



HAL
open science

Simulation N-Corps d'un plasma

Arnaud Beck

► **To cite this version:**

Arnaud Beck. Simulation N-Corps d'un plasma. Astrophysique [astro-ph]. Observatoire de Paris, 2008. Français. NNT: . tel-00359057

HAL Id: tel-00359057

<https://theses.hal.science/tel-00359057>

Submitted on 5 Feb 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

OBSERVATOIRE DE PARIS

**ECOLE DOCTORALE
ASTRONOMIE ET ASTROPHYSIQUE D' ILE-DE-FRANCE**

**Doctorat
ASTRONOMIE ET ASTROPHYSIQUE**

Physique des Plasmas

Arnaud BECK

Simulation N-Corps d'un plasma

Thèse dirigée par Filippo Pantellini

Soutenue le 4 Novembre 2008

Jury :

Christophe
Patrick
Francesco
Fabrice
David
Filippo

Sauty
Mora
Califano
Mottez
Burgess
Pantellini

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Directeur de thèse

Résumé

La simulation N-Corps d'un plasma consiste à calculer l'interaction coulombienne mutuelle entre N particules chargées. Nous avons adapté un algorithme N-Corps de type "code en arbre", utilisé avec succès dans le cas gravitationnel, pour la simulation de plasmas. Pour l'instant, nous avons trouvé deux champs d'applications pour lesquels cette technique est particulièrement bien adaptée.

Tout d'abord les problèmes d'expansion de plasma dans le vide. Ce genre de simulation fait coexister des densités d'ordres de grandeur très différents. Certaines zones peuvent avoir un comportement hydrodynamique pendant que d'autres sont peuplées de particules avec des trajectoires balistiques car trop énergétiques. Les protons, notamment, peuvent ainsi être accélérés à des vitesses requises pour la fusion. Ce type de problème, faisant intervenir une interface plasma-vide, est pratiquement impossible à étudier à l'aide des techniques de simulation courantes (e.g. codes MHD, Vlasov, Fokker-Planck, ...).

L'autre champ d'application est celui de la simulation des plasmas modérément ou fortement couplés qui concerne de nombreux plasmas de laboratoire, mais également des plasmas astrophysiques, tels, par exemple, la zone convective du Soleil. Dans les plasmas dits couplés, les collisions "binaires proches" entre charges ne peuvent pas être négligées. Or, les modèles numériques de type Fokker-Planck, très majoritairement utilisés pour simuler des plasmas faiblement collisionnels, n'en tiennent pas compte ce qui les rends inadéquats à ce type de plasma. La technique N-Corps, quant à elle, gère chaque particule individuellement et peut très bien décrire précisément les trajectoires de particules subissant ce genre de déviation violente.

Abstract

The N-Body plasma simulation consists in calculating the Coulomb interaction between N charged particles. We adapted an N-Body "tree code" algorithm, successfully used in the gravitational case, for the simulation of plasma. So far, we have found two main applications which suits this technique particularly well.

First, the expansion of a plasma into vacuum. In this kind of simulations, densities of very different order of magnitude have to interact. Some areas can have an hydrodynamic behavior whereas some others are filled by energetic particles following ballistic trajectories. Problems which take into account plasma-vacuum interface are almost impossible to study with common simulation techniques (Vlasov, Fokker-Planck).

The other application consists in simulating moderately or strongly coupled plasma. It deals with many laboratory plasmas as well as astrophysical plasmas such as the convective zone of the sun. In coupled plasmas, close collisions between charges can not be neglected as it is done in most of the other simulation techniques. The N-Body

technique allows the accurate description of the trajectory of each single particle and thus to take into account the strong deviations due to the close collisions.

Cette thèse a été préparée au Laboratoire d'Études Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique (LESIA), Observatoire de Paris, 5 Places Jules Janssen, 92190 Meudon FRANCE.

Mots Clefs

Plasma, Simulation numérique, *N*-Corps, Collisions, Lissage des forces, Leap-Frog, Code en arbre, Flux de chaleur, Paramètre de couplage, Trajectoire, Expansion dans le vide, Champ électrique, Charge, Fonction de distribution.

Keywords

Plasma, Numerical simulation, *N*-Body, Collisions, Forces softening, Leap-Frog, Tree code, Heat flux, Coupling parameter, Trajectory, Expansion into vacuum, Electric field, Charge, Distribution function.

Remerciements

Un étudiant dans son laboratoire est comme un électron dans sa sphère de Debye, il subit en permanence des influences de toutes parts et sa trajectoire est finalement la somme de tous ces petits conseils qui finissent par avoir une importance capitale. J'aimerais donc remercier dans ce paragraphe toutes les personnes qui ont contribué, non seulement à ce travail, mais plus généralement, à me former en tant que chercheur. Mon directeur de recherche, Filippo Pantellini, a une place de choix parmi elles. Ses compétences de physicien et son calme ont eu raison de toutes mes questions et angoisses de jeune doctorant. Je lui dois la plus grande partie de ce que j'ai pu apprendre sur la physique des plasmas et leur simulation pendant ma thèse. J'aimerais aussi remercier Nicole Meyer-Vernet qui m'a fait comprendre que les choses les plus simples sont souvent les plus importantes. Ses idées, ses conseils et son enthousiasme pour mon travail ont été une grande source de motivation. Je suis très reconnaissant envers Patrick Mora et Francesco Califano, mes rapporteurs, qui ont tout deux contribué à améliorer le présent manuscrit ainsi que ma compréhension des limites de certains modèles. Leurs points de vue extérieurs ont été très enrichissants. J'adresse également tous mes remerciements à Carine Briand, qui ferait un excellent agent si elle se lançait dans le show business, Philippe Zarka (parrain de la terrible Meudon Mafia), Milan Maksimovic (dont on taira le surnom) et Karine Issautier (illustre coordinatrice du pôle plasma).

Au delà des considérations scientifiques, une thèse est également un bout de vie, et elle serait bien terne sans tout ceux qui ont contribué à en faire une expérience agréable. Je pense, bien sûr, à la solide structure des FPL qui a été, et reste encore, la pierre de voûte sur laquelle repose le moral de nombreux doctorants, post-doc et autres précaires. J'adresse donc de chaleureux remerciements à toute cette joyeuse bande (QN, Magda, Cilia, Nesibe, Sonia, Sébastien, Gaétan, Laurent, Lorenzo, Stepan, Xavier, Baptiste, Jim, Pierre) et "surtout particulièrement" au ministre des minorités qui a fait bien plus que de simplement me supporter pendant trois ans. Le tout sans oublier M. Bois, toujours là quand on a besoin de lui, Ioannis, l.p.g.s.d.l.t. et Olga, dont le rire ne résonne malheureusement plus dans le laboratoire depuis quelques temps (tu nous manques).

Je pense aussi à tout ceux qui m'ont supporté, d'une manière ou d'une autre, dans la vie de tous les jours et qui m'ont, mine de rien, grandement facilité la tâche. Mes supers colocos (Erco et Juan de la FDM et le fameux Sker du Breuil), surtout, restez comme

vous êtes. Je réserve aussi un merci d'une chaleur toute spécifique pour Céline. Elle doit certainement connaître ma thèse mieux que moi au vu du nombre impressionnant de relectures qu'elle a effectué.

Enfin, si effectivement le LESIA a été ma sphère de Debye et m'a influencé quotidiennement, le champ magnétique qui a défini ma trajectoire à grande échelle n'est autre que ma mère, à qui je dois l'accomplissement de ce doctorat et même beaucoup plus. Je profite donc de ces dernières lignes pour lui dédier ce manuscrit.

Table des matières

1	Préambule	11
1.1	Histoire du problème à N-Corps	11
1.2	Où arrivent les plasmas	12
2	Élement de physique des plasmas	15
2.1	Fonction de distribution	15
2.2	Plasma à l'équilibre et vitesse thermique	16
2.3	Champ électrique d'une charge ponctuelle	17
2.4	Longueur de Debye	18
2.5	Trajectoires et collisions	20
3	Description du code	25
3.1	Généralités	25
3.2	Calcul des forces	26
3.2.1	L'algorithme <i>falcON</i> dans le cas gravitationnel	27
3.2.2	Adaptation de <i>falcON</i> à la simulation de plasmas	32
3.2.3	Longueur de lissage	33
3.3	Avancement des particules	36
3.3.1	le schéma Leap Frog	36
3.3.2	Choix du pas de temps	37
3.3.3	Conditions aux limites	40
4	Validation du code	45
4.1	Equation de Poisson en symétrie sphérique	45
4.2	Conservation de l'énergie	47
4.3	Relaxation de faisceau	49
4.4	Nuage de Debye	50
4.5	Oscillation à la fréquence plasma	53
4.6	Plasma dans un champ de pesanteur homogène	55

5	Simulations N-Corps	59
5.1	Trajectoire d'un électron dans un plasma	59
5.2	Flux de chaleur dans un plasma couplé	62
5.2.1	Présentation du problème	62
5.2.2	Les paramètres physiques	63
5.2.3	Paramètres de la simulation	64
5.2.4	Résultats	64
5.3	Expansion d'un plasma dans le vide	65
5.3.1	Présentation du problème	66
5.3.2	Le modèle auto-similaire à deux fluides	67
5.3.3	Simulations numériques	69
6	Conclusions et perspectives	75
A	Interaction entre deux cellules	77
B	Modifying the <i>falcON</i> code for plasma simulations	79
B.1	Introduction	79
B.2	Modifying the definition of the expansion center	80
B.3	The new version of the field tensors	81
C	Corrections relativistes	83
C.1	Interaction particules-champs	83
C.2	Rayonnement	84
C.3	Principe fondamental de la dynamique	84
C.4	Conclusion	85
D	Articles	87
D.1	The trajectory of an electron in a plasma	88
D.2	Heat flux in a moderately coupled plasma	92
D.3	Expansion of a plasma into vacuum	98

Chapitre 1

Préambule

1.1 Histoire du problème à N-Corps

En 1687, Isaac Newton écrit dans les célèbres *Philosophiae Naturalis Principia Mathematica* que deux corps s'attirent avec une force proportionnelle au produit de leurs masses et inversement proportionnelle au carré de leurs distances. Par la suite il démontre que si deux corps interagissent effectivement de cette manière, ils suivent alors une trajectoire elliptique parfaitement définie qui dépend uniquement des masses des deux corps ainsi que de leurs positions et vitesses initiales. Cette révélation fondamentale rencontre un succès d'autant plus éclatant que, grâce à ses calculs, Newton retrouve les lois qui décrivent le mouvement des planètes, proposées une soixantaine d'années auparavant par Kepler. Pour y parvenir il a simplement considéré l'interaction entre le Soleil très massif et une planète de faible masse et en a déduit les trajectoires elliptiques décrites par Kepler. La mécanique céleste semble enfin comprise, mais des inconnues persistent. Newton échoue notamment à expliquer avec précision le mouvement de la Lune en considérant uniquement son interaction avec la Terre. Cela met en évidence le fait que le système solaire ne peut pas être réduit à une somme de couple soleil-planète. Les planètes exercent des influences les unes sur les autres et la complexité du mouvement de la lune montre qu'un corps qui subi l'influence de plusieurs autres est difficile à appréhender. Du problème à deux corps, résolu par Newton, on doit donc passer à un problème à plusieurs corps pour comprendre avec une plus grande précision la trajectoire des astres, et notamment des satellites qui sont plus sensibles à ce problème que les planètes. Malheureusement, l'introduction du moindre corps supplémentaire dans le système à deux corps complique infiniment le problème à résoudre et nécessite la mise au point d'outils mathématiques modernes adaptés.

C'est en 1788 seulement que Joseph-Louis Lagrange apporte le premier élément de réponse. En appliquant sa *méthode des variations* à la théorie Newtonienne, il se ramène au problème à deux corps connu en traitant les corps supplémentaires comme de petites

perturbations du système. Celles-ci pouvant être quantifiées, il arrive à déterminer une correction à apporter au problème à 2 corps pour les prendre en compte. Depuis, cette technique a été fortement améliorée mais c'est toujours celle qui est utilisée pour le calcul des éphémérides du système solaire. Nous disposons donc actuellement d'une méthode de calcul qui permet de déterminer avec une très bonne précision les orbites d'un système constitué d'un nombre N de corps même si nous n'avons pas de solution analytique au problème. Mais cette méthode n'est applicable qu'à des systèmes du type "système solaire" où N n'est pas trop grand et où l'un des corps est beaucoup plus massif que les autres. Or, depuis Lagrange, des observations du ciel plus lointaines ont intéressé les astronomes à d'autres problèmes à N Corps. Par exemple l'évolution dynamique d'un amas globulaire d'étoiles dans sa galaxie ou la formation de structures cosmologiques dans l'univers. Dans ces systèmes, le nombre N de corps peut aller de la centaine de milliers pour les amas jusqu'à plus de 10^{10} pour représenter une fraction caractéristique de l'univers et les masses y sont toutes du même ordre de grandeur. De nouveaux outils numériques ont donc été mis au point pour essayer de calculer l'évolution de tels systèmes.

La méthode dite de *sommation directe* a été la première à être utilisée. Elle consiste simplement à calculer et à sommer directement les forces ressenties par chaque corps. Cette façon de faire est la plus simple et la plus précise mais c'est aussi la plus coûteuse car sa complexité, et donc le temps de calcul, croît comme N^2 . Par conséquent, le nombre de corps (on dit aussi "particules") que l'on peut mettre dans la simulation est très limité. L'un des premiers algorithmes approximant le résultat de la sommation directe pour un temps de calcul bien moindre est l'oeuvre de Barnes et Hut en 1986 [1]. Il fait partie de la classe d'algorithme appelée *code en arbre* et réduit la croissance du temps de calcul à $N \ln N$. Plus récemment, en 2002, Dehnen a mis au point un nouvel algorithme, dénommé *falcON* [6], s'inspirant du travail de Barnes et Hut qui a une complexité qui croît comme N .

Grâce à ces nouveaux outils, la dynamique gravitationnelle peut s'intéresser à des systèmes de plus en plus grands et d'une manière de plus en plus précise. Le nombre de particules est devenu tel, qu'une utilisation élargie de ces outils peut commencer à être envisagée. En effet, ces algorithmes sont théoriquement adaptables à n'importe quel type d'interaction à longue distance.

1.2 Où arrivent les plasmas

Le plasma est souvent présenté comme le quatrième état de la matière. Il s'agit en fait d'un gaz partiellement ou totalement ionisé. C'est à dire une collection de particules chargées qui interagissent entre elles via les forces de Coulomb et de Lorentz. Il se trouve que la première est une interaction à longue distance très similaire à l'interaction gravitationnelle et que l'on peut simuler par une technique N-Corps [19]. Ma thèse a

consisté à exploiter l’analogie entre la dynamique gravitationnelle et la dynamique des particules chargées dans le cas électrostatique (ou dynamique coulombienne) pour créer un outil de simulation N-Corps pour les plasmas qui s’inspire fortement de l’algorithme *falcON*.

Pour en comprendre l’intérêt, il faut savoir que plus de 99% de la matière observable dans l’univers se trouve sous la forme de plasma. Par rapport aux solides, liquides et gaz, les plasmas sont donc omniprésents. Mais ce qui les différencie réellement, c’est que les plasmas s’étendent sur des domaines de température et de densité beaucoup plus importants que les trois autres états de la matière. Les exemples de la figure 1.1 montrent la large zone de couverture des plasmas dans le plan température-densité. Étant donné cette très forte variation dans les échelles des grandeurs caractéristiques qui les décrivent, il n’est pas étonnant de constater que les plasmas peuvent avoir des comportements très diversifiés. La mécanique des fluides et l’électromagnétisme sont généralement adaptés à leur description mais, du fait de cette grande diversité, ils doivent toujours être accompagnés d’hypothèses simplificatrices pour se restreindre à une partie seulement du grand domaine des plasmas. C’est ainsi que l’on trouve toute une multitude de modèles, chacun adapté à une zone du grand domaine des plasmas qui dépend directement des hypothèses faites. On pourra citer, entre autres, la magnétohydrodynamique (MHD), valable pour les plasmas proches de l’équilibre thermodynamique à grande échelle, les modèles de type Vlasov ou “particle in cell” (PIC) pour les plasmas, au contraire, potentiellement hors équilibre, et enfin, les modèles du type “Fokker-Planck” qui décrivent très bien les plasmas où les collisions dites “lointaines” entre particules dominent.

Dans tous ces modèles, les équations décrivent l’évolution de quantités macroscopiques telles que la densité locale, le champ électrique moyen ou la fonction de distribution des particules ¹. La technique N-Corps est, finalement, plus simple et plus intuitive physiquement car on considère directement les forces électrostatiques qui s’exercent sur les particules. Cela nécessite de négliger la force de Lorentz mais cette hypothèse est peu contraignante lorsque l’on s’intéresse à la physique des petites échelles. Aucune hypothèse sous-jacente supplémentaire n’est nécessaire et c’est là tout l’intérêt de cette approche. Ce type de code, entièrement nouveau pour ce genre d’interaction, peut s’appliquer à tout type de plasma électrostatique et est capable de simuler des problèmes très variés et difficilement accessibles par d’autres méthodes numériques. Nous l’appliquerons notamment à des plasmas dit “couplés” ainsi qu’à des plasmas qui ont une interface avec le vide. Un autre intérêt de cette technique est que, contrairement aux simulations plus traditionnelles dans lesquelles on ne connaît que des grandeurs macroscopiques, nous avons accès à l’état de la moindre particule. Comme nous le verrons, cela permet, entre autre, de connaître les trajectoires suivies par chaque particule pendant la simulation.

¹Seuls les codes “PIC” permettent de suivre des quantités propres à une particule. Il s’agit de macro-particule et ces quantités sont équivalentes à celle d’une particule typique du plasma.

Nous ferons, tout d'abord, un rappel de physique des plasmas afin de définir les grandeurs caractéristiques qui les décrivent. Ensuite nous décrirons le code en lui-même et nous montrerons des simulations de cas simples dont on connaît les solutions analytiques. Cela permettra de valider notre démarche et de l'appliquer à des problèmes encore non résolus ce qui sera le sujet du dernier chapitre de cette thèse.

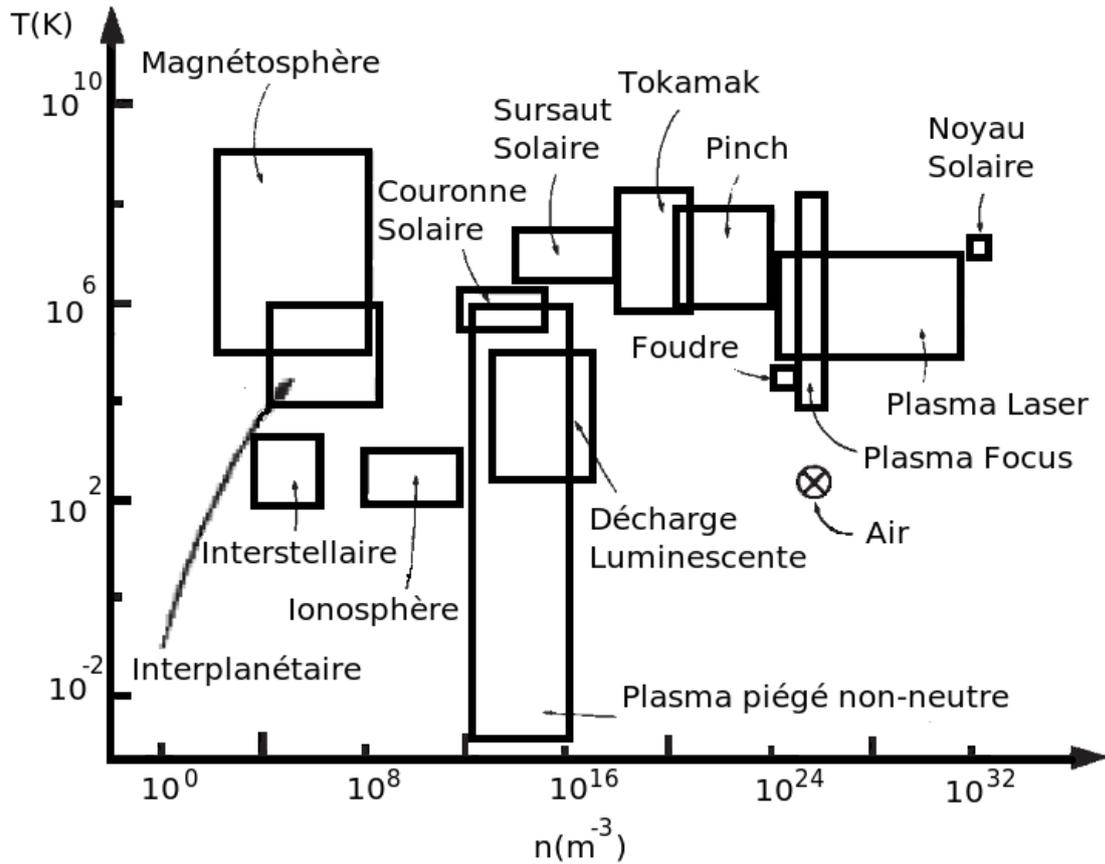


FIG. 1.1: Diversité des plasmas dans l'univers. L'abscisse donne la densité numérique en nombre de particule par m^3 et l'ordonnée donne la température en K.

