouvoir décrire la fréquence fondamentale du rayonnement, comme dans notre cas, on doit vérifier $\omega_f < \omega_l$, ce qui implique la condition suivante :

$$c\Delta t' < \frac{\lambda_0}{4}, \quad (124)$$

où $\Delta t'$ désigne l'échantillonnage des trajectoires électroniques. La résolution de λ_0 dans le code menant à $\Delta x \approx c\Delta t \sim \lambda_0/50$ implique que (124) est nécessairement vérifiée. La condition se durcit lorsqu'on passe à l'interaction avec un laser plus

énergétique, avec $a_0 > 1$, car on doit maintenant satisfaire $\omega_c < \omega_l$, ce qui donne :

$$c\Delta t' < \frac{\lambda_0}{3a_0}. \quad (125)$$

Lorsque a_0 devient trop important (de l'ordre de la dizaine), il devient ainsi nécessaire de diminuer le pas de temps de la simulation pour pouvoir résoudre la partie du rayonnement émis à haute énergie.

Un autre problème émerge lorsque a_0 devient trop grand. Selon les formules classiques précédentes, des photons peuvent être émis à des énergies qui sont de l'ordre de celle de l'électron émetteur, voire qui la dépassent (ceci est amplifié pour γ_0 et a_0 grand). L'implémentation classique du rayonnement telle qu'elle a été présentée jusqu'à maintenant ne respecte en fait pas la conservation de l'énergie (l'énergie rayonnée n'est pas retranchée à l'énergie cinétique de l'électron), et n'est plus adaptée pour étudier ce phénomène. Il est nécessaire de passer vers une nouvelle description du phénomène : c'est l'approche électrodynamique quantique (QED) du rayonnement.

III.2.5 Rayonnement classique et rayonnement quantique

Dans l'approche QED du rayonnement, l'émission se fait sous forme d'émissions particulières de photons : au cours de sa trajectoire, un électron va émettre un ou plusieurs photons d'énergies différentes, au lieu d'une distribution continue. Il est aussi nécessaire de prendre en compte la perte énergétique subie par l'électron qui vient d'émettre un photon. Ces processus ont été implémentés en détail dans CALDER [Lobet, 2015].

Deux méthodes de calcul sont disponibles dans CALDER pour prendre en compte ces effets. Une première méthode implique seulement la perte d'énergie continue des électrons due à un terme d'auto-force : l'électron est soumis au champ électromagnétique qu'il génère ; lorsque les particules deviennent très relativistes, ce champ est suffisamment fort pour perturber l'électron en retour, et cette interaction ne peut plus être négligée. Cette situation correspond à l'émission d'un très grand nombre de photons ayant chacun une faible énergie devant celle de l'électron, mais le cumul des énergies de ces photons représente tout de même une fraction significative de celle de l'électron, conduisant à la perte d'énergie continue de ce dernier. Une deuxième méthode implique l'émission discrète de photons numériques, modélisés par des macro-particules de photons dans CALDER. Cette émission discrète conduit à une perte d'énergie instantanée lors de l'émission du photon.

Dans le cadre de cette thèse, seule la première méthode a été implémentée dans CALDER-Circ pour calculer l'auto-force (à l'instar de ce qui avait été fait dans CALDER), ainsi que le calcul du rayonnement alors émis. Pour implémenter l'auto-force, on utilise le modèle de Sokolov [Sokolov *et al.*, 2009], dans lequel

les équations du mouvement des particules sont modifiées pour donner, avec les notations utilisant les quadri-vecteurs :

$$\frac{dp^\mu}{d\tau} = \frac{e}{c} F^{\mu\nu} \frac{dx_\nu}{d\tau} - 4\pi\varepsilon_0 \frac{Ip^\mu}{mc^2}, \quad (126)$$

$$\frac{dx^\mu}{d\tau} = \frac{p^\mu}{m_e} + \tau_0 \frac{I}{I_E} \frac{eF^{\mu\nu} p_\nu}{m_e^2 c}, \quad (127)$$

où p^μ et x^μ sont les quadri-vecteurs impulsion et position, τ est le temps propre, $\tau_0 = 2e^2/(3m_e c^3)$, $F^{ik} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ est le tenseur électromagnétique, et $I = g(\eta)I_E$ avec $I_E = \tau_0 e^2 |F_{\mu\nu} p^\nu|^2 / (4\pi\varepsilon_0 m_e^3)$ l'intensité d'émission classique. Le calcul de la fonction g est effectué selon la formule d'électrodynamique quantique :

$$g(\eta) = \frac{3\sqrt{3}}{2\pi\eta^2} \int_0^\infty G(\eta, \chi) d\chi, \quad (128)$$

où la valeur de G , qui représente l'émissivité quantique [Erber, 1966, Kirk *et al.*, 2009], est tabulée en entrée de code (cf Annexe B), et où η et χ sont des invariants de Lorentz associés respectivement à l'électron et au photon et sont donnés par :

$$\eta = \frac{e\hbar}{m_e^3 c^4} |F_{\mu\nu} p^\nu| \quad \text{et} \quad \chi = \frac{e\hbar^2}{m_e^3 c^4} |F_{\mu\nu} k^\nu|, \quad (129)$$

avec $\hbar k^\nu$ désignant le quadri-vecteur impulsion du photon.