Chapitre 2

Élément de physique des plasmas

Avant de se lancer dans la simulation numérique d'un plasma, il convient d'avoir les idées claires sur les phénomènes qui dirigent son évolution. Dans ce chapitre nous allons détailler les interactions entre particules et en déduire des grandeurs caractéristiques du plasma critiques pour le choix des paramètres numériques de notre simulation.

2.1 Fonction de distribution

Le système que nous désirons simuler est composé de N particules. Chacune de ces particules est entièrement définie par sa charge, sa masse, ses 3 coordonnées de position et ses 3 coordonnées de vitesse. Pour simplifier le problème, nous nous limitons à des plasmas qui ne contiennent que deux types de particules : des protons (indiqués p) de charge e et de masse m_p et des électrons (indiqués e) de charge $-e$ et de masse m_e . Désormais, chaque espèce n'est plus décrite que par les positions et les vitesses de chacune de ses particules. Pour ces deux espèces on peut alors définir des fonctions de distribution f_e et f_p qui donnent le nombre de particules de l'espèce correspondante, qui ont une position qui est dans l'intervalle dx autour de x , dy autour de y , dz autour de z et une vitesse dans l'intervalle dv_x autour de v_x , dv_y autour de v_y , dv_z autour de v_z . Les fonctions de distribution sont donc définies sur un espace à six dimensions. Ce sont des outils pratiques pour décrire le système car elles contiennent toutes les informations importantes sans pour autant s'encombrer du détail de l'état propre de chaque particule.¹ Par exemple, le moment d'ordre 0 de f donne la densité numérique n (ou nombre de particules par unité de volume) locale de l'espèce considérée :

$$n(x, y, z) = \iiint_{-\infty}^{\infty} f(x, y, z, v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z \quad (2.1)$$

¹Il existe d'ailleurs tout un panel de méthode de simulation de plasma qui simule l'évolution des fonctions de distribution des espèces en présence (notamment les codes Vlasov et Fokker-Planck).

2.2 Plasma à l'équilibre et vitesse thermique

On dit qu'une espèce est en équilibre thermique à la température T si la fonction de distribution correspondante ne dépend plus de la vitesse mais de l'énergie cinétique des particules $W = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2$ et s'écrit

$$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{W}{k_B T}\right) \quad (2.2)$$

où la température T est définie comme la grandeur vérifiant $\langle W \rangle = \frac{3}{2}k_B T$, l'opérateur $\langle \rangle$ symbolisant la moyenne sur l'ensemble des particules de l'espèce et k_B étant la constante de Boltzman. La distribution est alors dite maxwellienne. L'équilibre thermique est un état privilégié du système vers lequel celui-ci a naturellement tendance à relaxer si il n'est soumis à aucune contrainte extérieure. On dit que le plasma est thermalisé si toutes les espèces présentent une distribution maxwellienne à la même température.

Si les particules du plasma possèdent une énergie potentielle $W_{\text{pot}}(x, y, z)$ quelconque, la fonction de distribution caractéristique de l'équilibre est modifiée et devient :

$$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{W + W_{\text{pot}}}{k_B T}\right) \quad (2.3)$$

C'est une simple généralisation du cas précédent que l'on retrouve si $W_{\text{pot}} = 0$.

À l'équilibre, la vitesse moyenne des particules est donnée par le moment d'ordre 1 de f . Elle est nulle si le plasma n'a pas de mouvement d'ensemble :

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{v}) \mathbf{v} dv_x dv_y dv_z = 0$$

Dans cet état le plasma est donc isotrope et n'a pas de direction privilégiée. En revanche les particules ont une vitesse typique. En effet, la fonction de distribution maxwellienne des normes des vitesses admet un maximum en

$$v_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \quad (2.4)$$

La vitesse thermique v_{th} est la plus probable et c'est donc la vitesse caractéristique de déplacement d'une particule de masse m dans un plasma à l'équilibre thermique de température T .

Avec cette notation la fonction de distribution de la norme de la vitesse peut alors s'écrire

$$f_n(|\mathbf{v}|) = 4\pi |\mathbf{v}|^2 f(\mathbf{v}) \propto v_{\text{th}}^{-3} |\mathbf{v}|^2 e^{-\left(\frac{v}{v_{\text{th}}}\right)^2} \quad (2.5)$$

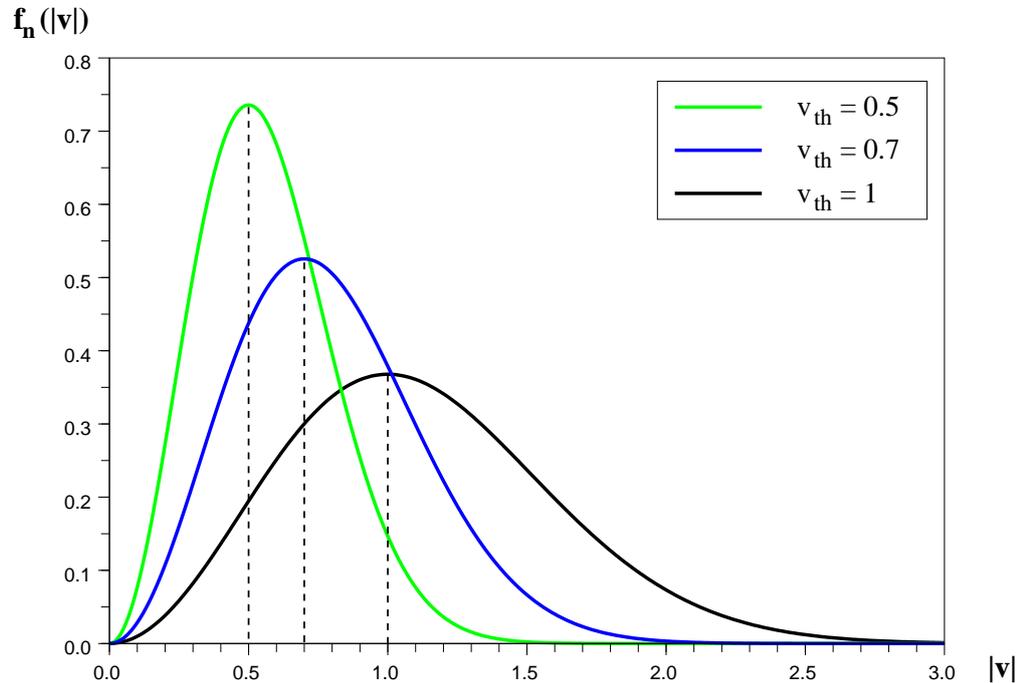


FIG. 2.1: Forme de la fonction de distribution maxwellienne de la norme de la vitesse des particules pour plusieurs valeurs de la vitesse thermique v_{th} . Les droites en pointillé montre que la vitesse la plus probable de chaque cas correspond bien à la vitesse thermique associée.

car $f(\mathbf{v})$ est isotrope et qu'il faut intégrer dans l'espace des vitesses sur toute la sphère de rayon $\|\mathbf{v}\|$. La figure 2.1 montre la forme de cette fonction pour plusieurs valeurs de v_{th} .

2.3 Champ électrique d'une charge ponctuelle

Toute particule chargée crée un potentiel électrique ϕ en tout point P de l'espace. ϕ est un champ de scalaire qui ne dépend que de la charge et de la position de la particule si elle se déplace à une vitesse petite devant celle de la lumière. On dit dans ce cas que la particule est "non relativiste". Dans le cas relativiste, cela n'est plus vrai et ϕ dépend aussi de la vitesse et de l'accélération de la particule. Ceci est traité dans l'annexe C, où il est montré que la correction relativiste du potentiel est d'ordre $(v/c)^2$. Nous ferons donc l'hypothèse "non relativiste" dans tout le reste de notre étude. Le potentiel ϕ créé

au point P par une charge q placée au point O s'écrit alors

$$\phi(P) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0\|\mathbf{OP}\|} \quad (2.6)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide. Le champ électrique \mathbf{E} créé par la même particule est le champ qui dérive de ce potentiel électrique et s'écrit donc

$$\mathbf{E}(P) = -\nabla\phi = \frac{q\mathbf{OP}}{4\pi\epsilon_0\|\mathbf{OP}\|^3} \quad (2.7)$$

\mathbf{E} est toujours orienté selon la direction radiale mais son sens dépend du signe de la charge. Son amplitude est proportionnelle à la charge de la particule et inversement proportionnelle au carré de la distance. C'est par l'intermédiaire de leurs champs électriques que les particules peuvent agir les unes sur les autres. Toute particule de charge q placée dans un champ électrique \mathbf{E} subit une force dite "force coulombienne" qui vaut

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} \quad (2.8)$$

Elle possède également une énergie potentielle d'interaction électrostatique W_{pot} qui est définie à une constante près et qui vaut

$$W_{\text{pot}} = q\phi \quad (2.9)$$

La variation d'énergie potentielle entre deux positions de la particule est indépendante de la constante choisie et représente le travail que la force coulombienne doit fournir pour la déplacer entre ces deux points.

2.4 Longueur de Debye

Dans la section précédente nous avons décrit le champ électrique créé par une charge ponctuelle seule. Si l'on place cette même particule dans un plasma, les particules qui l'entourent vont réagir à la présence de son champ électrique et vont le modifier car elles sont elles même chargées. Essayons donc maintenant de comprendre à quoi ressemble le champ électrique créé par une charge ponctuelle q placée dans un plasma.

Pour fixer les idées, prenons un plasma uniforme et homogène de densité $n_e = n_i = n_0$ et de température T dans lequel on place un proton de charge $q = e$. D'après l'équation (2.6), la présence de la charge q engendre un potentiel électrostatique $\phi(r)$ où r est la distance mesurée à partir de la charge. Les électrons étant beaucoup plus légers que les protons, ils sont plus mobiles et trouvent rapidement un équilibre dans le champ de la charge q . Nous faisons l'hypothèse que, pendant la durée de notre expérience, les protons beaucoup plus lourds mettent un temps beaucoup plus long pour réagir à la présence de la nouvelle charge q et nous les considérons donc comme immobiles. Écrivons

maintenant la fonction de distribution des vitesses des électrons f_e , en tenant compte du potentiel de la charge q . A l'équilibre, d'après les équations (2.3) et (2.9), celle-ci s'écrit

$$f(x, y, z, v_x, v_y, v_z) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(- \frac{W - e\phi(r)}{k_B T} \right) \quad (2.10)$$

car la charge des électrons vaut $-e$. Nous faisons maintenant l'hypothèse (à vérifier a posteriori) que la température du plasma est suffisamment élevée pour que l'énergie cinétique des particules domine l'énergie électrostatique, soit $e\phi \ll k_B T$. Dans ces conditions, la modification de la fonction de distribution f_e due au potentiel $\phi(r)$ peut être traitée comme une perturbation :

$$f_e \simeq f_{e_0} \left(1 + \frac{e\phi(r)}{k_B T} \right) \quad (2.11)$$

où f_{e_0} est la distribution précédant l'introduction de la charge q dans le plasma telle qu'elle est donnée par l'équation (2.2). Comme pour l'équation (2.1), une intégration dans l'espace des vitesses de l'équation (2.11) conduit à l'expression suivante pour la densité électronique :

$$n_e \simeq n_0 \left(1 + \frac{e\phi(r)}{k_B T} \right) \quad (2.12)$$

Connaissant la densité des électrons n_e et la densité des protons $n_i = n_0 + \delta(r)$ nous cherchons l'expression du potentiel ϕ en résolvant l'équation de Poisson en coordonnées sphériques

$$\begin{aligned} -\epsilon_0 \nabla^2 \phi &= -\epsilon_0 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = e(n_0 + \delta(r)) - en_0 \left(1 + \frac{e\phi(r)}{k_B T} \right) \\ &= e\delta(r) - \frac{e^2 n_0 \phi}{k_B T} \end{aligned} \quad (2.13)$$

L'intégration de cette équation à partir d'une distance ϵ quelconque de la charge q conduit à

$$\int_{\epsilon}^{\infty} 4\pi r^2 dr \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = \frac{1}{l_d^2} \int_{\epsilon}^{\infty} 4\pi r^2 dr \phi(r) \quad (2.14)$$

où nous avons introduit la longueur de Debye

$$l_d = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T}{e^2 n_0} \right)^{1/2} \quad (2.15)$$

L'équation (2.14) doit être vérifiée quelque soit ϵ strictement positif. Cela n'est possible que lorsque les deux intégrands sont identiques, soit

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = \frac{\phi}{l_d^2} \quad (2.16)$$

dont la solution est $\phi = \frac{1}{r} (K_1 e^{-r/l_d} + K_2 e^{r/l_d})$. Les constantes K_1 et K_2 sont fixées respectivement par la nécessité du potentiel à converger vers le potentiel coulombien lorsque r tend vers 0 et vers 0 quand r tend vers l'infini, d'où la solution

$$\phi(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \exp(-r/l_d) \quad (2.17)$$

Ce potentiel est positif, il est donc attracteur pour les électrons, lesquels, conformément à l'équation (2.12), voient leur densité augmenter vers le centre d'une sphère de diamètre $\sim l_d$ (sphère de Debye autour de la charge q). Pour $r > l_d$ le potentiel décroît exponentiellement et l'influence de la charge q sur les autres charges du plasma devient rapidement négligeable. On dit que la charge est écrantée par l'excès d'électrons dans la sphère de Debye. La conséquence directe de ce phénomène est que le champ électrique d'une particule donnée ne pourra pas être ressenti par les particules du plasma qui sont distantes de plus d'une longueur de Debye.

Le temps t_D nécessaire à la formation du nuage de Debye est de l'ordre du rapport entre sa dimension caractéristique et la vitesse caractéristique de déplacement des électrons² soit

$$t_D = l_d/v_{\text{the}} = w_p^{-1}/\sqrt{2} \quad (2.18)$$

où w_p est la pulsation plasma et ne dépend que de la densité de celui ci. Il s'agit de la fréquence propre à laquelle le plasma va osciller si il subit une perturbation (voir section 4.5). Pour les protons le temps de rééquilibrage avec le nouveau potentiel est plus long d'un facteur $(m_i/m_e)^{1/2} \simeq 43$ ce qui justifie qu'on les suppose immobiles. L'hypothèse $e\phi \ll k_B T$ est valable pour la majorité des électrons de la sphère de Debye si le rayon de celle ci est grand devant r_{moy} , la distance moyenne entre les particules. Cela définit les plasmas "cinétiques". La majorité des plasmas spatiaux le sont, en particulier dans le milieu interplanétaire, mais nous verrons dans la section 2.5 que cela n'est pas toujours le cas .

2.5 Trajectoires et collisions

Une des principales différences entre un gaz ionisé et un gaz neutre est la nature des collisions entre particules. Les collisions entre particules neutres ressemblent à celles entre boules de billard. Les trajectoires peuvent être représentées comme une succession de lignes droites séparées par des changements rapides de direction qui se produisent à

²qui est la vitesse thermique définie dans l'équation (2.4)

chaque fois que deux particules se retrouvent séparées d'une distance égale à la somme de leurs rayons. Le libre parcours moyen est alors la distance moyenne parcourue entre de telles rencontres.

Dans le cas d'un gaz ionisé la situation est très différente car chaque particule interagit constamment et simultanément avec un grand nombre d'autres particules via leurs champs électriques. Ainsi, les trajectoires des particules sont faites d'une superposition d'une multitude de petites perturbations. Le libre parcours moyen est alors défini comme la distance moyenne que la particule doit parcourir pour que l'effet cumulé de ces petites perturbations modifie notablement la direction de la vitesse [14]. Comme nous le verrons le parcours moyen augmente donc très fortement avec l'énergie cinétique car les particules rapides, peu sensibles au potentiel des autres particules, ne sont quasiment pas déviées.

Le rôle des collisions dans un plasma est fondamental. Elles sont souvent le principal vecteur d'échange d'énergie entre particules et à ce titre, font tendre la distribution de vitesse vers une distribution maxwellienne, thermalisent le plasma et contrôlent les différents coefficients de transport. Quantifier ces effets est crucial pour la compréhension de n'importe quel problème physique mettant en jeu des plasmas. De plus, le fort accroissement du libre parcours avec l'énergie est au coeur de propriétés fondamentales et explique notamment l'échec des calculs classiques des coefficients de transport pour des plasmas qui ne sont pas fortement collisionnels [25],[13].

Considérons un plasma à la température T et de densité numérique $n_e = n_i = n_0$. Les énergies cinétiques et potentielles nous permettent de définir une première distance caractéristique des collisions dans un plasma. En effet, deux particules vont avoir une forte influence l'une sur l'autre lorsqu'elles seront suffisamment proches pour que leur énergie potentielle d'interaction électrostatique soit égale à deux fois l'énergie cinétique de leur mouvement relatif. C'est le cas quand elles sont séparées de moins d'un rayon de forte interaction, qui est noté $r_{\pi/2}$ et qui vaut

$$r_{\pi/2} = \frac{e^2}{12\pi\epsilon_0 k_B T} \quad (2.19)$$

L'indice $\pi/2$ vient du fait qu'un électron thermique passant à une distance égale à $r_{\pi/2}$ d'un proton verra sa trajectoire déviée d'un angle de $\pi/2$.

La distance moyenne entre particules $r_{\text{moy}} \simeq n^{-1/3}$ définit l'énergie typique d'interaction électrostatique

$$E_{\text{p,moy}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\text{moy}}} \quad (2.20)$$

En divisant par l'ordre de grandeur de l'énergie cinétique typique $k_B T$ on obtient le paramètre de couplage :

$$\Gamma = \frac{n^{1/3} e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T} \quad (2.21)$$

Le plasma est dit faiblement couplé quand $\Gamma \ll 1$. Dans ce cas la distance moyenne entre particule est grande devant $r_{\pi/2}$. Cette condition est valable pour la grande majorité des plasmas spatiaux et nous la garderons comme hypothèse pour le reste de cette section.³ Dans ce cas, le nombre moyen de particules assez proches d'une particule donnée pour subir une forte déviation est de l'ordre de $nr_{\pi/2}^3 < \Gamma^3 \ll 1$. Les chances de réalisation de cette configuration sont donc minimales. En revanche, comme nous l'avons vu dans la section 2.4, les particules ressentent à chaque instant le champ électrique de toutes les particules présentes dans un volume de taille caractéristique l_d , c'est à dire $nl_d^3 = (4\pi\Gamma)^{-3/2} \gg 1$ particule. Chacune de ces particules ne produit qu'une très faible déviation car la distance moyenne entre particules est très supérieure au rayon de forte interaction. Mais nous pouvons nous demander ce qui détermine le libre parcours : les collisions proches, fortes mais rares, ou les interactions distantes, faibles mais fréquentes ?

Dans un premier temps, considérons uniquement les collisions proches. Elles produisent une grande déviation à chaque fois que deux particules sont distantes de moins de $r_{\pi/2}$. La section efficace de ces collisions est donc la surface d'un disque de rayon $r_{\pi/2}$ soit,

$$\sigma_{c,\text{proche}} = \pi r_{\pi/2}^2 \quad (2.22)$$

Le libre parcours correspondant est la longueur d'un cylindre de section $\sigma_{c,\text{proche}}$ contenant une particule ce qui donne

$$l_{\text{pm,proche}} \simeq (n\pi r_{\pi/2}^2)^{-1} \quad (2.23)$$

Considérons maintenant uniquement les collisions distantes. Prenons un électron allant à l'encontre d'un ion (que l'on suppose immobile du fait de sa masse élevée), avec un paramètre d'impact $b > r_{\pi/2}^2$. Soit Δv_{\perp} la variation de vitesse dans la direction perpendiculaire à la direction de vitesse initiale. La déviation due à une collision distante est égale à l'énergie potentielle d'interaction $e^2/(4\pi\epsilon_0 b)$ divisée par l'énergie cinétique de l'électron $3k_B T/2$:

$$\frac{\Delta v_{\perp}}{v} \simeq \frac{2r_{\pi/2}^2}{b} \quad (2.24)$$

si $b < l_d$ et nulle si $b > l_d$ [14]. Chacune de ces collisions induit une déviation dans une direction aléatoire. Elles ont donc tendance, en moyenne, à s'annuler. Mais la moyenne

³Des considérations sur les plasmas modérément ou fortement couplés sont faites dans les sections 3.3.2 et 5.2.

du carré de ces déviations ne s'annule pas et elles finissent par avoir une réelle incidence sur la trajectoire de la particule. Le nombre de collision de paramètre d'impact b , produisant une déviation au carré $(\Delta v_{\perp}/v)^2$, est proportionnel à $2\pi b$, la section efficace des collisions distantes est donc donnée par

$$\sigma_{c,distant} = \int_{r_{\pi/2}}^{l_d} \left(\frac{\Delta v_{\perp}}{v} \right)^2 2\pi b db \simeq 8 \ln(\Lambda) \sigma_{c,proche} \quad (2.25)$$

avec $\Lambda = l_d/r_{\pi/2} = 12\pi n l_d^3 \simeq \Gamma^{-3/2}$. Le libre parcours moyen correspondant est la distance qu'un électron doit couvrir pour que la somme des $(\Delta v_{\perp}/v)^2$ soit égale à 1. D'après l'équation (2.25), il est donc plus petit que le libre parcours moyen due aux collisions proche uniquement d'un facteur $8 \ln(\Lambda)$.

Le paramètre sans dimensions $\lambda = \ln(\Lambda)$, souvent appelé logarithme de Coulomb, est une mesure de l'importance des interactions distantes par rapport aux collisions proches. Dans un plasma faiblement couplé, comme le vent solaire, λ est très supérieur à 1. Par conséquent, les collisions distantes sont fortement dominantes et le libre parcours moyen l_{pm} vaut dans ce cas

$$l_{pm} \simeq \frac{l_{pm,proche}}{8\lambda} \simeq \frac{3r_{moy}}{4\pi\Gamma^2 \ln(1/\Gamma)} \quad (2.26)$$

où nous avons fait l'approximation $\lambda \simeq \ln(\Gamma^{-3/2})$. Un calcul parfaitement rigoureux donne une valeur qui n'est pas très différente de celle-ci. Il ne faut pas oublier que nous parlons ici de collisions électron-ion. Dans le cas de collisions entre particules de même espèce, on ne peut plus faire l'hypothèse qu'une des deux particules est immobile. Dans ce cas, la collision ne modifie pas seulement la direction de la vitesse mais aussi son amplitude. L'ensemble de ce qui a été traité dans cette section est repris et illustré par des simulations numériques dans la section 5.1.

Chapitre 3

Description du code

3.1 Généralités

Dans ce chapitre, je m'attache à décrire précisément une méthode de simulation N-Corps pour les plasmas. Le principe général de cette méthode est assez simple et est bien décrit par la figure 3.1.

Un plasma est tout simplement une collection de particules chargées. Ce système est entièrement défini par les 3 coordonnées de positions, les 3 coordonnées de vitesse, les charges et les masses de chacune des N particules qui le composent. Ces $8N$ paramètres sont fixés au début de la simulation. Ce sont les conditions initiales de la simulation.

Chaque particule exerce sur les autres une force, dite *force coulombienne*, qui est proportionnelle au produit de leurs charges et inversement proportionnelle au carré de leur distance. Le principe de la simulation N-Corps est de calculer ces forces, qui ne dépendent que des charges et de la position des particules, puis de faire déplacer les particules sur une courte distance en fonction de leurs vitesses et des forces qu'elles subissent. Le calcul du déplacement des particules peut aussi prendre en compte des forces externes comme un champ de pesanteur (voir section 4.6) ou un champ magnétique. Une fois que les particules ont effectué leurs mouvements infinitésimaux, il faut recalculer les forces ressenties par chacune d'entre elle en fonction de leurs nouvelles positions. Chaque itération successive du calcul des forces et de l'avancement des particules fera évoluer le système un peu plus loin dans le temps succédant l'instant initial.

L'analogie avec la dynamique gravitationnelle est très simple : il suffit de remplacer les masses par les charges dans le calcul des forces d'interactions. Au final, la seule différence est que certaines forces auront un sens opposé à celui que l'on trouverai dans le cas d'une interaction gravitationnelle car les charges sont des grandeurs algébriques alors que les masses sont toujours positives. En revanche, la résultante de ces forces pourra être très différente du cas gravitationnel comme le montre la figure 3.2. On remarque également sur cette figure que la présence de charges négatives peut, dans

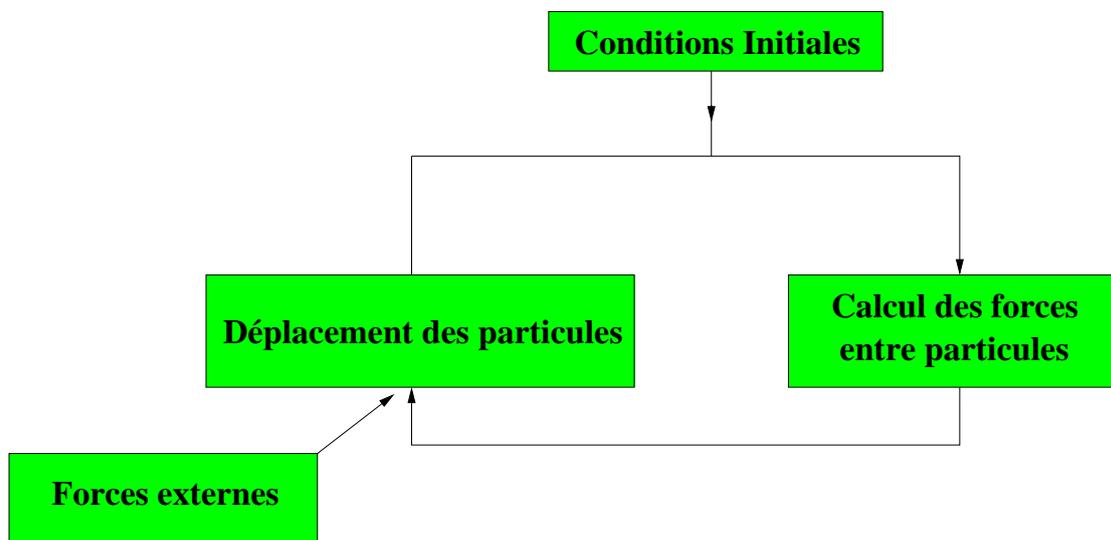


FIG. 3.1: Algorithme générique d'une simulation à N -Corps

certaines configurations, placer le barycentre des charges loin du barycentre du système équivalent en masse. Il en résultera quelques difficultés pour l'adaptation du code.

La physique des plasmas présente donc une forte analogie avec la dynamique gravitationnelle tout en ayant des grandeurs caractéristiques propres qui n'ont pas d'équivalent direct. Le chapitre 2 a décrit les grandeurs caractéristiques importantes des problèmes auxquels nous nous intéressons. L'algorithme *falcON*, qui sert à calculer les forces d'interaction dans le cas gravitationnel et la manière dont il a été adapté au calcul des forces coulombiennes seront détaillés dans la section 3.2. La section 3.3 montre comment l'avancement des particules est effectué de manière à respecter les grandeurs caractéristiques du plasma.

3.2 Calcul des forces

Dans un code de simulation N -Corps, le module de calcul des forces, est, de loin, le plus coûteux en temps de calcul. C'est donc précisément sur ce module que le plus d'efforts ont été réalisés en terme d'optimisation algorithmique au cours des années précédentes. Un des derniers algorithmes en date, *falcON*, pour Force Algorithm with Complexity $\mathcal{O}(N)$, écrit par Walter Dehnen, a, comme son nom l'indique, une complexité en $\mathcal{O}(N)$. Cela signifie que le temps de calcul augmente linéairement avec le nombre N de particules. C'est un énorme progrès quand on considère que les premiers codes, fondés sur une méthode de calcul direct, avaient une complexité en $\mathcal{O}(N^2)$. Cela implique par exemple que si le système contient un million de particules, l'algorithme sera à peu près un million de fois plus rapide que ses plus anciens prédécesseurs, et cela

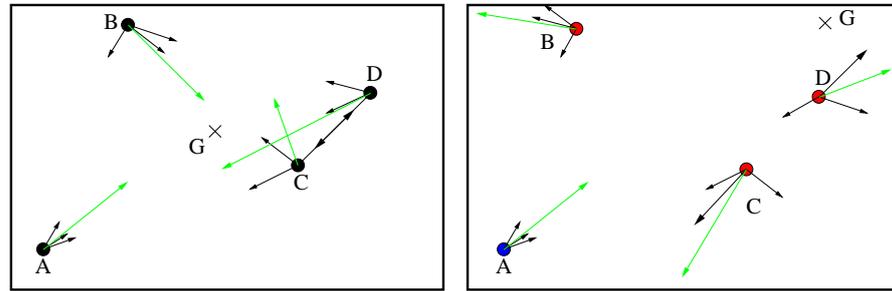


FIG. 3.2: Analogie entre interaction gravitationnelle et interaction coulombienne. A gauche, les interactions sont gravitationnelles entre quatre particules de même masse. A droite les interactions sont coulombiennes. Les particules rouges sont chargées positivement $+Q$ et la particule bleue est chargée négativement $-Q$. Les flèches noires représentent les forces subies par chacune des quatre particules A, B, C et D. Les flèches vertes représentent les résultantes de ces forces sur chaque particule. Le point G, symbolisé par une croix, représente respectivement le barycentre des masses et des charges. On remarque que les forces, particule à particule, sont de même intensité dans les deux cas, seul le sens dans laquelle elles s'exercent peut changer. Il en découle néanmoins des résultantes très différentes, sauf pour la particule A qui subit des forces strictement identiques dans les deux cas.

sans compter l'amélioration des performances des ordinateurs.

falcON a été le point de départ de cette thèse et constitue le coeur du code N-Corps développé pour les plasmas. La description qui en est faite ici reprend uniquement les grandes lignes de celle faite par l'auteur lui-même dans [6]. Dans la section 3.2.1 nous allons décrire son fonctionnement puis nous verrons comment il a été adapté au cas du calcul des forces d'interactions coulombiennes entre particules chargées dans la section 3.2.2. Enfin, la section 3.2.3 explique comment et pourquoi les forces sont lissées.

3.2.1 L'algorithme *falcON* dans le cas gravitationnel

Champ gravitationnel d'une collection de masse

L'objectif de l'algorithme *falcON* est de calculer le potentiel gravitationnel ϕ et son gradient, ressenti par chaque particule \mathbf{x}_i et créé par les $N - 1$ autres particules soit :

$$\phi(\mathbf{x}_i) = - \sum_{j \neq i} \mu_j g(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3.1)$$

où μ_j est la masse de la particule j et g décrit l'interaction entre deux particules, numérotées i et j , en fonction de la distance $(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ qui les sépare. En mécanique Newtonienne

$$g(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \frac{G\mu_i}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|} \quad (3.2)$$

mais comme nous serons amenés à prendre une fonction différente pour g (Cf section 3.2.3) nous allons décrire le principe de fonctionnement de l’algorithme dans le cas général de g quelconque.

La construction de l’arbre

La phase dite de “construction de l’arbre” est la toute première étape du calcul des forces par *falcON*. Pendant cette phase, les particules sont toutes placées dans des boîtes plus ou moins grandes et emboîtées les unes dans les autres selon un algorithme qui est décrit avec précision dans [1]. Ce qu’on appelle “l’arbre” est l’ensemble de ces boîtes (ou cellules).

La figure 3.3 illustre l’état final des cellules dans le cas bidimensionnel. Pour l’obtenir, l’ensemble des particules est d’abord placé dans une unique cellule carrée (cubique en 3D). Ensuite, on applique la loi de construction suivante : si une cellule contient plus de N_{crit} particules elle est divisée en plusieurs cellules plus petites et ainsi de suite jusqu’à ce qu’aucune cellule n’ait plus besoin d’être divisée ou que la profondeur maximale de l’arbre D_{max} soit atteinte. Autrement dit, D_{max} est le nombre maximum de fois qu’une cellule peut être divisée. Les paramètres D_{max} et N_{crit} sont fixés par l’utilisateur et déterminent la qualité de l’arbre. Plus N_{crit} est petit et plus D_{max} est grand, mieux l’arbre décrira le système. En contrepartie, les temps de construction et de parcours de l’arbre pendant la phase de calcul d’interaction entre les cellules seront plus long. Comme pour tous les paramètres, il y a donc un compromis à trouver entre qualité de la description et coût de calcul. Dans toute mes simulations j’ai utilisé $N_{\text{crit}} = 8$ et $D_{\text{max}} = 50$ qui sont les valeurs par défaut conseillées par l’auteur de *falcON*.

Généralement, le temps de calcul nécessaire à la construction de l’arbre est petit devant le temps de calcul des forces. En revanche, le temps de construction de l’arbre augmente plus rapidement que le temps de calcul des forces quand N augmente. En extrapolant les résultats donnés dans [6], il finit même par le dépasser quand $N > 10^{10}$. Cela représente donc une limite théorique du nombre de particules que l’on peut simuler en conservant une complexité $\mathcal{O}(N)$.

Interaction entre cellules

Considérons deux cellules A et B (voir figure 3.4), qui ont des centres de masse \mathbf{G}_A et \mathbf{G}_B et la fonction g qui décrit l’interaction entre deux corps aux positions \mathbf{X} dans A et \mathbf{Y} dans B (voir section 3.2.1). On peut écrire le développement de Taylor de g au voisinage de $\mathbf{R} = \mathbf{G}_B - \mathbf{G}_A$

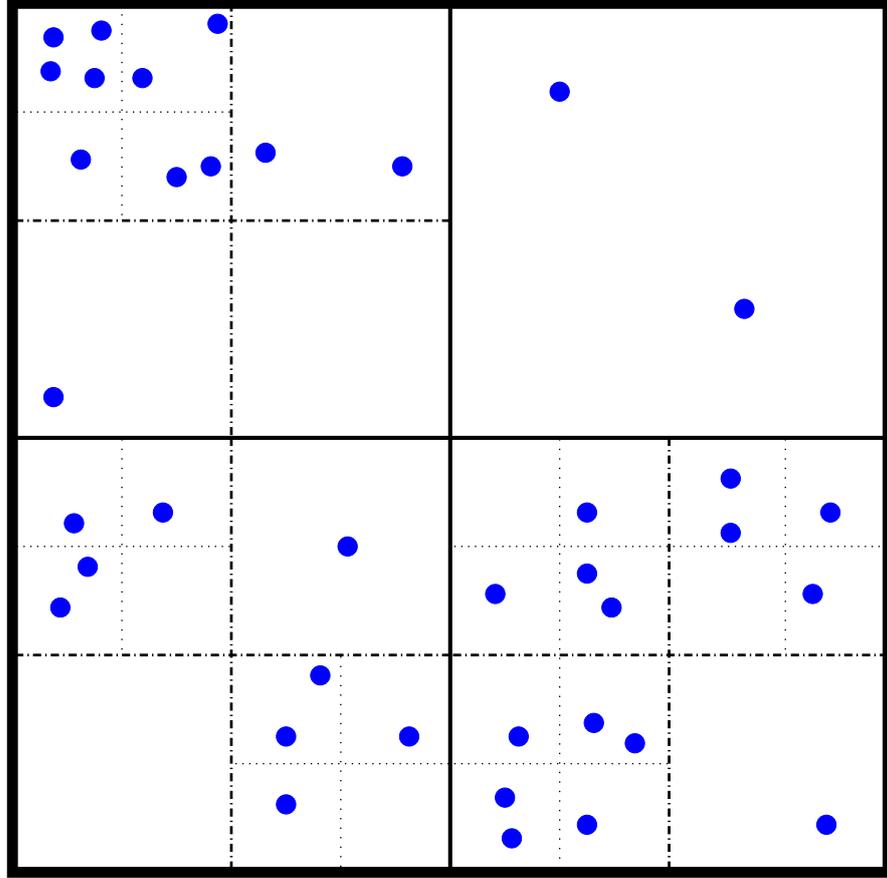


FIG. 3.3: Schéma de construction d'un arbre. Ici $N_{\text{crit}} = 3$ et $D_{\text{max}} = 3$. Si on choisissait une profondeur maximale supérieure pour l'arbre, la petite cellule en haut à gauche du schéma devrait être raffinée à un ordre supérieur.

$$g(\mathbf{X} - \mathbf{Y}) = \sum_{n=0}^p \frac{1}{n!} (\mathbf{X} - \mathbf{Y} - \mathbf{R})^{(n)} \odot \nabla^{(n)} g(\mathbf{R}) + \mathcal{R}_p(g) \quad (3.3)$$

où p est l'ordre du développement et \mathcal{R}_p est le reste dans le développement en série de Taylor avec reste intégrale. $\mathbf{x}^{(n)}$ est la notation pour le produit tensoriel d'un vecteur \mathbf{x} avec lui même n fois, \odot représente une contraction tensorielle et $\nabla g(\mathbf{R})$ représente le gradient de g en \mathbf{R} . En introduisant l'équation (3.3) dans l'équation (3.1) et en limitant la somme sur j à l'ensemble des corps inclus dans la cellule B on obtient une expression du potentiel en tout point \mathbf{x} de la cellule A généré par l'ensemble des particules de la cellule B (Voir annexe A pour plus de détails)

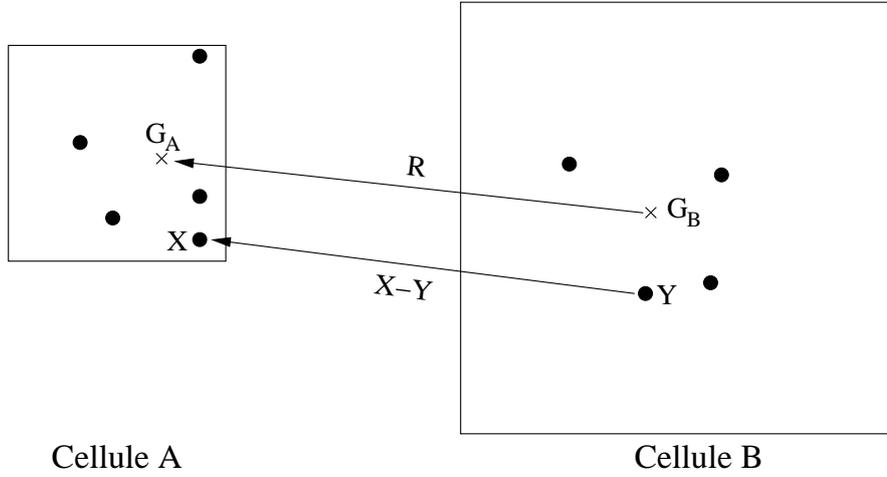


FIG. 3.4: Interaction entre deux cellules représentées par les deux boîtes carrées. Les points noirs sont les corps et les croix indiquent le centre de masse de chaque cellule (G_A et G_B).

$$\phi_{B \rightarrow A}(\mathbf{x}) = - \sum_{m=0}^p \frac{1}{m!} (\mathbf{x} - \mathbf{z}_A)^{(m)} \odot \mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{m,p} + \mathcal{R}_p(\phi_{B \rightarrow A}) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{m,p} = \sum_{n=0}^{p-m} \frac{-1^n}{n!} \nabla^{(n+m)} g(\mathbf{R}) \odot \mathbf{M}_B^n \quad (3.5)$$

$$\mathbf{M}_B^n = \sum_{y_i \in B} \mu_i (\mathbf{y}_i - \mathbf{z}_B)^{(n)} \quad (3.6)$$

Les tenseurs \mathbf{M} sont les moments multipolaires de la cellule B. Le champ de gravité que la cellule B exerce sur la cellule A est représenté par les tenseurs de champ \mathbf{C} . La sommation sur l'indice m correspond à l'évaluation de ce champ au point de coordonnée \mathbf{x} . Par définition du centre de masse, le moment d'ordre 1 de B, soit \mathbf{M}_B^1 est nul. Ce qui simplifie l'évaluation des coefficients des tenseurs $\mathbf{C}_{B \rightarrow A}$. Par ailleurs, le moment multipolaire d'ordre p (\mathbf{M}_B^p) n'intervient que dans $\mathbf{C}^{0,p}$ et n'affecte donc que ϕ et non pas $\nabla\phi$ qui est en fait la seule grandeur intéressante. On ne tiendra donc pas compte de ce multipôle non plus. Si on suppose que g ne dépend que de r et en développant jusqu'à l'ordre $p = 3$, ce qui est le cas dans *falcON*, on trouve l'expression suivante pour ces tenseurs

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A}^0 = M_B \left[D^0 + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{M}}_{Bii}^2 D^1 + \frac{1}{2} \mathbf{R}_i \mathbf{R}_j \tilde{\mathbf{M}}_{Bij}^2 D^2 \right] \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_{B \rightarrow A, i}^1 &= M_B \left[\mathbf{R}_i \left(D^1 + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{M}}_{Bjj}^2 D^2 + \frac{1}{2} \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k \tilde{\mathbf{M}}_{Bjk}^2 D^3 \right) + \mathbf{R}_j \tilde{\mathbf{M}}_{Bij}^2 D^2 \right] \\
\mathbf{C}_{B \rightarrow A, ij}^2 &= M_B \left[\delta_{ij} D^1 + \mathbf{R}_i \mathbf{R}_j D^2 \right] \\
\mathbf{C}_{B \rightarrow A, ijk}^3 &= M_B \left[\left(\delta_{ij} \mathbf{R}_k + \delta_{jk} \mathbf{R}_i + \delta_{ki} \mathbf{R}_j \right) D^2 + \mathbf{R}_i \mathbf{R}_j \mathbf{R}_k D^3 \right]
\end{aligned}$$

avec $M_B = \mathbf{M}_B^0$ qui est la masse de la cellule B et $\tilde{\mathbf{M}}_B^2 = \mathbf{M}_B^2 / \mathbf{M}_B^0$ est le quadrupôle normalisé. On utilise la convention de sommation sur l'indice répété. De plus

$$D^m = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^m g(r) \Big|_{r=|\mathbf{R}|} \quad (3.8)$$

Séparation des cellules

Pour que l'interaction entre deux cellules, décrite dans la section 3.2.1, soit pertinente, il faut que le développement (3.3) converge correctement. Cela n'arrive que si les deux cellules sont suffisamment éloignées l'une de l'autre. Avant de calculer l'interaction entre deux cellules, *falcON* effectue donc un test pour savoir si ces deux cellules sont suffisamment séparées pour que l'approximation d'une interaction mutuelle soit acceptable. Le "critère d'ouverture" détermine si les deux cellules sont bien séparées. Si les cellules ne vérifient pas ce critère, alors il faut faire interagir des cellules plus petites, voir même en dernier recours, faire localement une sommation directe entre particules.