Les termes les plus à droite dans les équations (126) et (127) sont ceux qui sont ajoutés par rapport aux équations du mouvement standard, et qui permettent la prise en compte de l'auto-force. Une fois la correction des équations du mouvement implémentée, il est relativement aisé de calculer l'émission du rayonnement. En effet, la puissance rayonnée par un électron P est déduite à partir de la fonction g introduite pour calculer l'auto-force :

$$P(\eta) = \frac{2}{3} \alpha_F \eta^2 m_e c^2 \frac{m_e c^2}{\hbar} g(\eta) \quad (130)$$

On considère que cette puissance est émise dans la direction de propagation de l'électron (en négligeant le cône d'ouverture de $1/\gamma$), et qu'elle est émise avec un spectre dont la distribution est décrite par la fonction G . Dans cette approche quantique, les phénomènes d'interférence sont négligés, ce qui fait disparaître les structures relatives aux harmoniques dans le spectre. On conserve cependant une bonne description du spectre, car l'amplitude de ces harmoniques est bien décrite par la fonction G . À ce titre, lorsque le régime classique s'applique encore, G tend vers la distribution classique donnée par l'équation (82). Dans la figure 19a, on montre la différence entre les spectres classiques et quantiques obtenus dans le cas d'un électron en mouvement synchrotron, avec $p_0 = 500 m_e c$ et $B_z = 500 m_e \omega_{f,theo}/e$. Selon le modèle quantique, l'énergie est rayonnée à des fréquences

inférieures à celles prévues dans l'approche classique. Ceci est particulièrement vrai à hautes énergies de photons : le modèle quantique empêche l'émission de photons d'énergies supérieures à celle de l'électron.

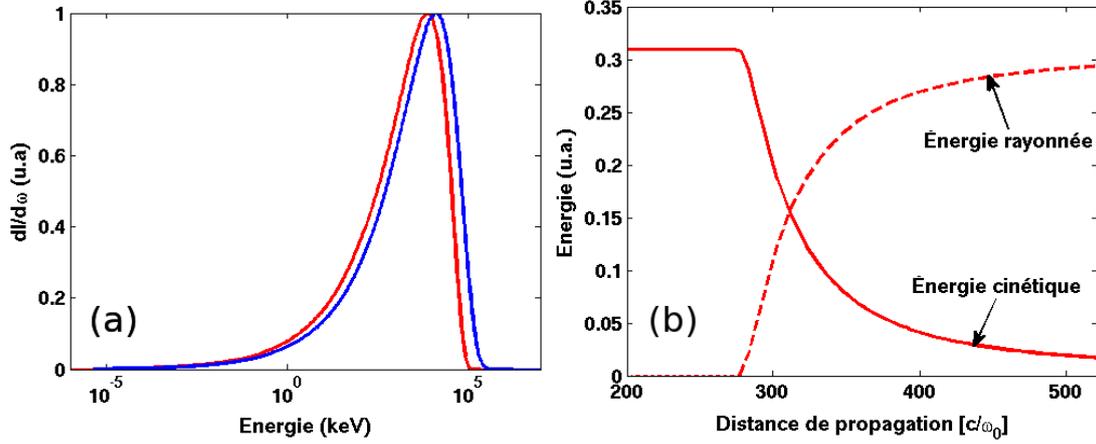


FIGURE 19 – (a) Comparaison de la distribution fréquentielle $dI/d\omega$ de l'énergie rayonnée dans le cas d'un électron énergétique ($p_0 = 500 m_e c$) en mouvement dans un champ magnétique constant ($B_z = 500 m_e \omega_{f,theo}/e$). En rouge, l'émission calculée par le modèle quantique, et en bleu, l'enveloppe classique prévue par la formule (82). (b) Conséquence de la prise en compte de l'auto-force dans CALDER-Circ : Évolution de l'énergie rayonnée (pointillés rouges) et de l'énergie cinétique des électrons (traits rouges pleins) dans un cas de rayonnement Compton, avec $p_{x,t=0} = 4000 m_e c$ et une onde plane de $a_0 = 72.9$.

On montre également en figure 19b la conséquence de la prise en compte de l'auto-force dans le régime quantique. Dans cet exemple, on considère la simulation avec CALDER-Circ de l'interaction d'électrons ayant tous une énergie initiale $p_{x,t=0} = 4000 m_e c$ avec une onde plane contra-propagative de maximum de potentiel vecteur normalisé $a_0 = 72.9$. Le faisceau d'électrons, cylindrique de dimension longitudinale $2 c/\omega_0$ avec un rayon de $3 c/\omega_0$, croise l'onde plane à partir de $280 \omega_0^{-1}$. L'amplitude du laser est alors constante. On constate que l'énergie cinétique des particules décroît rapidement dès que le faisceau de particules interagit avec le laser. Cette perte d'énergie des électrons compense l'énergie produite dans le rayonnement, de telle sorte que la conservation de l'énergie est maintenant bien observée.

Ces modèles QED sont très en vogue actuellement, puisqu'ils permettent l'étude de l'interaction laser-plasma à ultra-hautes intensités, et donc de phénomènes comme la création de paires électrons-positrons. Cependant, leur utilisation n'est pas pertinente dans les cas présentés dans la suite de cette thèse : l'énergie rayonnée reste bien inférieure à l'énergie électronique (facteur $\sim 10^{-3} - 10^{-4}$), donc le modèle classique reste valide. De plus, les approximations réalisées dans le modèle

quantique (unidirectionnalité de l'émission, simplification du spectre, etc.) sont trop grossières pour nos cas : la divergence de la source bétatron n'est par exemple pas bien décrite par ce modèle. Pour toutes ces raisons, on préfère utiliser le modèle classique dans cette thèse. Cependant, il faut garder à l'esprit les limites qu'il peut présenter à haute énergie.