Ce critère s'écrit

$$|\mathbf{G}_A - \mathbf{G}_B| > (r_{\max, A} + r_{\max, B}) / \theta \quad (3.9)$$

où l'angle d'ouverture θ est un paramètre de la simulation qui contrôle la précision du code. r_{\max} est le rayon d'une sphère centrée au niveau du centre de masse \mathbf{G} et qui contient toutes les particules de la cellule. Plus θ est petit plus l'approximation sera précise mais moins elle sera efficace en temps de calcul. Quand θ tend vers 0, aucune paire de cellules ne peut être bien séparée et le code se réduira à une sommation directe entre particules. Dans quasiment toutes les simulations, j'ai conservé la valeur $\theta = 0.6$ suggérée par Dehnen.

Dans [6], l'auteur donne la majoration suivante du reste \mathcal{R}_p du gradient de l'équation (3.3) :

$$|\mathcal{R}_p(\nabla \phi_{B \rightarrow A})| \leq \frac{(p+1)\theta^p M_B}{(1-\theta^2)R^2} \quad (3.10)$$

Ce reste peut être vu comme l'erreur d'approximation commise lorsque l'on calcul l'interaction mutuelle entre deux cellules plutôt que de faire la sommation directe entre particules. Cette erreur dépend de la masse M_B de la cellule. L'erreur d'approximation totale sera donc dominée par celle commise sur les cellules massives. On peut donc

se permettre de prendre des θ légèrement plus grands lors du calcul des interactions entre cellules de faible masse. Ceci est géré par l'algorithme et c'est une des principales raisons de la réduction de sa complexité à $O(N)$.

3.2.2 Adaptation de *falcON* à la simulation de plasmas

Après la description de l'algorithme *falcON*, nous allons nous attacher, dans cette section, à comprendre les difficultés posées par son adaptation au calcul d'interaction coulombienne et proposer des solutions.

Problème des charges négatives

Le problème de l'interaction gravitationnelle entre N masses ponctuelles se réduit finalement à l'équation (3.1). L'interaction coulombienne entre N charges ponctuelles s'écrit exactement de la même manière à la différence près que les μ_i sont désormais les charges des particules et non plus leurs masses. Les μ_i peuvent alors prendre des valeurs négatives et cela fait s'effondrer tout l'algorithme *falcON* pour deux raisons.

Tout d'abord, comme nous l'avons déjà vu sur la figure 3.2, le barycentre d'un ensemble de points dont certains des poids sont négatifs peut se retrouver à la périphérie du système et parfois même en dehors de celui-ci. Pour en revenir à *falcON*, il en résulte que le point G pourrait se retrouver en dehors de la cellule dont il est le barycentre et le développement (3.3) n'aurait plus lieu d'être car il convergerait très mal.

Pour trouver un point pertinent où faire le développement (3.3), on pourrait être tenté de prendre le point G barycentre des particules pondérées par la valeur absolue de leur charge. Mais surgit alors le second problème. Le terme de dipôle \mathbf{M}^1 (défini dans l'équation (3.6)), qui est nul par définition dans le cas gravitationnel, ne l'est plus dans le cas coulombien si l'on définit G de cette manière. Ce terme étant censé être nul, il n'est pas évalué par *falcON* et l'algorithme donnera donc un potentiel erroné. De manière générale en physique des plasmas le terme de dipôle est le terme dominant alors qu'en dynamique gravitationnelle il est négligé et c'est le terme de monopôle qui domine. Il faut donc trouver le moyen de calculer un terme de dipôle à partir des termes qui sont calculés dans la version de base de *falcON*.

Séparation des espèces

La résolution la plus rapide des deux problèmes évoqués dans la section précédente consiste à considérer le système comme la somme de deux sous-systèmes, chacun constitué de charges de même signe. Ainsi, pour chaque sous-système, *falcON* est parfaitement performant. Le résultat final est alors la différence entre le potentiel créé par les charges positives et celui créé par les charges négatives. C'est en effectuant cette différence que l'on retrouve le terme de dipôle qui n'était pas calculé auparavant.

En pratique, notre système est constitué uniquement de proton de charge 1 et d'électrons de charge -1 . A chaque pas de temps, la construction de l'arbre et le calcul des forces sont effectués deux fois. Une première fois en attribuant leur charge aux protons et en donnant une charge négligeable aux électrons. Ce qui nous donne la force exercée par les protons sur eux mêmes ainsi que sur les électrons. Puis une seconde fois en attribuant leur charge aux électrons et une charge négligeable aux protons ce qui nous donne la contribution des électrons. Le théorème de superposition du potentiel nous permet ensuite, tout simplement, de sommer les contributions de chaque espèce.

Optimisations possibles

Cette méthode a le mérite de fonctionner mais ce n'est clairement pas la plus efficace. En effet, elle introduit un facteur 2 supplémentaire dans le temps de calcul car il faut évaluer les forces deux fois à chaque pas de temps. De plus, elle introduit des erreurs numériques artificiellement grandes car le terme de dipôle, qui est dominant, est obtenu en faisant la différence entre les deux "grands nombres" que sont la contribution totale de chaque espèce.

Une solution à ces problèmes serait de faire calculer le terme de dipôle pour chaque cellule par *falcON*. Bien sûr cela aurait un coût en temps de calcul mais bien inférieur au facteur 2 et cela résoudrait le problème de précision numérique par la même occasion. Pour plus de détails, le lecteur peut se référer à l'annexe B.

L'équation 3.10 montre comment l'ordre p du développement influence l'erreur commise par l'approximation. L'auteur du code *falcON* précise que pour des calculs de dynamique stellaire sans collisions $p = 3$ est suffisant (erreur relative sur les forces $\leq 10^{-2}$). Pour certaines de nos applications où les collisions proches doivent être traitées avec précision, il faudrait peut être augmenter l'ordre p du développement. Des tests devraient être effectués pour savoir si le gain en précision serait réellement profitable par rapport au coût supplémentaire en temps de calcul. A titre de comparaison, des codes similaires utilisés en dynamique moléculaire utilisent $p \geq 6$ pour prendre en compte des interactions à courte distance [4].

3.2.3 Longueur de lissage

Principe

D'après l'équation (2.6), le potentiel créé par une charge ponctuelle diverge quand la distance à la particule tend vers 0. Le traitement numérique est difficile et requiert le choix d'un pas de temps qui lui aussi doit tendre vers 0. Mais les rencontres entre particules qui justifient le choix d'un si faible pas de temps sont très rares et n'ont généralement que peu d'influence sur l'évolution du système. D'où le choix d'un po-

tentiel qui ressemble beaucoup au potentiel coulombien mais qui ne diverge pas en 0. Cela équivaut à considérer les particules non pas comme des charges ponctuelles mais comme des densités de charge à symétrie sphérique.

Le profil de densité de charge choisi pour une particule est :

$$\rho(r) = 7(1 + x^2)^{-9/2} - 2(1 + x^2)^{-7/2} \quad (3.11)$$

où $x = r/\epsilon$, ϵ étant un paramètre positif défini au début de la simulation qu'on appelle la "longueur de lissage" et r la distance à la particule. On peut noter que la densité de charge devient négative à partir d'une certaine distance, simple astuce numérique sans incidence particulière. La seule grandeur prise en compte dans le code est, en fait, le champ créé par la particule qui s'écrit pour une telle distribution de charge :

$$\mathbf{E}(r) = \frac{Q(r)}{Q} \frac{q}{r^2} \mathbf{e}_r = q \frac{25\epsilon^6 r + 39\epsilon^4 r^3 + 18\epsilon^2 r^5 + 4r^7}{4(\epsilon^2 + r^2)^{9/2}} \mathbf{e}_r \quad (3.12)$$

où q est la charge de la particule, \mathbf{e}_r est le vecteur unité dans la direction radiale, $Q(r) = \int_0^r 4\pi r'^2 \rho(r') dr'$ et $Q = \lim_{r \rightarrow \infty} Q(r)$. On note que lorsque $\epsilon = 0$, on retrouve le champ électrique coulombien. La figure 3.5 montre le profil de densité de charge ainsi que le champ électrique correspondant.

Choix de ϵ

L'utilisation d'une longueur de lissage non nulle correspond à une estimation supplémentaire et introduit un nouveau type d'erreur [5]. En effet, quand deux particules sont à une distance inférieure à ϵ , les forces qu'elles exercent l'une sur l'autre sont biaisées. ϵ peut donc être vu comme la résolution de notre simulation car on ne pourra pas simuler correctement un phénomène qui se passe sur une échelle d'un ordre inférieur ou égal à ϵ . En contrepartie, plus ϵ est petit, moins notre schéma d'intégration dans le temps (voir chapitre 3.3) est efficace et plus il nécessite un petit pas de temps. Il faut donc toujours adapter la valeur de ϵ en fonction du type de simulation effectuée.

En dynamique gravitationnelle, les systèmes sont supposés sans collisions et le lissage a l'avantage supplémentaire d'éliminer les collisions proches qui sont en fait artificielles dans la simulation. On peut donc se contenter d'un ϵ qui vaut la moitié de la distance moyenne entre particules [22]. Mais dans la plupart de nos simulations plasmas ce n'est pas le cas. Nous voulons prendre en compte toutes les collisions et pour cela nous devons considérer la plus petite échelle caractéristique du système, à savoir, le rayon de forte interaction $r_{\pi/2}$ (voir la section 2.3). Dans toutes les simulations pour lesquelles nous désirons prendre en compte les collisions proches on prend donc

$$\epsilon = \frac{r_{\pi/2}}{2} \quad (3.13)$$

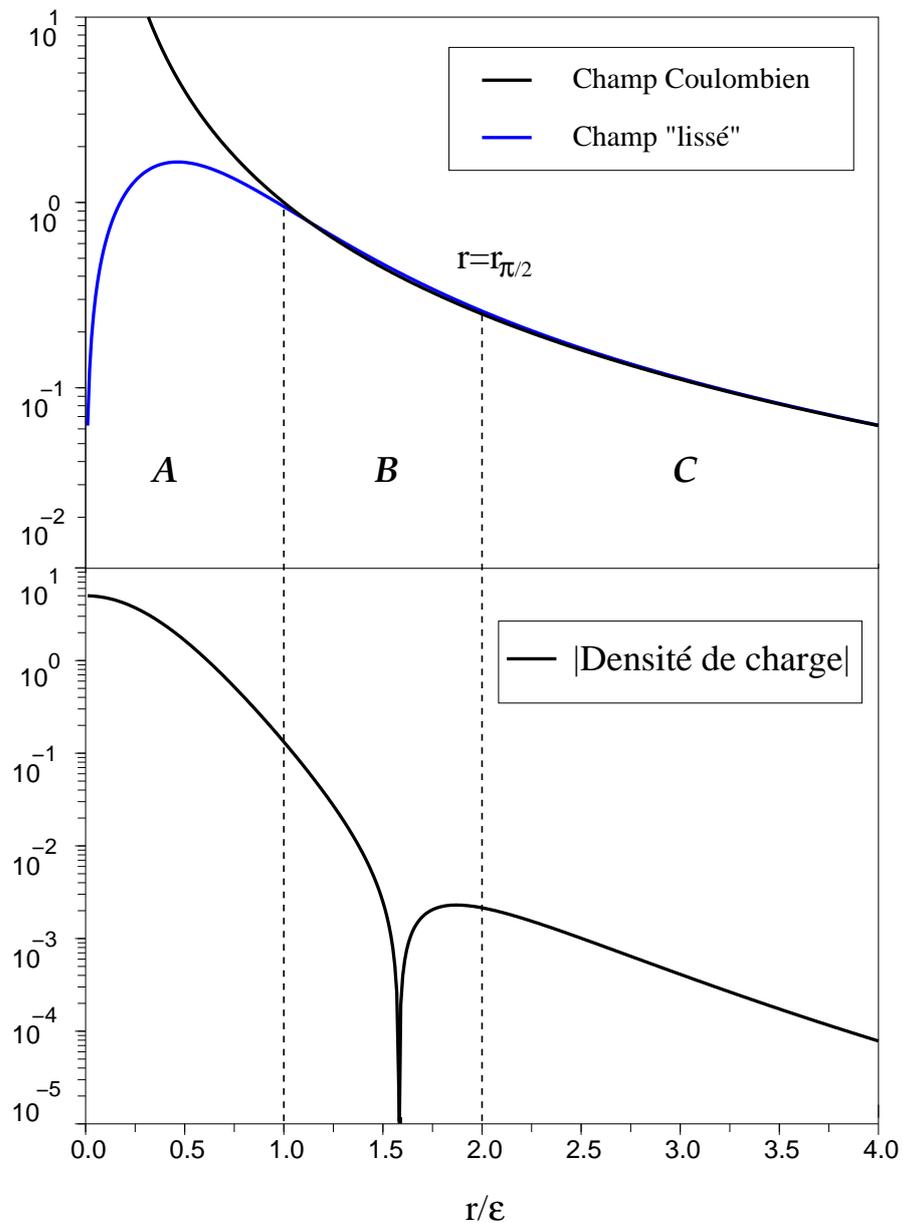


FIG. 3.5: Profils de densité de charge et de champ électrique lissés d'une charge. Les coordonnées en ordonnée sont arbitraires. La densité s'annule en $x = (5/2)^{1/2}$ et devient très légèrement négative ensuite. Les lignes verticales en pointillé délimitent les 3 zones A, B et C. Dans la zone A, $r < \epsilon$, le champ lissé est très inférieur au champ Coulombien mais présente l'avantage de ne pas diverger en 0. Dans la zone B, $\epsilon < r < 2\epsilon$, le champ lissé est très légèrement supérieur au champ Coulombien. L'approximation y est correcte et compense en partie le champ lissé trop faible dans la zone A. Si on choisit $\epsilon = r_s/2$, c'est dans cette zone qu'ont lieu les collisions proches. Dans la zone C, $r > 2\epsilon$, le lissage n'a quasiment plus d'effet et la différence avec le potentiel Coulombien devient négligeable.

C'est le cas pour la grande majorité des simulations qui seront présentées ici. Dans les cas non isothermes, $r_{\pi/2}$ étant une fonction de la température, c'est toujours le $r_{\pi/2}$ minimum, correspondant à la température maximum, qui est pris pour choisir ϵ . Dans les cas de simulation de plasmas sans collisions, nous pouvons nous limiter au critère utilisé en dynamique gravitationnelle et prendre un ϵ qui vaut une fraction de la distance moyenne entre particules.

3.3 Avancement des particules

Une fois connue la force qui s'applique sur chaque particule, il faut l'intégrer dans le temps pour en déduire la variation de vitesse et de position. Cela est fait dans le module appelé "Avancement des particules" sur la figure 3.1. Il existe de très nombreuses méthodes pour cela, de la plus simple à la plus compliquée mais grâce au lissage des forces, nous n'avons pas besoin d'un schéma d'avancement très sophistiqué. D'où le choix du schéma "Leap Frog", l'un des plus simples qui soient.

3.3.1 le schéma Leap Frog

Le principe du schéma "Leap Frog" est de ne pas évaluer l'accélération, la position et la vitesse aux mêmes instants [21]. Soit dt le pas de temps ou, autrement dit, l'intervalle de temps entre deux évaluations d'une même grandeur. Les conditions initiales donnent la position de chaque particule au temps $t = 0$ et la vitesse de chaque particule au temps $t = dt/2$. Ensuite, l'accélération et la position de chaque particule seront calculées aux temps $t = 0, dt, 2dt, \dots, n_{\text{pas}}dt$ ou n_{pas} est le nombre total d'itération dans la simulation. Les vitesses quant à elles seront évaluées aux instants $t = dt/2, 3dt/2, 5dt/2, \dots, (n_{\text{pas}} + 1/2)dt$. Ce décalage dans le temps d'évaluation de la vitesse permet d'avoir un schéma d'ordre 2. Pour comprendre cela, faisons un développement de Taylor de la vitesse au deuxième ordre autour de l'instant t :

$$\mathbf{V}\left(t - \frac{dt}{2}\right) = \mathbf{V}(t) - \frac{d\mathbf{V}}{dt} \frac{dt}{2} + \frac{1}{2} \frac{d^2\mathbf{V}}{dt^2} \frac{dt^2}{4} + O(dt^3) \quad (3.14)$$

$$\mathbf{V}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \mathbf{V}(t) + \frac{d\mathbf{V}}{dt} \frac{dt}{2} + \frac{1}{2} \frac{d^2\mathbf{V}}{dt^2} \frac{dt^2}{4} + O(dt^3) \quad (3.15)$$

L'accélération d'une particule au temps t est donnée par $\mathbf{A}(t) = d\mathbf{V}/dt$. C'est une grandeur connue au moment de l'avancement des particules car on connaît la force qui s'exerce sur la particule au temps t . Des deux équations précédentes on tire la première équation du schéma "Leap Frog" :

$$\mathbf{V}\left(t + \frac{dt}{2}\right) = \mathbf{V}\left(t - \frac{dt}{2}\right) + \mathbf{A}(t)dt + O(dt^3) \quad (3.16)$$

Cette équation donne bien la nouvelle vitesse de la particule en fonction de grandeurs connues, à savoir, sa vitesse au pas de temps précédent et l'accélération qu'elle subit. Pour le calcul de la nouvelle position de la particule, une méthode similaire donne

$$\mathbf{X}(t + dt) = \mathbf{X}(t) + \mathbf{V}\left(t + \frac{dt}{2}\right)dt + \mathcal{O}(dt^3) \quad (3.17)$$

3.3.2 Choix du pas de temps

Une fois le schéma d'avancement choisi, il faut déterminer le pas de temps dt , qui comme le montre l'équation (3.17) fixe la précision de notre schéma. En effet l'erreur commise est de l'ordre de dt^3 et on a tout intérêt à ce qu'elle soit la plus petite possible. En revanche, plus dt sera petit plus il faudra faire d'itérations pour faire évoluer la simulation en cours. Il y a donc, une fois de plus, un compromis à trouver entre qualité de la simulation et temps de calcul.

Pas de temps unique

Dans un premier temps, considérons que toutes les particules avancent de concert avec le même pas de temps. On dit dans ce cas que le pas de temps est unique. De quel temps peut on faire avancer les particules sans recalculer les forces qui s'exercent sur elles et sans commettre d'erreurs graves ? Autrement dit, pendant combien de temps peut on faire avancer les particules sans changer significativement la force qu'elles subissent ?

Nous avons dans la section 3.2.3 vu que la résolution de notre approximation des forces est de l'ordre de la longueur de lissage ϵ . Pour s'assurer une simulation correcte, il suffit donc qu'en moyenne, entre chaque pas de temps, les particules ne soient pas déplacées de plus de ϵ . Nous notons ce pas de temps dt_T et il vaut

$$dt_T = \frac{\epsilon}{4v_{th}} \quad (3.18)$$

Ainsi, toutes les particules ayant une vitesse inférieure à $4v_{th}$ (soit plus de 99.9% des particules si la distribution est maxwellienne) seront assurées d'avoir parcouru moins de ϵ entre deux pas de temps.

Mais ce pas de temps ne dépend que de la température. Dans le cas d'un plasma froid, considérer uniquement le critère (3.18) pourrait amener à choisir un pas de temps beaucoup trop grand. Nous ajoutons donc la condition suivante : les particules doivent parcourir la distance moyenne qui les sépare en au moins 5 pas de temps. Nous notons le pas de temps qui correspond à ce critère dt_n et il vaut

$$dt_n = \frac{r_{moy}}{5v_{th}} \quad (3.19)$$

où $r_{\text{moy}} = n^{-1/3}$ et n est la densité. r_{moy} est la distance moyenne entre particules.

Enfin, on choisit donc le pas de temps de la simulation

$$dt = \min(dt_T, dt_n) \quad (3.20)$$

Rapport de masse

Pour que les critères de choix de pas de temps (3.18) et (3.19) soient pertinents, il faut bien sûr utiliser la vitesse thermique de la population la plus “rapide”. C’est à dire la plus légère car le rapport de vitesse thermique entre deux espèces de même température est égale à la racine carré du rapport des masses des deux espèces. Concrètement, plus le contraste de masse entre les espèces présentes dans la simulation est important, plus le pas de temps choisi devra être faible.

Dans notre cas de simulation de plasma, c’est bien entendu la vitesse thermique des électrons qui va déterminer le pas de temps car c’est l’espèce la moins massive. Conserver un rapport de masse réaliste serait beaucoup trop lourd numériquement car cela impliquerait un pas de temps minuscule. Nous devons donc choisir un rapport de masse qui vérifie toujours l’hypothèse $m_e \ll m_p$, pour que les équations classiques soient toujours valables, tout en veillant à éviter un rapport trop faible. Dans toutes nos simulations nous avons donc choisi

$$\frac{m_p}{m_e} = 50 \quad (3.21)$$

Ce compromis permet de gagner un facteur 6 sur le pas de temps par rapport au véritable rapport de masse qui vaut 1836.

Pas de temps particulier

En pratique, on a la plupart du temps $dt_T \ll dt_n$ et donc $dt = dt_T$. Or, comme nous l’avons déjà remarqué, l’équation (3.18) donne un pas de temps qui est très fortement dépendant de la température du plasma. Avec les équations (2.19) et (2.4) on obtient $dt_T \propto T^{-3/2}$. Lorsque la température augmente, le pas de temps devient donc rapidement très petit pour prendre en compte d’éventuelles collisions proches qui deviennent, paradoxalement, moins probables car $r_{\pi/2}$ diminue. Pour remédier à ce problème, on peut essayer de détecter les quelques particules critiques, qui subissent de fortes accélérations, et de ne donner un petit pas de temps qu’à ces particules bien précises. Pour les autres particules, le pas de temps dt_n est suffisant.

Les particules critiques évoquées sont celles qui subissent une force supérieure à celle que subiraient deux particules situées à moins de $r_{\text{moy}}/10$. Si l’accélération subit par la particule est plus faible que cette accélération critique, on peut la faire avancer de dt_n . Sinon l’avancement de la particule sera uniquement de dt_T à chaque itération. Plus

précisément, sur un cycle, correspondant à une évolution totale du système d'un temps dt_n , l'algorithme sera le suivant

$$\begin{aligned}
 & \text{Calculforces (Sys)} \\
 & \text{Selection} \\
 & \left. \begin{array}{l} \text{Avancement (Crit) + } dt_T \\ \text{Calculforces (Crit)} \end{array} \right\} p/2 \text{ fois} \\
 & \text{Avancement (NonCrit) + } dt_n \\
 & \left. \begin{array}{l} \text{Avancement (Crit) + } dt_T \\ \text{Calculforces (Crit)} \end{array} \right\} p/2 - 1 \text{ fois} \\
 & \text{Avancement (Crit) + } dt_T
 \end{aligned}$$

Sys signifie le système entier. *Crit* correspond à l'ensemble des particules qui subissent une accélération supérieure à l'accélération critique et *NonCrit* à l'ensemble des particules qui subissent une accélération inférieure à l'accélération critique. *Selection* est la procédure qui détermine les sous systèmes *Crit* et *NonCrit*. p est le rapport entre dt_n et dt_T . *Avancement* est la procédure qui met à jour la vitesse et la position des particules en fonction des forces calculées précédemment et du pas de temps choisi. Ce dernier est indiqué par un signe +.

Le cycle débute par l'évaluation des forces subies par toutes les particules du système. Ensuite, la procédure *Selection* détermine les sous systèmes *Crit* et *NonCrit*, les particules qui subissent une accélération surcritique sont alors avancées d'un pas de temps dt_T et leurs accélérations sont recalculées. Ces particules étant généralement très peu nombreuses, le calcul des forces qu'elles subissent est beaucoup moins coûteux que le calcul des forces pour le système entier. Cette opération est répétée $p/2$ fois. A ce moment du cycle, *Crit* se retrouve donc au temps $dt_n/2$ alors que *NonCrit* est encore au temps 0. C'est pourquoi on avance *NonCrit* d'un pas de temps dt_n à cet instant. Puis on recommence à faire évoluer *Crit* progressivement, avec un pas de temps dt_T , jusqu'à ce qu'il se retrouve au même temps que *NonCrit*. Il faut donc encore faire $p/2 - 1$ itérations supplémentaires.

Au final, on aura donc calculé les forces sur tout le système une seule fois et les forces sur *Crit* $(p - 1)$ fois. Avec un pas de temps homogène nous aurions du, pour un même intervalle de temps, calculer les forces sur tout le système p fois. Le gain en temps avec cette méthode dépend donc de p mais aussi de la taille de *Crit*. On a tout intérêt à l'utiliser quand p est grand et que *Crit* est un sous ensemble très petit de l'ensemble des particules, c'est à dire dans le cas de plasmas chauds et peu denses.

Pas de temps dans un plasma couplé

Dans le cas des plasmas froids et denses, ou plus précisément des plasmas couplés, un autre problème se pose. La longueur de lissage choisie d'après l'équation (3.13) n'est plus négligeable devant la distance moyenne entre particules. De plus, la forte densité peut créer des accumulations locales de particules et réduire de manière significative l'échelle typique de variation de l'accélération qui devient donc, en pratique, inférieure à ϵ . Je préconise, pour ce genre de plasma, de choisir un pas de temps homogène 4 à 10 fois inférieur à celui donné par l'équation (3.20) en fonction du degré de couplage du plasma. Pour plus de détail sur les plasmas couplés voir le chapitre 5.2.

3.3.3 Conditions aux limites

Le problème des conditions aux limites dans un code N -corps est assez différent des problèmes de conditions aux limites que l'on rencontre dans des codes plus classiques de type PIC, Vlasov ou Fokker Planck. En effet, n'ayant pas de maillage, le domaine de simulation est, a priori, infini car il est redéfini à chaque pas de temps, au moment de la construction de l'arbre (voir section 3.2.1). Or, on a souvent besoin d'avoir un nombre de particules constant dans un volume donné. Il faut donc trouver des méthodes pour empêcher la sortie des particules de cette zone prédéterminée.

Réflexion

La méthode la plus simple est celle de la réflexion. Elle consiste simplement à faire rebondir, de manière élastique, les particules, sur les surfaces limites de notre domaine de calcul. Cette méthode n'a quasiment aucun effet de bord et n'influence pas du tout l'évolution du système. Elle assure uniquement une densité globale constante.

La réflexion se passe comme suit. Après la mise à jour de la vitesse de la particule, et avant la mise à jour de sa position, on vérifie que sa future position soit bien à l'intérieur du domaine. Si ce n'est pas le cas, on attribue à la particule le vecteur vitesse qui est l'image de son vecteur vitesse actuel par la réflexion sur la surface la plus proche. Ensuite, on continue à appliquer le schéma habituel pour la mise à jour de la position. Les électrons se déplaçant en moyenne d'une distance $\sqrt{m_p/m_e}$ fois supérieure aux protons à chaque pas de temps, ils seront sensibles légèrement plus tôt que les protons à la présence de la surface limite. Mais on s'est assuré, en choisissant le pas de temps, que les électrons se déplacent de moins de ϵ à chaque pas de temps. Or, $\epsilon \ll l_d$ et donc la différence de sensibilité n'a pas d'effet notable sur l'évolution du système.

Thermostats

La méthode de réflexion est très efficace et peu coûteuse mais pour certaine simulation, nous avons besoin de forcer localement une distribution de vitesse donnée. De

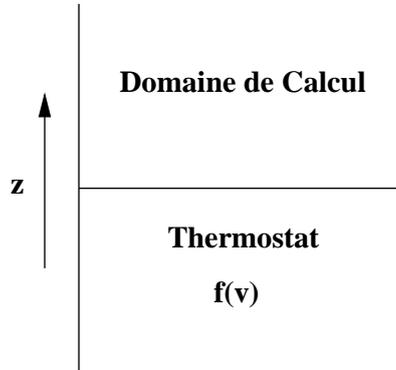


FIG. 3.6: Configuration du thermostat.

telles surfaces sont appelées thermostats. Leur principe de base est relativement simple. Pour chaque particule qui les traverse, on tire aléatoirement une vitesse qui suit la loi $f(v)$ voulue et la particule est renvoyée avec la vitesse obtenue. Le tirage est effectué comme expliqué ci dessous.

On se place en symétrie cylindrique d'axe z comme indiqué sur la figure 3.6. Soit un thermostat défini par sa fonction de distribution de vitesse $f(v)$. Le flux de particules dF entrant dans le domaine de calcul pendant un temps dt à travers une surface dS , avec une vitesse v faisant un angle θ avec l'axe z est

$$dF = v \cos(\theta) f(v) dv^3 dt ds \quad (3.22)$$

En coordonnée sphérique (tout en respectant la symétrie cylindrique) on a donc

$$\begin{aligned} dv^3 &= 2\pi \sin(\theta) v^2 dv d\theta \\ dF &\propto \sin(\theta) \cos(\theta) d\theta v^3 f(v) dv \end{aligned} \quad (3.23)$$

Et le flux total $F = \int_0^{\pi/2} \int_0^{\infty} dF$. Soit une particule incidente de vitesse v_0 . On note $p[A]$ la probabilité de l'évènement A . En vertu de l'équation (3.23) on a

$$p[v_0 < v] = F(v) = \frac{\int_0^v v'^3 f(v') dv'}{\int_0^{\infty} v'^3 f(v') dv'} \quad (3.24)$$

F est appelée la fonction de répartition de vitesse du thermostat. f étant une fonction connue, on peut calculer F , au moins numériquement, et conserver ses valeurs dans un tableau. La figure 3.7 nous montre un exemple de fonction de répartition de vitesse pour le cas d'une distribution f maxwellienne.

F est strictement croissante et est donc une bijection de $[0, +\infty[$ sur $[0, 1[$. Par théorème, on peut alors simuler v_0 par $F^{-1}(u_1)$ où u_1 est une variable aléatoire uniforme

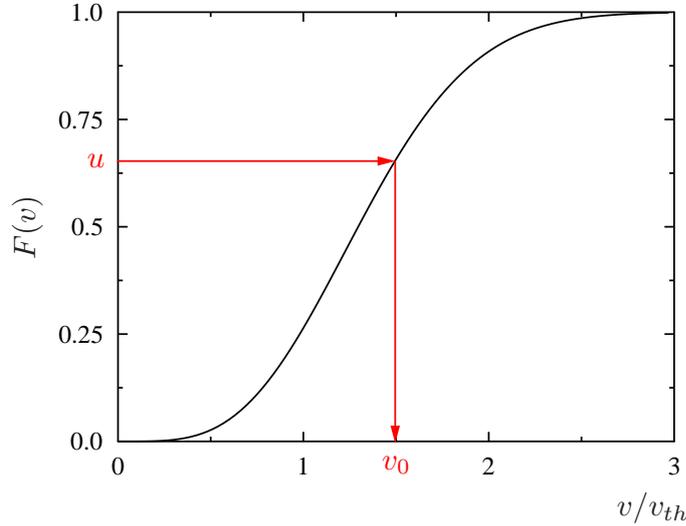


FIG. 3.7: Exemple de fonction de répartition de vitesse dans le cas d'un thermostat avec une distribution maxwellienne. En rouge est figuré le tirage d'une vitesse incidente.

entre 0 et 1 et F^{-1} est la bijection réciproque de F . Connaître F numériquement suffit pour trouver v_0 . Une fois que u est tirée, il suffit de trouver l'unique vitesse v_0 qui vérifie $F(v_0) = u$ (procédé indiqué en rouge sur la figure 3.7). v_0 est donc connue à présent.

Soit une particule incidente d'angle θ_0 . En vertu de l'équation (3.23) on a de même

$$p[\theta_0 < \theta] = F_2(\theta) = \frac{\int_0^\theta \sin(\theta') \cos(\theta') d\theta'}{\int_0^{\pi/2} \sin(\theta') \cos(\theta') d\theta'} = 1 - \cos^2(\theta) \quad (3.25)$$

F_2 est la fonction de répartition des angles incidents. De même que précédemment, on peut simuler θ_0 par $F_2^{-1}(u_2)$ où u_2 est une variable aléatoire entre 0 et 1. Or $F_2^{-1}(u_2) = \arccos(\sqrt{1 - u_2})$ car $\theta \in [0, \pi/2]$. On a donc au final pour la particule incidente

$$v_{z0} = v_0 \cos(\theta_0) = v_0 \sqrt{1 - u_2} = v_0 \sqrt{u_2} \quad (3.26)$$

Il ne reste plus qu'à déterminer les composantes v_{x0} et v_{y0} . On a

$$v_{x0}^2 + v_{y0}^2 = v_\perp^2 = v_0^2 - v_{z0}^2 \quad (3.27)$$

v_\perp est connu et la symétrie cylindrique donne alors les relations suivantes en posant $\alpha = 2\pi u_3$ avec u_3 une troisième variable aléatoire uniforme entre 0 et 1

$$v_{x0} = v_{\perp} \cos(\alpha)$$

$$v_{y0} = v_{\perp} \sin(\alpha)$$

En tout, il est donc nécessaire de faire, pour chaque particule incidente, trois tirages de variable aléatoire uniforme entre 0 et 1. Une première fois pour déterminer la norme v_0 de la vitesse avec laquelle la particule incidente est réinjectée dans le domaine de simulation. Une seconde pour déterminer la vitesse parallèle v_{z0} . Et une dernière pour déterminer α qui va départager les deux composantes perpendiculaires v_{x0} et v_{y0} .

Chapitre 4

Validation du code

Dans ce chapitre, je présente des exemples de simulations de problèmes physiques simples dont les solutions analytiques sont connues. Les similitudes et différences entre les résultats numériques et analytiques nous permettent de valider le code mais aussi d'en connaître les limites.

4.1 Equation de Poisson en symétrie sphérique

Le premier cas étudié est le cas d'une distribution statique de charge en symétrie sphérique permettant de tester la capacité du code à évaluer un champ électrique.

La configuration choisie est illustrée sur la figure 4.1. Les particules sont distribuées selon une géométrie sphérique avec une densité de charge uniforme et positive ρ_1 pour $r \in [0, R_1]$ et une densité uniforme et négative ρ_2 pour $r \in [R_1, R_2]$. On choisit $R_2 = 3R_1$. La sphère de plasma est globalement neutre, ce qui implique nécessairement $\rho_2 = -\rho_1/26$.

L'équation (4.1), appelée équation de Poisson, donne le potentiel, et donc le champ électrique, en fonction de la densité de charge

$$\Delta V = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (4.1)$$

Nous sommes donc en train de vérifier si le module "Calcul des forces" (voir figure 3.1 et chapitre 3.2) est un bon solveur de l'équation de Poisson. La résolution analytique de cette équation dans le cas simple simulé, donne un champ électrique, purement radial, de norme $E(r)$ définie par

$$\begin{aligned} E(r) &= E_{\max} \tilde{r} \text{ si } \tilde{r} \in [0, 1] \\ E(r) &= \frac{E_{\max}}{26\tilde{r}^2} (27 - \tilde{r}^3) \text{ si } \tilde{r} \in [1, 3] \end{aligned} \quad (4.2)$$

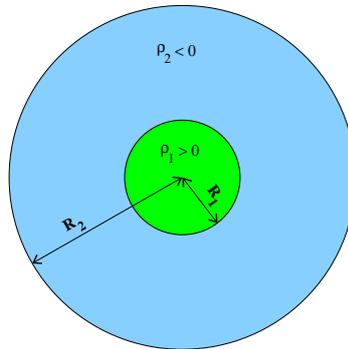


FIG. 4.1: Configuration du plasma pour le test de l'équation de Poisson.

Avec $\tilde{r} = r/R_1$ et $E_{\max} = \rho_1 R_1 / 3\epsilon_0$. La figure 4.2 illustre le champ théorique donné par les équations (4.2) ainsi que le champ donné par une simulation contenant $N = 2 \cdot 10^6$ particules. Le champ électrique, à un rayon r donné, est obtenu en faisant la moyenne des champs électriques ressentis par toutes les particules se trouvant entre les rayons $r-dr$ et $r+dr$, où dr doit être suffisamment grand pour que la moyenne soit significative. Il y a une très bonne concordance entre la simulation et la théorie. Il semble donc que le code soit un bon solveur de l'équation de Poisson.

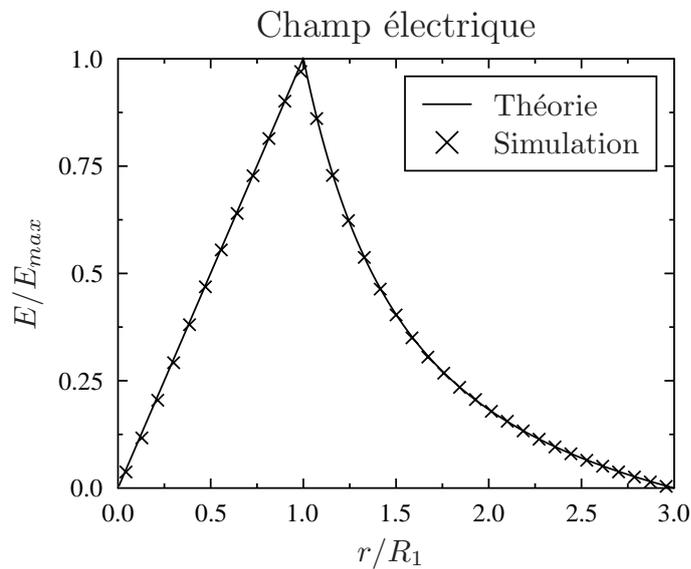


FIG. 4.2: Champ électrique dans la configuration du test de l'équation de Poisson.

4.2 Conservation de l'énergie

Il est fondamental de vérifier que le code conserve bien l'énergie. En effet, si des erreurs numériques venaient à modifier l'état énergétique du système de façon notable les simulations n'auraient plus vraiment de sens. Ce test est simple à effectuer. Il suffit de simuler un plasma calme, thermalisé, et sur lequel on n'exerce aucune perturbation, pendant un grand nombre de pas de temps.

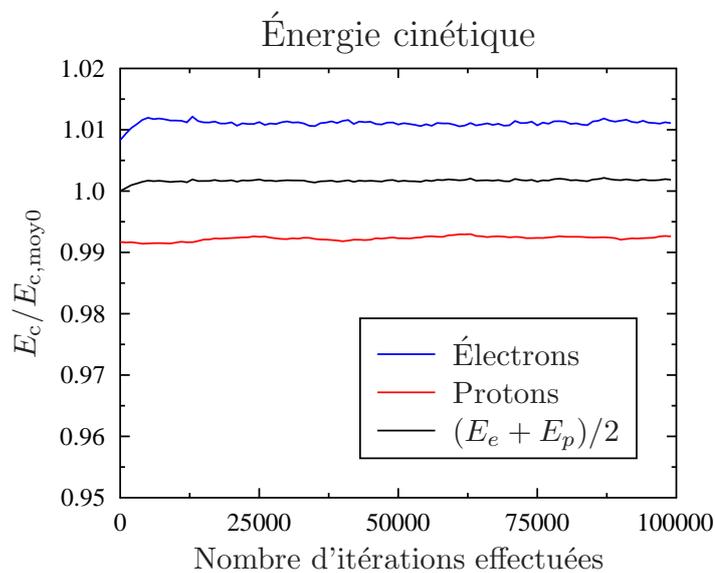


FIG. 4.3: Évolution de l'énergie cinétique totale des deux espèces du système et de leur moyenne en fonction du temps dans un plasma calme. Les énergies sont adimensionnées à la valeur initiale de l'énergie cinétique moyenne.

Ici, le nombre total de particules est $N = 30000$, dont la moitié sont des électrons et l'autre moitié des protons. Le plasma est très peu collisionnel : les paramètres sont tels que pendant la durée totale de la simulation un électron thermique parcourt seulement un quart de son libre parcours. Au final, la variation d'énergie totale est inférieure à 0.25% sur 10^5 pas de temps comme le montre la figure 4.3. Et pourtant le système n'est pas complètement inerte. La figure 4.4 montre que le système est malgré tout assez dynamique. Même si le plasma est peu collisionnel, il y a toujours des particules lentes qui subissent des déviations importantes. La différence d'énergie cinétique initiale entre les deux espèces est simplement due au nombre fini de particules dans le système. Les vitesses de chaque particules sont tirées aléatoirement en suivant la distribution

maxwellienne et il faudrait, en théorie, une infinité de particules pour que les énergies cinétiques des deux espèces soient rigoureusement identiques. D'ailleurs, on vérifie bien que la différence d'énergie entre espèce diminue quand N augmente.

La petite augmentation de l'énergie cinétique des électrons au début de la simulation est tout à fait typique. Elle est due aux conditions initiales des positions. Idéalement, l'énergie potentielle électrostatique devrait être initialement nulle dans un plasma homogène. Or pour réaliser cette condition, nous nous contentons de distribuer aléatoirement et uniformément les particules de chaque espèce sur tout le domaine de la simulation. Ce faisant, nous introduisons initialement une énergie potentielle résiduelle que les électrons récupèrent au début de la simulation, sous forme d'énergie cinétique, en reprenant une configuration dans laquelle l'énergie potentielle est nulle. Ce phénomène est donc bien compris et ne pose pas vraiment de problème car la variation d'énergie des électrons reste négligeable devant l'énergie totale. Elle est même petite devant la différence d'énergie des espèces due aux conditions initiales de vitesses.

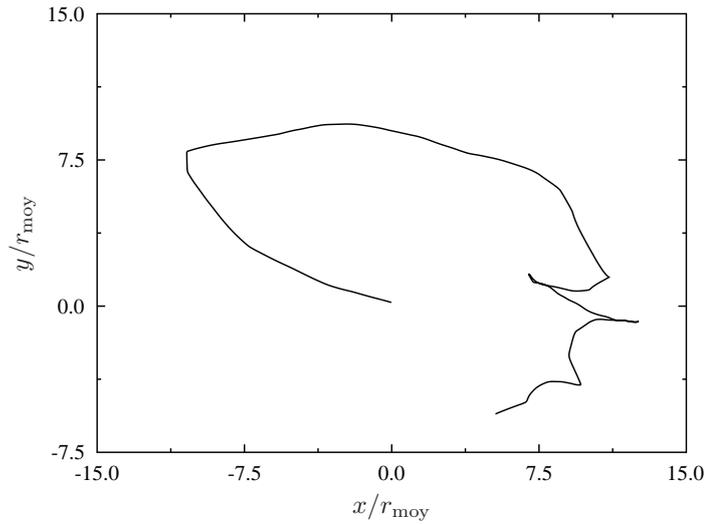


FIG. 4.4: Projection de la trajectoire d'un électron dans le plan x - y . Les axes sont normalisés à la distance moyenne entre particules r_{moy} .

4.3 Relaxation de faisceau

Dans la section 2.2, on a vu qu'un plasma laissé à lui même devait naturellement évoluer vers un état dit d'équilibre thermodynamique local. Autrement dit, que les particules du plasma prennent naturellement une distribution maxwellienne de vitesse en l'absence de potentiel électrique. Nous testons ici la capacité du code à relaxer vers le bon état d'équilibre en faisant l'expérience suivante. Le plasma est initialement homogène dans un volume cubique d'axes \mathbf{x} , \mathbf{y} , \mathbf{z} . Les conditions aux limites sont réfléchissantes sur les faces du cube et ne modifient donc pas les fonctions de distributions dans ces directions car elles ne font qu'inverser le signe de la vitesse. Les électrons sont initialement animés de vitesses opposées : V_{init} selon \mathbf{x} pour la première moitié d'entre eux et $-V_{\text{init}}$ selon \mathbf{x} pour l'autre moitié. Les vitesses initiales des protons sont similaires au facteur $\sqrt{m_e/m_p}$ près. La densité est choisie de manière à ce que le plasma soit suffi-

samment collisionnel pour relaxer rapidement. Le logarithme de Coulomb $\lambda = \ln \Lambda$, est de l'ordre de 2.5. La figure 4.5 montre la convergence de la fonction de distribution de vitesse dans la direction \mathbf{x} des électrons vers une maxwellienne en fonction du nombre de libre parcours moyen parcouru par un électron thermique. La figure 4.6 montre la même évolution dans la direction \mathbf{z} , orthogonale aux vitesses initiales des particules. A la fin de la simulation, seuls les électrons les plus rapides ne sont pas encore complètement relaxés dans les deux directions. Cela n'est pas étonnant car les particules rapides subissent beaucoup moins de collisions et mettent donc un temps très long à relaxer. On observe donc que les collisions rendent la distribution maxwellienne et isotropisent les vitesses. Au bout de seulement quelques collisions, la distribution de vitesse selon \mathbf{z} est identique à celle selon \mathbf{x} .

Dans le même temps, les protons, qui ont le même libre parcours moyen que les électrons mais qui se déplacent $\sqrt{m_e/m_p}$ fois moins vite, se relaxent donc autant de fois moins vite comme le montre la figure 4.7. Les distributions sont mesurées aux mêmes instants que sur les figures 4.5 et 4.6. Les courbes notées "Maxwellienne" dans la légende sont des maxwelliennes d'énergie égale à l'énergie de la distribution des particules dans la direction observée à l'instant du dernier pas de temps. Pour les électrons, l'isotropisation étant terminée, l'énergie est identique selon toutes les directions et les maxwelliennes sont donc identiques. Dans le cas des protons, l'isotropisation n'est pas terminée et l'énergie de la maxwellienne selon \mathbf{x} est plus élevée que celle selon \mathbf{y} . L'énergie initiale n'a pas eu le temps d'être partagée entre les trois dimensions. C'est pourquoi la maxwellienne de la figure 4.7 est plus large que sur la figure 4.5 en dépit de la normalisation.

4.4 Nuage de Debye

Nous allons maintenant vérifier si notre code est capable de reproduire la formation d'un nuage de Debye comme décrit dans la section 2.4. Ce test est d'une importance capitale car la longueur de Debye est une grandeur caractéristique fondamentale dans la plupart des phénomènes en physique des plasmas. D'après l'analyse de la section 2.4, la bonne prise en compte de la longueur de Debye est équivalente à la bonne résolution de l'équation de Poisson couplée à une distribution qui correspond bien à la distribution de Maxwell en présence d'un potentiel. Nous avons déjà vu que le code était un bon solveur de Poisson, qu'il conserve bien l'énergie et qu'il décrit bien l'évolution "collisionnelle" d'un double faisceau vers une distribution Maxwellienne. La nouveauté testée ici est donc la réaction du plasma à un potentiel électrique donné.

La configuration initiale de ce test est très simple, avec $N = 300000$ et $l_d = 5.2r_{\text{moy}}$. Nous prenons un plasma globalement neutre, très peu collisionnel, dans une sphère de rayon R_{max} et nous plaçons au centre du plasma une charge Q , faite d'une forte surdensité de protons dans une sphère de rayon $R_{\text{max}}/100$. Ensuite nous laissons évoluer

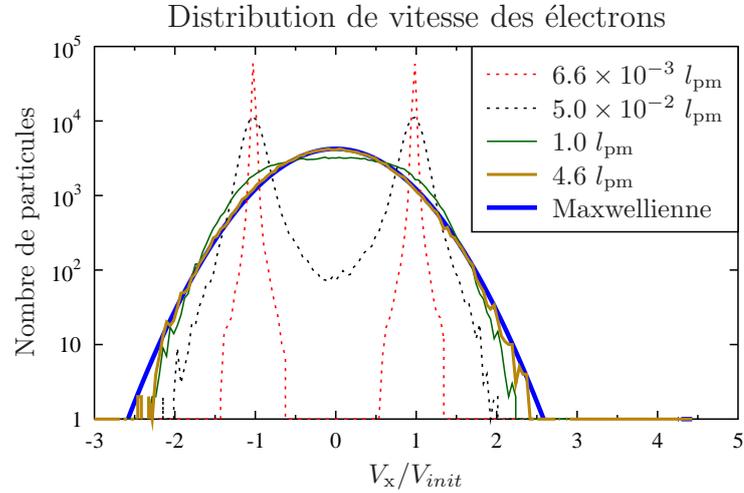


FIG. 4.5: *Relaxation de deux faisceaux d'électrons en distribution maxwellienne dans la direction du faisceau. La légende donne le nombre de libres parcourus moyens parcourus par un électron thermique à ce moment de la simulation.*

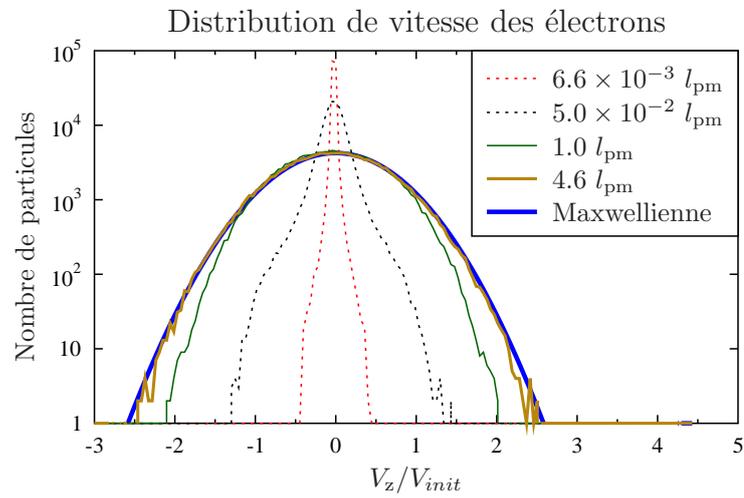


FIG. 4.6: *Relaxation de deux faisceaux d'électrons en distribution maxwellienne dans la direction orthogonale au faisceau. La légende donne le nombre de libres parcourus moyens parcourus par un électron thermique à ce moment de la simulation.*

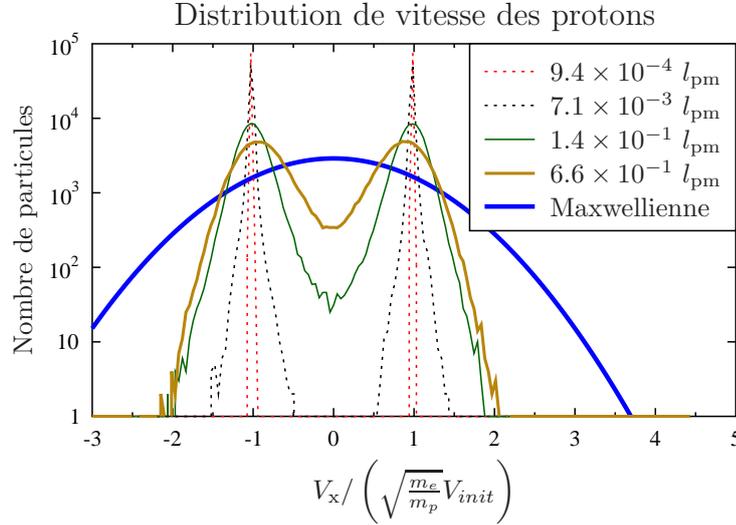


FIG. 4.7: *Relaxation de deux faisceaux de protons en distribution maxwellienne dans la direction du faisceau. La légende donne le nombre de libres parcourus moyens parcourus par un proton thermique à ce moment de la simulation.*

les électrons du système. Les protons sont fixes, conformément aux hypothèses de la section 2.4 pour le calcul théorique de l_d . Au bout d'un temps de l'ordre de la période plasma $T_p = f_p^{-1}$, le système se retrouve dans la configuration illustrée sur la figure 4.8. Pendant le temps de la simulation les électrons thermiques ont parcouru moins de 5% de leur libre parcours.

Le champ électrique théorique qui règne à l'intérieur du nuage de Debye est purement radial et sa norme E est déduite de l'équation (2.17) :

$$E(\tilde{r}) = \|\nabla\phi(\tilde{r})\| = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{l_d^2} \exp(-\tilde{r}^2) \left(\frac{1}{\tilde{r}} + \frac{1}{\tilde{r}^2} \right) \quad (4.3)$$

où $\tilde{r} = r/l_d$. La comparaison entre la norme du champ théorique donnée par l'équation (4.3) et la norme du champ dans la simulation à un instant donné est montrée sur la figure 4.9. On remarque une très bonne corrélation pour $\tilde{r} \lesssim 4.5$. Ce qui est très satisfaisant car on fait souvent l'hypothèse que le champ est négligeable au delà de $\tilde{r} = 1$. Le bruit dans la zone où $E \lesssim 10^{-1}$ est tout simplement dû au caractère intrinsèquement "discret" du plasma. En effet, on ne connaît que les grandeurs propres à chaque particule. Pour mesurer une grandeur moyenne, même localement, il est obligatoire d'utiliser une moyenne sur un certain nombre de particules. Un exemple de ce procédé est donné dans la section 4.1. La précision relative du champ moyen obtenu est donc directement

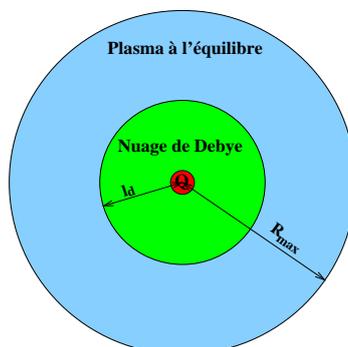


FIG. 4.8: Configuration finale de la simulation d'un nuage de Debye. Le schéma n'est pas à l'échelle.

fonction du nombre de particules sur lesquelles la moyenne est faite. Dans les zones où le champ est fort, le bruit dû à la moyenne est négligeable. Mais quand on arrive à des champs qui sont quasi-nuls, un nombre quasi infini de particules est requis pour avoir la précision nécessaire. Il se passe d'ailleurs la même chose dans un "vrai" plasma : le champ moyen local à un instant donné ne peut pas être tout à fait nul du fait de sa nature discrète. Le lissage des forces a tendance à réduire ce bruit car il rend les particules moins discrètes en les considérant comme de petites distributions de charge. Cela dit, un lissage exagéré donnerait des moyennes beaucoup plus propres mais conduirait à un comportement global du plasma erroné car le champ électrique serait sous évalué et notamment dans les zones de champ fort.

4.5 Oscillation à la fréquence plasma

De manière très générale, lorsqu'un plasma à l'équilibre subit une petite perturbation, il réagit en oscillant autour de sa position d'équilibre. L'amplitude de l'oscillation dépend de la perturbation mais on peut montrer que sa fréquence n'est fonction que de la densité du plasma. Cette fréquence est appelée fréquence plasma et est notée f_p .

Voici une manière simple de s'en faire une idée. Supposons que dans un plasma où $n_e = n_p = n$ en tout point, on déplace tous les électrons de x comme illustré sur la figure 4.10. On suppose le plasma infini dans les directions orthogonales à x . Le déplacement des électrons va créer des charges surfaciques σ et $-\sigma$ aux bords. Pour un élément de surface dS , la charge dq accumulée vaut $dq = enxdS$, avec e la charge élémentaire d'un proton. dq est tout simplement le nombre de particules contenues dans le cylindre de hauteur x et de base dS . La charge surfacique qui en découle est donc $\sigma = dQ/dS = enx$. On est dans un cas similaire à un condensateur dont les plaques auraient les charges $\pm\sigma$. Les particules baignent donc dans un champ électrique uniforme dirigé vers x et qui vaut

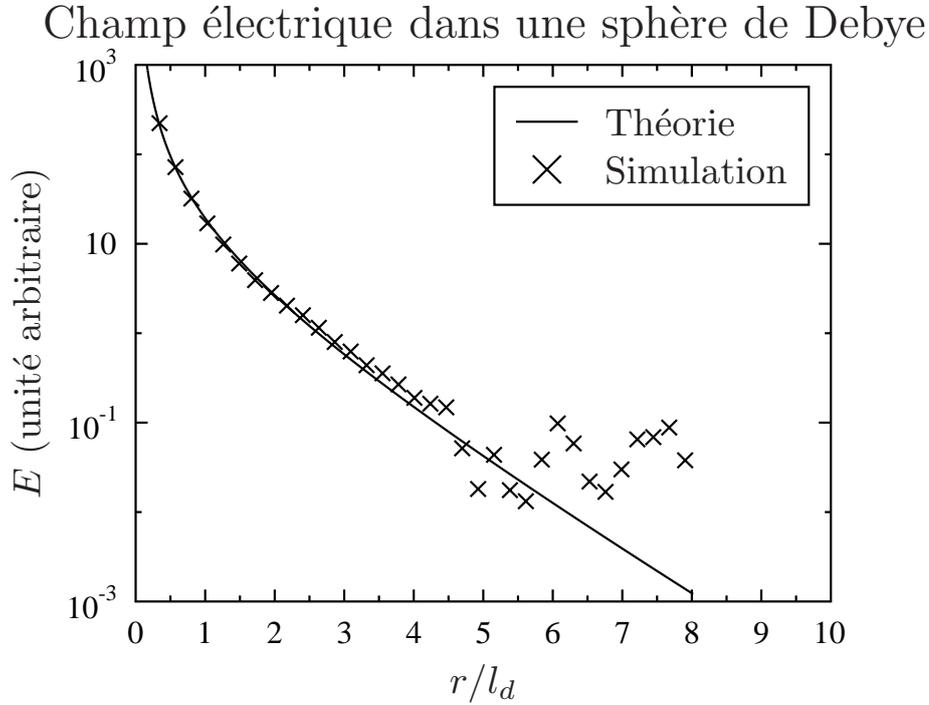


FIG. 4.9: Norme du champ électrique dans un nuage de Debye.

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{nex}{\epsilon_0} \quad (4.4)$$

Les électrons subissent donc tous la même force et l'équation de leur mouvement s'écrit

$$m_e \ddot{x} = -\frac{ne^2 x}{\epsilon_0} \quad (4.5)$$

C'est l'équation d'un oscillateur harmonique dont la solution est une oscillation de fréquence

$$f_p = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{ne^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{1/2} \quad (4.6)$$

Le déplacement x de l'ensemble des électrons ainsi que l'intensité du champ E vont donc osciller autour de leur position d'équilibre à la fréquence plasma.

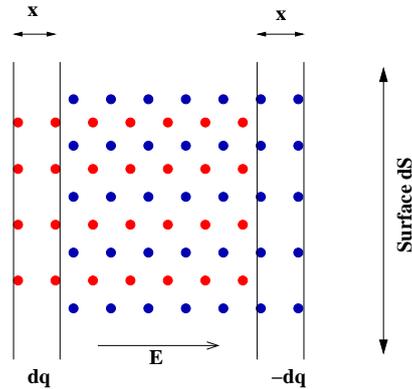


FIG. 4.10: Illustration des positions initiales. Les électrons sont en bleus et les protons en rouge.

Lorsque cette expérience est simulée avec notre code N -corps, le plasma est initialement ordonné comme sur la figure 4.10. Dans la direction x , on a 10 particules d'une même espèce et 100 dans les directions y et z , soit $N = 200000$. Pour simplifier, le plasma est initialement froid, donc les vitesses initiales des particules sont nulles. On peut faire la moyenne du champ ressenti par toutes les particules pour mesurer le champ global car il est censé être uniforme. La figure 4.11 montre l'évolution de ce champ au cours du temps. E_0 est la valeur initiale du champ électrique. L'oscillation se fait parfaitement à la fréquence plasma mais, en revanche, l'amplitude de l'oscillation est amortie, contrairement à ce que donne l'équation (4.5). Cela est tout simplement dû au fait que l'hypothèse d'un plasma infini dans la direction orthogonale à x n'est pas parfaite pour notre simulation d'extension finie. Le champ électrique n'est donc pas parfaitement homogène et se trouve amorti car les électrons transforment une partie de l'énergie potentielle initiale en agitation thermique.

4.6 Plasma dans un champ de pesanteur homogène

Dans la section 4.4, nous avons testé le bon comportement du code lorsque le plasma est soumis à un potentiel électrique à symétrie sphérique. Nous allons tester ici sa réaction à un champ de pesanteur uniforme. Nous nous plaçons en symétrie cylindrique d'axe z . Initialement le plasma est thermalisé à la température T .

On suppose que la présence du champ \mathbf{g} induit un potentiel électrique $\phi(z)$. L'énergie potentielle d'une particule est donc $E_p = mgz + q\phi(z)$, où q est la charge de la particule. Les fonctions de distribution des électrons (indiqués e) et des ions (indiqués i) à l'équilibre s'écrivent alors comme suit en vertu de l'équation (2.3)

Champ électrique moyen

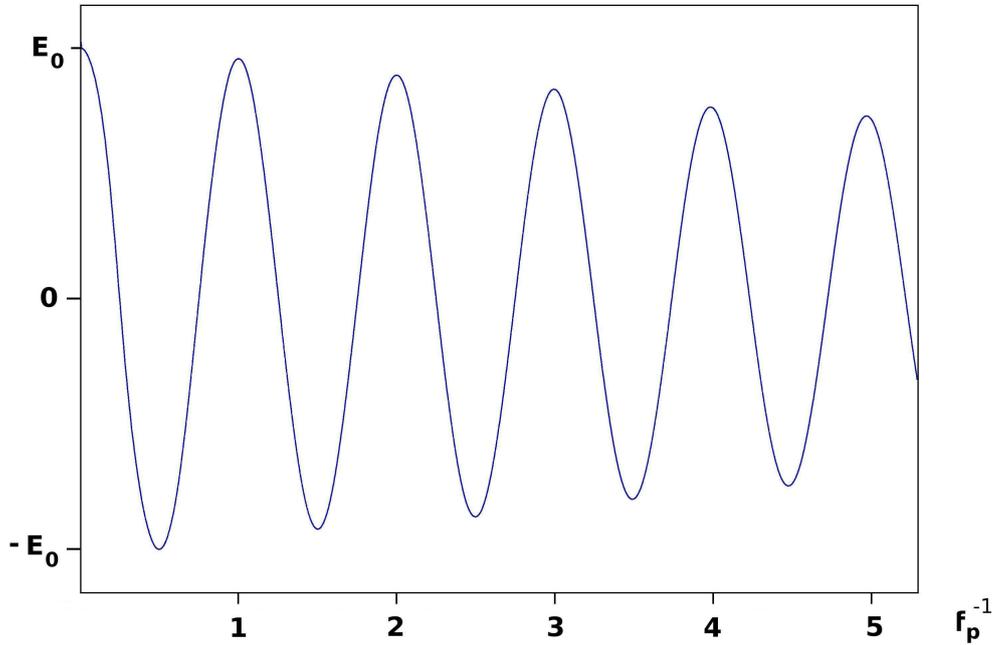


FIG. 4.11: Champ électrique moyen ressenti par les particules au cours du temps

$$f_{e,i}(z, \mathbf{v}) = A_{e,i} \exp \left(- \frac{\frac{m_{e,i} v^2}{2} + m_{e,i} g z + q_{e,i} \phi(z)}{kT} \right) \quad (4.7)$$

où les A sont des constantes. On en déduit les densités

$$n_{e,i}(z) = \int f_{e,i}(z, \mathbf{v}) d^3v = A_{e,i} \left(\frac{2\pi k_B T}{m_{e,i}} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_{e,i} g z + q_{e,i} \phi(z)}{kT} \right) \quad (4.8)$$

Le potentiel créé ϕ tend à conserver la neutralité locale $n_e(z) = n_i(z)$. En écrivant cette égalité et en utilisant les expressions de l'équation (4.8) on obtient

$$e\phi(z) = \phi_0 - \frac{k_B T}{2} \frac{H_e - H_i}{H_i H_e} z \quad (4.9)$$

Avec $H_{e,i} = k_B T / m_{e,i} g$. Le potentiel est défini à une constante près et l'on peut donc poser $\phi_0 = 0$. En faisant de plus l'hypothèse $m_i \gg m_e$, l'équation (4.9) se simplifie en

$$\phi(z) = -\frac{m_i g z}{2e} \quad (4.10)$$

On en déduit le champ électrique, les fonctions de distribution et les profils axiaux de densité

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(z) &= \frac{m_i g}{2e} \mathbf{e}_z \\ f_{e,i}(z, \mathbf{v}) &= n_0 \left(\frac{m_{e,i}}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_{e,i} v^2 + m_i g z}{2kT} \right) \\ n(z) &= n_0 \exp\left(-\frac{z}{H} \right) \end{aligned}$$

avec $H = 2k_B T / m_i g$ et n_0 est la densité en $z = 0$. Le champ électrique est uniforme et dirigé dans le sens inverse du champ de pesanteur. Il s'oppose donc à la chute des protons, qui, du fait de leur forte masse, sont naturellement entraînés sous les électrons. Il porte généralement le nom de champ de Pannekoek-Rosseland [23].

Dans la simulation, le champ de pesanteur est tout simplement généré par l'ajout systématique à l'accélération de toutes les particules d'un terme de la forme $-\mathbf{g}\mathbf{e}_z$ au moment de l'avancement des particules. Initialement le plasma est homogène et situé dans un cylindre de rayon H et de hauteur $6H$. Les vitesses ont une distribution maxwellienne. Le plasma est très peu collisionnel et contient $N = 50000$ particules. Pendant la simulation les conditions aux limites sont réfléchissantes sur les parois du cylindre initial. Le profil axial de densité obtenu après un temps suffisamment long est donné sur la figure 4.12. La corrélation est très bonne dans la grande majorité du domaine. Dans la zone de faible densité, la corrélation est moins bonne car, le plasma restant isotherme, la longueur de Debye augmente fortement dans ces zones. Près du bord "haut" du cylindre, la longueur de Debye est donc très grande et les particules sont affectées par le vide "au dessus" de la paroi supérieure. Par conséquent, le plasma n'est plus à l'équilibre dans cette région. Le champ électrique et le profil de densité se trouvent modifiés et la neutralité locale n'est plus respectée.

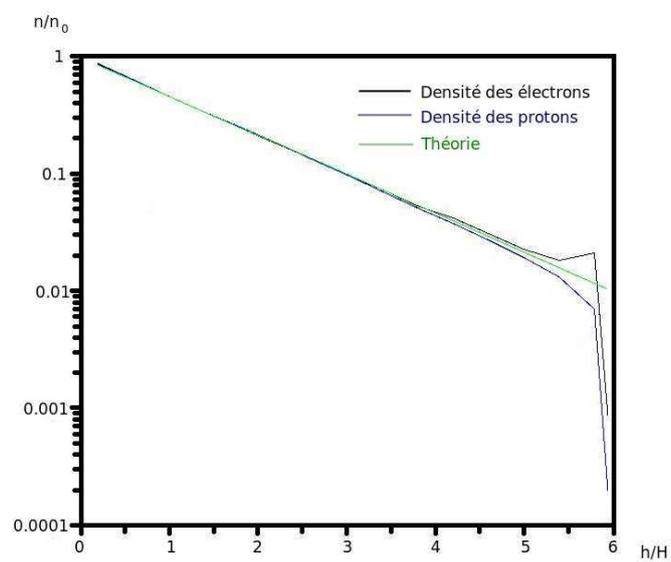


FIG. 4.12: Profils axiaux de densité des protons et des électrons comparés au profil théorique

Chapitre 5

Simulations N-Corps

Dans ce chapitre, nous allons présenter trois applications du code de simulation N-Corps. Elles ont chacune donné matière à un article que le lecteur pourra trouver dans l'annexe D et montrent bien les différents intérêts que le scientifique peut trouver dans les simulations numériques. Comme nous allons le voir, elles peuvent servir à la fois d'outil d'illustration, de mesure et d'inspiration pour le chercheur.

5.1 Trajectoire d'un électron dans un plasma

La simulation présentée dans cette section correspond à l'article de l'annexe D.1. Elle a pour objectif d'illustrer les propos de la section 2.5 concernant les trajectoires des électrons dans les plasmas. Ces trajectoires sont souvent illustrées dans les ouvrages par de simples schémas faits à la main de la trajectoire supposée. Grâce à une simulation de type N-Corps, nous pouvons suivre le détail de la trajectoire de chaque particule et donc les tracer avec une grande précision.

Pour cela nous effectuons la simulation suivante. Le système est composé de $N = 2 \times 10^6$ particules ($N/2$ protons et $N/2$ électrons) qui se trouvent dans un volume cubique dont les faces sont des conditions aux limites réfléchissantes. La distribution de vitesse initiale est une maxwellienne de température T . Les paramètres du plasma de la simulation sont donnés dans le tableau 5.1.

La figure 5.1, publiée dans [15; 2], montre la trajectoire d'un électron qui possède

Γ	λ	$r_{\pi/2}/r_{\text{moy}}$	l_d/r_{moy}	$l_{\text{pm}}/r_{\text{moy}}$
$2 \cdot 10^{-2}$	5.9	$6.7 \cdot 10^{-3}$	2.0	152

TAB. 5.1: Paramètres utilisés dans la simulation, pour un plasma faiblement couplé.

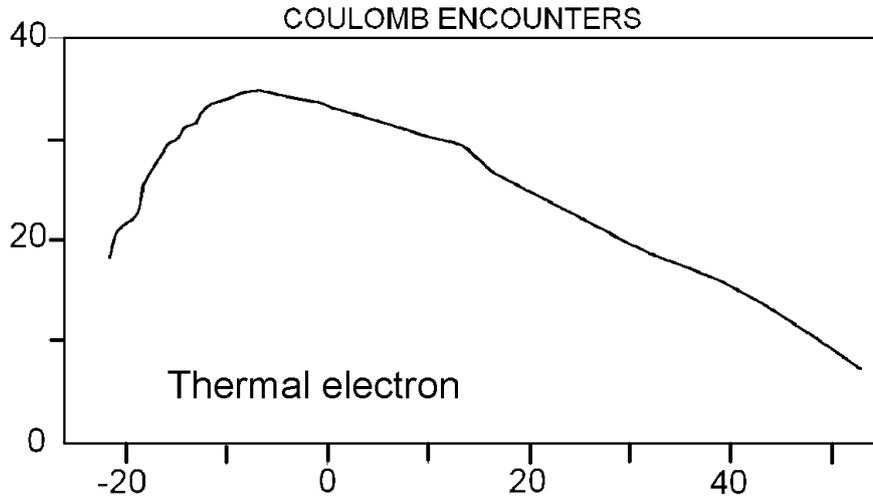


FIG. 5.1: Trajectoire d'un électron thermique dans un plasma avec $\Gamma = 0.02$. La figure est une projection de la trajectoire tridimensionnelle. Les libellés des axes sont exprimés en nombre de distance moyenne entre particules.

une vitesse proche de la vitesse thermique. La figure est une projection dans le plan (x, y) de la trajectoire tridimensionnelle de l'électron sur une période pendant laquelle il ne rencontre pas de surface réfléchissante. Le libre parcours projeté de la particule considérée, mesuré sur la figure, est inférieur d'un facteur proche de 2 de la véritable valeur qui sera mesurée en trois dimensions. La figure 5.1 suggère donc un libre parcours $\simeq 100r_{\text{moy}}$ qui est bien du même ordre que le libre parcours moyen donné par l'équation (2.26) qui vaut $152r_{\text{moy}}$ avec des paramètres du plasma identiques.

Une des propriétés fondamentales du libre parcours est sa dépendance à l'énergie. L'équation (2.19) donne le rayon de forte interaction pour un électron possédant la vitesse thermique v_{th} . Plus généralement, pour un électron de vitesse v , le rayon de forte interaction doit être multiplié par $(v_{\text{th}}/v)^2$, et la section efficace par $(v_{\text{th}}/v)^4$ [28]. Cela implique que son libre parcours est inférieur au libre parcours moyen d'un facteur $(v/v_{\text{th}})^4$. Ainsi, un électron se déplaçant seulement trois fois moins vite ou plus vite qu'un électron thermique a un libre parcours qui diffère du libre parcours moyen de deux ordres de grandeur. Cette différence est illustrée sur les figures 5.2 et 5.3 qui montrent des trajectoires d'électrons ayant des vitesses respectives de 0.6 et 2.3 fois la vitesse thermique.

Sur la figure 5.2, la vitesse $v \simeq 0.6v_{\text{th}}$ est une moyenne sur la durée de la simulation. En fait, la particule est si lente qu'elle subit un très grand nombre de collisions, dont des collisions électron-électron qui modifient notablement sa vitesse. En réalité, sa vitesse varie entre $0.3v_{\text{th}}$ et $0.9v_{\text{th}}$ ce qui implique une variation de son libre parcours entre 1.23 et $100 r_{\text{moy}}$. Les intervalles de temps pendant lesquels sa vitesse est minimum sont facilement identifiables, ce sont les zones où la fréquence de collision semble plus élevée

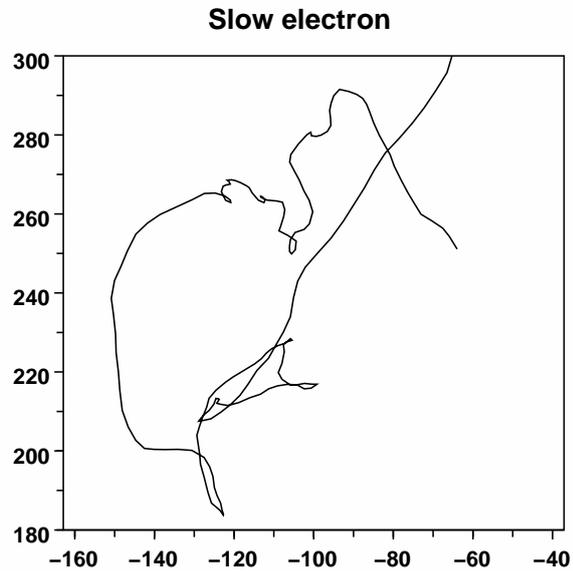


FIG. 5.2: Trajectoire d'un électron lent ($v \simeq 0.6v_{\text{th}}$) dans un plasma avec $\Gamma = 0.02$. La figure est une projection de la trajectoire tridimensionnelle. Les libellés des axes sont exprimés en nombre de distance moyenne entre particules.

qu'ailleurs. Sur la figure 5.3, l'analyse est beaucoup plus simple. Son libre parcours est de l'ordre de $4.2 \times 10^3 r_{\text{moy}}$ et l'électron subit si peu de collisions que sa trajectoire est quasiment rectiligne uniforme.

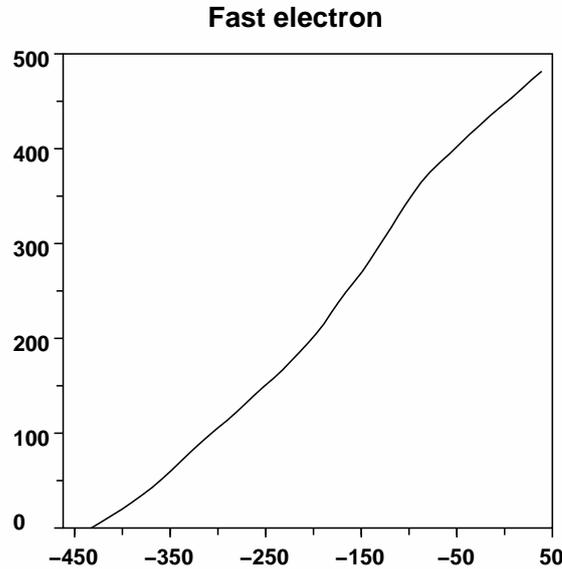


FIG. 5.3: Trajectoire d'un électron rapide ($v \approx 2.3v_{th}$) dans un plasma avec $\Gamma = 0.02$. La figure est une projection de la trajectoire tridimensionnelle. Les libellés des axes sont exprimés en nombre de distance moyenne entre particules.

5.2 Flux de chaleur dans un plasma couplé

Ici nous présentons les grandes lignes de l'article de l'annexe D.2.

5.2.1 Présentation du problème

Nous avons vu dans la section 2.5 que les plasmas spatiaux sont, en grande majorité, des plasmas faiblement couplés. Pour préciser ce qui y avait été dit, ces plasmas sont définis comme ayant un logarithme de Coulomb $\ln \Lambda$ supérieur à 10. Cela est équivalent à dire que leur paramètre de couplage Γ est inférieur à 10^{-3} ou que leur nombre de particules par sphère de Debye est supérieur à $2 \cdot 10^3$. Dans ce cas, les collisions distantes sont très largement dominantes (Cf section 2.5). Or, la quasi totalité des théories de transports existantes sont basées sur cette hypothèse. En effet, si le plasma n'est pas faiblement couplé, les collisions proches deviennent non négligeables et la trajectoire des particules dans l'espace des phases n'est plus continue car elles peuvent changer de vitesse très brusquement. Cela ne peut pas être décrit par des modèles courants, basés sur des moments d'ordre peu élevés de la fonction de distribution (Fokker-Planck).

Pourtant, même si ces plasmas ne sont pas majoritaires dans l'univers, ils ont des applications intéressantes comme, par exemple, la zone convective du soleil ou les plasmas générés par laser (voir figure 1.1).

La simulation N -corps, est capable de prendre en compte les collisions proches et donc de mesurer leurs influences sur les propriétés des plasmas. La simulation présentée ici a pour but de mesurer l'impact de ce type de collision sur le transport de chaleur au sein d'un plasma modérément couplé.

5.2.2 Les paramètres physiques

Il n'y a que deux paramètres physiques qui déterminent le flux de chaleur. Le premier est le logarithme de Coulomb décrit dans la section 2.5. C'est lui qui détermine le couplage du plasma. Nous souhaitons un plasma modérément couplé, et donc, un logarithme de Coulomb inférieur à 10. Dans toutes les simulations que nous avons effectuées, ce paramètre est invariant et vaut $\lambda = 3.8$.

Le deuxième paramètre fondamentale est le nombre de Knudsen K_α qui est défini comme suit pour l'espèce α

$$K_\alpha = \frac{l_\alpha}{L_T} \quad (5.1)$$

où l_α est le libre parcours moyen de l'espèce α et L_T est l'échelle typique de variation de la température T qui vaut $L_T = T/\|\nabla T\|$. K_α est donc une mesure de la fréquence des collisions dans un gradient de température. Si K_α est petit, l'espèce α subit de nombreuses collisions avant que la température ne change. Dans le cas inverse, les particules font peu de collisions quand la température change significativement.

Enfin le flux de chaleur est tout simplement le transport d'énergie cinétique dans le plasma. On le mesure comme le troisième moment de la fonction de distribution et il vaut

$$\mathbf{q}_\alpha = \int \frac{1}{2} m_\alpha \|\mathbf{v}\|^2 \mathbf{v} f_\alpha(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (5.2)$$

Pour calculer sa norme, on utilise généralement le coefficient de transport de Spitzer et Härm [27] qui donne l'approximation du flux suivante :

$$q_{\alpha, \text{Spitzer}} = 2.26 q_{\alpha,0} K_\alpha \quad (5.3)$$

$$q_{\alpha,0} = \frac{n_\alpha (k_B T)^{3/2}}{m_\alpha^{1/2}} \quad (5.4)$$

où $q_{\alpha,0}$ est appelé le flux d'écoulement libre. Cette valeur canonique est théoriquement valable quand le plasma est faiblement couplé et pour un nombre de Knudsen petit

devant 1. Il a été montré en effet que lorsque $K_\alpha \gtrsim 2 \cdot 10^{-3}$, le flux de chaleur atteint une valeur limite qui vaut environ $0.1q_0$ [26; 13]. Dans un plasma thermalisé, les flux de chaleur portés par chacune des espèces diffèrent d'un facteur égal à la racine carré du rapport des masses. Dans notre plasma d'électrons et d'ions, ce sont donc les premiers qui transportent l'essentiel de l'énergie cinétique.

5.2.3 Paramètres de la simulation

Pour simuler un flux de chaleur, le plasma est soumis à un gradient de température. Pour cela, il est placé dans un cylindre dont la surface est de type "réfléchissante". Le fond et le sommet du cylindre sont des thermostats (voir section 3.3.3) de températures respectives T_1 et T_2 comme indiqué sur la figure 5.4.

Les températures sont choisies pour vérifier

$$\frac{T_2 - T_1}{T_1} \ll 1 \quad (5.5)$$

Ainsi, L_T et K_e peuvent être supposés indépendants de z . La hauteur du cylindre L est typiquement d'une centaine de longueur de Debye. Le plus important étant qu'elle soit supérieure au libre parcours moyen des particules car, dans le cas contraire, le flux de chaleur est artificiellement déterminé par les conditions aux limites de la simulation et non plus par le gradient de température. A condition d'être choisi suffisamment grand, le rayon du cylindre n'influe pas sur le résultat. Il suffit donc de le prendre supérieur à une longueur de Debye pour s'assurer qu'aucun champ électrique transverse ne se développe.

5.2.4 Résultats

Plusieurs simulations sont effectuées en conservant toujours le même logarithme de Coulomb mais en changeant le nombre de Knudsen. On mesure alors les flux de chaleur indiqués sur la figure 5.5. Un ajustement linéaire de ces données montre que le flux de chaleur dans un plasma couplé avec un logarithme de Coulomb de 3.8 peut être modélisé par

$$q_{e,\lambda=3.8} = 1.68 q_{\alpha,0} K_\alpha \quad (5.6)$$

On trouve un flux qui est donc à peu près 75% du flux donné par Spitzer et Härm. Le fait d'obtenir un flux plus petit est en accord avec les travaux de Li et Petrasso [12]. Ces auteurs, en considérant une correction d'ordre λ^{-1} de l'opérateur de collision de Fokker-Planck, trouvent effectivement une réduction du flux de chaleur. Mais leur correction est seulement d'ordre $(6\lambda)^{-1}$ et donc bien moindre que ce que l'on observe dans nos simulations. Nous supposons que pour trouver un terme correctif satisfaisant il faudrait

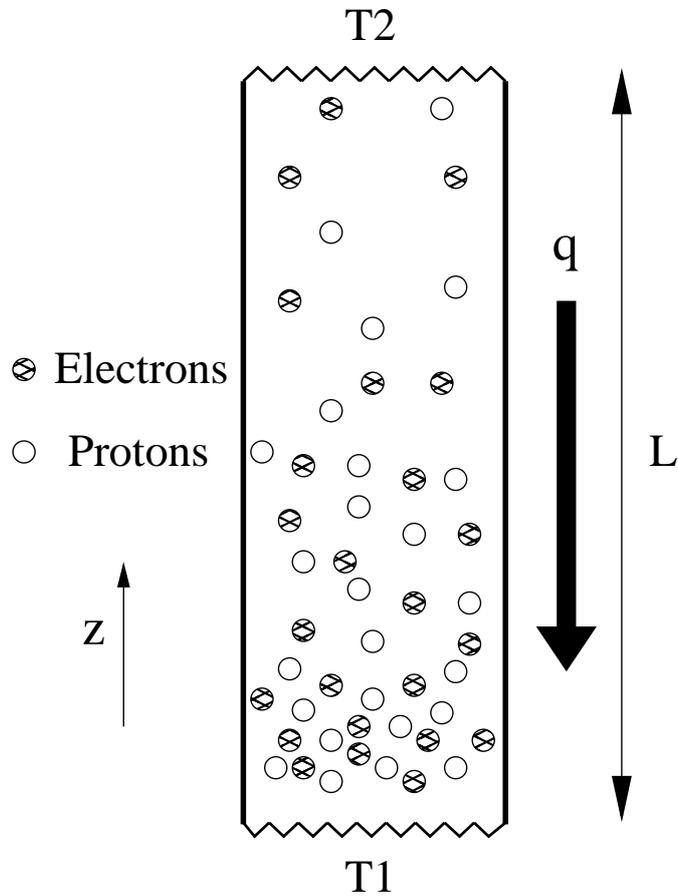


FIG. 5.4: Schéma de la simulation d'un flux de chaleur. Les particules évoluent dans un cylindre entre deux thermostats. Comme $T_2 > T_1$, le flux de chaleur \mathbf{q} s'exerce dans la direction $-\mathbf{z}$. L'équilibre des pressions implique que la densité soit plus grande dans la zone plus froide du cylindre et inversement.

prendre en compte des moments de la fonction de distribution de vitesse plus élevés que ceux qu'ils considèrent.

5.3 Expansion d'un plasma dans le vide

Dans cette section, nous traitons le problème de l'expansion d'un plasma dans le vide qui a motivé l'article de l'annexe D.3. Pour ce travail, les résultats des simulations ont servi de base à l'élaboration d'un modèle décrivant l'évolution du plasma au cours du temps. Notre modèle est basé sur des hypothèses qui semblent acceptables aux vues des simulations. Comme nous le verrons a posteriori, les simulations sont également

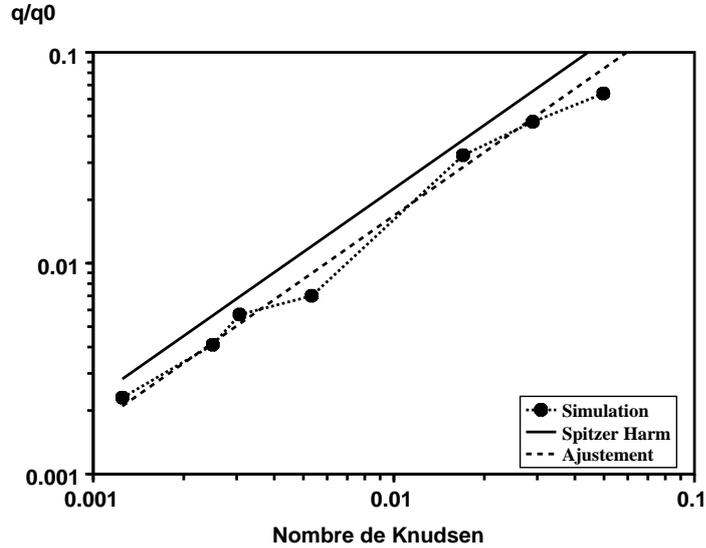


FIG. 5.5: Flux de chaleur électronique mesuré dans 7 configurations différentes en fonction du nombre de Knudsen. Les flux sont adimensionnés au flux d'écoulement libre $q_{e,0}$ défini dans l'équation. La ligne en pointillé est un ajustement linéaire des flux mesurés dans les simulations. (5.4).

un bon moyen de voir quelles sont les hypothèses du modèle qui mériteraient d'être raffinées.

5.3.1 Présentation du problème

La problématique générale de l'expansion d'un plasma dans le vide joue un rôle considérable dans des domaines très variés allant de l'astrophysique [20; 3] au plasma laser. Une bibliographie très détaillée a été faite sur le sujet en 1987 par Sack et Schamel [24] et, plus récemment, dans l'introduction du papier de Peano et al. en 2007 [18]. Le cas auquel nous allons nous intéresser est celui de l'expansion d'un plasma sans collision résultant de l'ionisation totale d'un petit agrégat sphérique d'atomes (typiquement au nombre de 10^3 à 10^7 dans l'agrégat initial) par une impulsion laser de très courte durée (de l'ordre de la femtoseconde) [7; 18].

Dans une telle expérience, l'interaction laser-matière est assez complexe mais il en ressort que les électrons se trouvent chauffés à des énergies de l'ordre du keV, les ions restant froids. Une partie de ces électrons quittent donc l'agrégat et laissent derrière eux un amas de protons qui vont être progressivement accélérés par la force mutuelle de répulsion qu'ils exercent les uns sur les autres. Les ions peuvent ainsi être accélérés

jusqu'à des énergies permettant des réactions de fusion entre des ions provenant d'autres agrégats irradiés de la même manière [7].

Il apparaît donc deux régions distinctes : la région interne composée de la sphère d'ions en expansion et des électrons qu'elle contient, et la région externe, le nuage d'électron qui englobe la région interne, également en expansion [16; 17; 18]. La formation initiale de ces deux zones est difficile à modéliser et nécessite un traitement numérique. Le code N-Corps est particulièrement adapté à ce problème car le traitement de l'interface plasma-vide ne pose pas de difficultés contrairement à d'autres types de code qui sont obligés d'utiliser des artifices pour le gérer. Une fois que le rayon du plasma en expansion est devenu très supérieur à son rayon initial, on s'attend à un comportement auto-similaire du plasma. C'est à dire que le système gardera toujours la même forme et qu'ils ne différera entre deux instants que par un facteur d'échelle. Avec cette hypothèse, il devient possible de décrire l'évolution du système avec des équations fluides.

Dans cette section, nous présentons donc un modèle auto-similaire qui décrit l'état asymptotique du système et nous le comparons avec des résultats de simulations numériques effectuées à l'aide du code N-Corps. La description reste très qualitative. Pour plus de détails le lecteur peut se référer à l'article correspondant joint en annexe.

5.3.2 Le modèle auto-similaire à deux fluides

Notre modèle auto-similaire à symétrie sphérique utilise les conditions initiales généralement admises, c'est à dire, que les électrons sont chauds et les protons immobiles. Il se distingue du travail de précédents auteurs, notamment Murakami et Basko [17], par le fait que le plasma n'est pas considéré comme isotherme. Cela est d'ailleurs confirmé dans les simulations de la section 5.3.3.

Hypothèses

Présentons pour commencer les hypothèses de départ de notre modèle. Le plasma est uniquement composé d'ions et d'électrons de charges $q_i = q_e = 1$ et de masses $m_i \gg m_e$. Les ions sont supposés froids et les électrons chauds.

On suppose qu'il n'y a pas de collision au sein du plasma. Pour cela il suffit que les électrons soient suffisamment chauds et le plasma suffisamment ténu.

Le système d'équations fluides est fermé par une équation d'état polytropique pour les électrons qui relie directement leur densité et leur température et qui dépend, d'un indice polytropique γ . A noter que la température des électrons est donc supposée isotrope.

L'écoulement est supposé être à symétrie sphérique et sans cisaillement. D'après [9], cela implique que la vitesse fluide $v_j (j = i, e)$ doit être de la forme $v_j = rH_j(t)$ où r est la distance au centre d'expansion et $H_j(t)$ une fonction arbitraire du temps. Cette hypothèse est très restrictive mais elle reste pertinente dans la mesure où l'on

s'intéresse au comportement asymptotique du plasma quand toute activité a été amortie par les interactions ondes-particules.

Enfin, l'hypothèse d'auto-similarité qui revient à considérer que toutes les grandeurs ne dépendent que de la variable $\xi = r/R(t)$ où r est le rayon et $R(t)$ est une fonction du temps qui est notre facteur d'échelle que l'on choisira comme étant le rayon de la sphère d'ions en expansion. C'est à dire que le front d'ions sera toujours situé en $\xi = 1$, la région interne est en $\xi < 1$ et la région externe en $\xi > 1$. Il se trouve que pour que cette hypothèse soit réalisable conjointement à l'hypothèse d'absence de cisaillement, l'indice polytropique des électrons γ doit être égal à $4/3$. C'est à dire que la pression électronique p_e et la densité électronique n_e sont reliées par la relation $p_e \propto n_e^{4/3}$.

Paramètres clefs

Suite à ces hypothèses, il ressort que notre modèle ne dépend plus que de deux paramètres.

Le premier est

$$\Lambda^2 \equiv \left[\frac{l_{d1}}{R} \right]^2 \quad (5.7)$$

où l_{d1} est la longueur de Debye des électrons au niveau du front d'ions. En raison de l'autosimilarité, ce rapport est constant au cours du temps. C'est ce paramètre qui va déterminer le type d'écoulement. Si Λ^2 est petit (i.e. $\Lambda^2 \ll 1$), les écarts à la neutralité locale seront très faibles et les électrons ne s'arracheront que difficilement au potentiel attracteur central. Λ^2 étant fonction de la température, on peut appeler ce cas "froid". Au contraire, dans le cas "chaud" ($\Lambda^2 \gtrsim 1$), les électrons sont suffisamment énergétiques pour quitter en masse la région interne et celle ci se trouvera donc fortement chargée.

Les électrons qui quittent la région interne ont deux comportements possibles. Soit ils sont suffisamment énergétiques pour s'arracher totalement à l'attraction de la charge centrale et partent à l'infini, soit ils restent attachés au système et orbitent autour de la région interne. Des trajectoires typiques pour chacun de ces deux cas ont été mises en évidence sur la figure 5.8.

Le second paramètre clef du modèle est le paramètre qui détermine le nombre d'électrons qui se sont complètement séparés du système. Autrement dit, il s'agit de la charge totale du plasma Q . En effet, si le plasma est initialement globalement neutre, chaque électron partant à l'infini contribuera à charger le plasma positivement. Lorsque Q est maximum, c'est à dire quand tous les électrons sont suffisamment énergétiques pour partir à l'infini, s'appelle une "explosion de Coulomb". Dans ce cas, il ne reste plus qu'une sphère de protons dans le système. En pratique, le paramètre Q influe principalement sur l'écart K entre le front d'ions et le front d'électrons (voir figure 5.6). Plus le plasma est globalement chargé, plus ces deux fronts sont proches. A noter que même si la charge globale est nulle, la région externe a une extension finie contrairement au

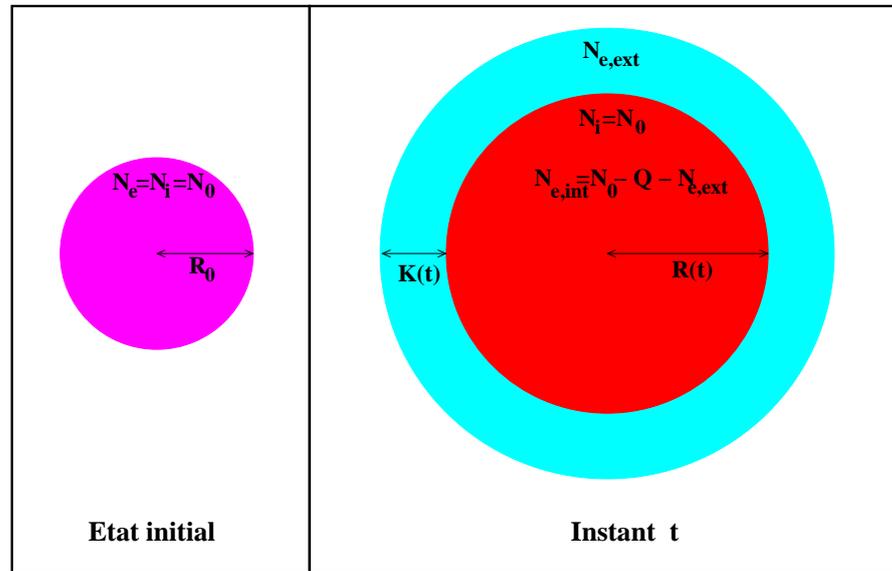


FIG. 5.6: Schéma du système au cours du temps. L'état initial de la simulation est représenté à gauche. Le plasma est dans une sphère de rayon R_0 et est globalement neutre (en magenta). A droite, le système tel qu'il est décrit au cours du temps par notre modèle auto-similaire. La région interne (en rouge) contient tous les ions de départ ainsi que les électrons internes $N_{e,int}$. Ces derniers sont en fait bien moins nombreux que les protons car ils sont privés de ceux qui sont dans la zone externe (en cyan) $N_{e,ext}$ et de ceux qui sont partis à l'infini.

modèle de Murakami et Basko [17], dans lequel les électrons sont distribués jusqu'à l'infini.

5.3.3 Simulations numériques

Intéressons nous maintenant aux simulations N-Corps qui ont été effectuées à partir de conditions initiales réalistes. Après une phase initiale de relaxation on s'attend à ce que le système adopte une forme auto-similaire proche de celle décrite dans la section 5.3.2.

Conditions initiales et paramètres du plasma

A $t = 0$, les ions et les électrons sont distribués uniformément dans une sphère de rayon R_0 comme sur la figure 5.6. Les ions sont immobiles et les électrons ont une distribution de vitesse maxwellienne de température T_0 .

Les températures et densités initiales sont choisies pour que l'expansion soit un cas tiède ($\Lambda = O(0.1)$). Ainsi, on observe une séparation de charge notable mais il

reste quand même un nombre important d'électrons dans le système, contrairement au cas froid où la séparation de charge est négligeable et au cas chaud correspondant à l'explosion de Coulomb (dans lequel tous les électrons s'échappent pendant la phase initiale).

Le rayon de forte interaction $r_{\pi/2}$, est choisi petit devant la distance moyenne entre les particules pour s'assurer que le plasma est bel et bien sans collision et qu'il peut être traité dans le cadre de notre modèle.

Profils de densité et expansion de la sphère d'ions

La figure 5.7 montre que le profil de densité ionique simulé est plutôt bien décrit par notre modèle en choisissant $\Lambda^2 = 0.02$ et un plasma globalement neutre (soit $Q = 0$). En revanche, la densité électronique prédite par le modèle est significativement plus élevée que celle donnée par la simulation en tous points de la sphère d'ions. Une bien meilleure concordance est obtenue à la fois pour les ions et les électrons en supposant que le plasma est globalement chargé comme le montre la partie droite de la figure 5.7, où le nombre d'électrons est seulement $2/3$ du nombre d'ions dans le système et $\Lambda^2 = 0.08$.

En revanche, on remarque un aplatissement du profil de densité électronique dans la simulation pour $\xi \gtrsim 1.6$. Ceci est une trace des conditions initiales et cela se comprend bien en observant la figure 5.8. Celle-ci montre la densité électronique en unité arbitraire et la position du front d'ions en fonction du temps donné par le modèle et par la simulation. Trois types d'électrons contribuent à aplanir le profil de densité dans la simulation par rapport au modèle.

Tout d'abord, un nombre important d'électrons ont initialement une énergie suffisamment élevée pour réussir à s'échapper du système. C'est pourquoi le modèle chargé donne une meilleure description. Les trajectoires de ces électrons fuyants sont visibles sur la figure 5.8. L'une d'entre elles a été mise en évidence avec le label "électron rapide". Dans la simulation, certains d'entre eux sont encore visibles alors que le modèle les considère à l'infini d'où l'observation d'un profil plus plat.

Cette figure montre aussi que certains des électrons au dessus du front sont en train de retomber vers la sphère d'ions sur des échelles de temps de l'ordre du temps total de la simulation. Ces électrons sont donc bien liés au système car ils ne se sont pas échappés mais n'ont pas eu le temps de se conformer à la solution asymptotique. Ils constituent un événement transitoire encore marqué par les conditions initiales. La trajectoire d'un tel électron a été mis en évidence avec le label "électron lent".

Enfin, parmi les électrons qui sortent de la région interne, certains retombent rapidement. En tombant, ils sont accélérés par le potentiel central et ressortent ensuite sous la forme de bouffées secondaires, sorte d'échos à l'expulsion initiale des électrons les plus énergétiques. On peut distinguer cinq de ces bouffées sur la figure 5.8. Leurs amplitudes va en décroissant car ces électrons sont récupérés petit à petit par la région interne. Ces

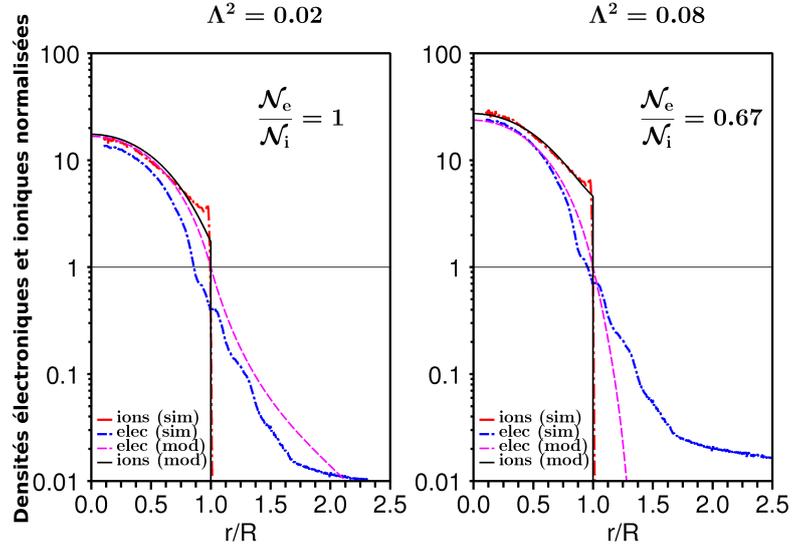


FIG. 5.7: Profils de densité des ions et des électrons dans la simulation comparés aux profils du modèle. A gauche, les profils du modèle correspondent à un plasma globalement neutre et $\Lambda^2 = 0.02$. A droite, les profils du modèle correspondent à un plasma globalement chargé avec $\Lambda^2 = 0.08$ et un nombre total d'électrons N_e qui représente 67% du nombre total d'ions N_i . Le profil de la simulation est obtenu en moyennant les densités sur l'intervalle de temps $7 \leq t\omega_{e0} \leq 41$ où ω_{e0} est la fréquence plasma en $\xi = 1$ et à $t = 0$ (voir figure 5.8). Les densités du modèle ont été normalisées pour égaliser le nombre totale d'ions avec celui de la simulation. Toutes les densités ont été normalisées à la densité électronique au front du modèle $N_e(1)$.

bouffées transitoires ne sont pas prises en compte par le modèle et sont également responsables du désaccord partiel avec le modèle dans la zone $\xi \gtrsim 1.6$.

Le petit excès d'ions observé dans la simulation au niveau du front sur la figure 5.7 est dû à un léger recouvrement des ions du front par ceux qui se trouvent juste au dessous. Il a été montré que cela arrive quand le champ électrique atteint son maximum dans une zone de densité ionique décroissante [10; 18].

La figure 5.8 montre que malgré les fortes fluctuations électroniques autour du front d'ions, ce dernier suit bien l'évolution temporelle du modèle. La période des fluctuations électroniques près du front sont compatibles avec une période de l'ordre de $2\pi/\omega_e(1)$ où $\omega_e(1)$ est la fréquence plasma en $\xi = 1$. La diminution de la fréquence des oscillations est une conséquence de la décroissance de la densité du plasma au cours du temps : $\omega_e \propto n_e^{1/2} \propto R^{-3/2}$.

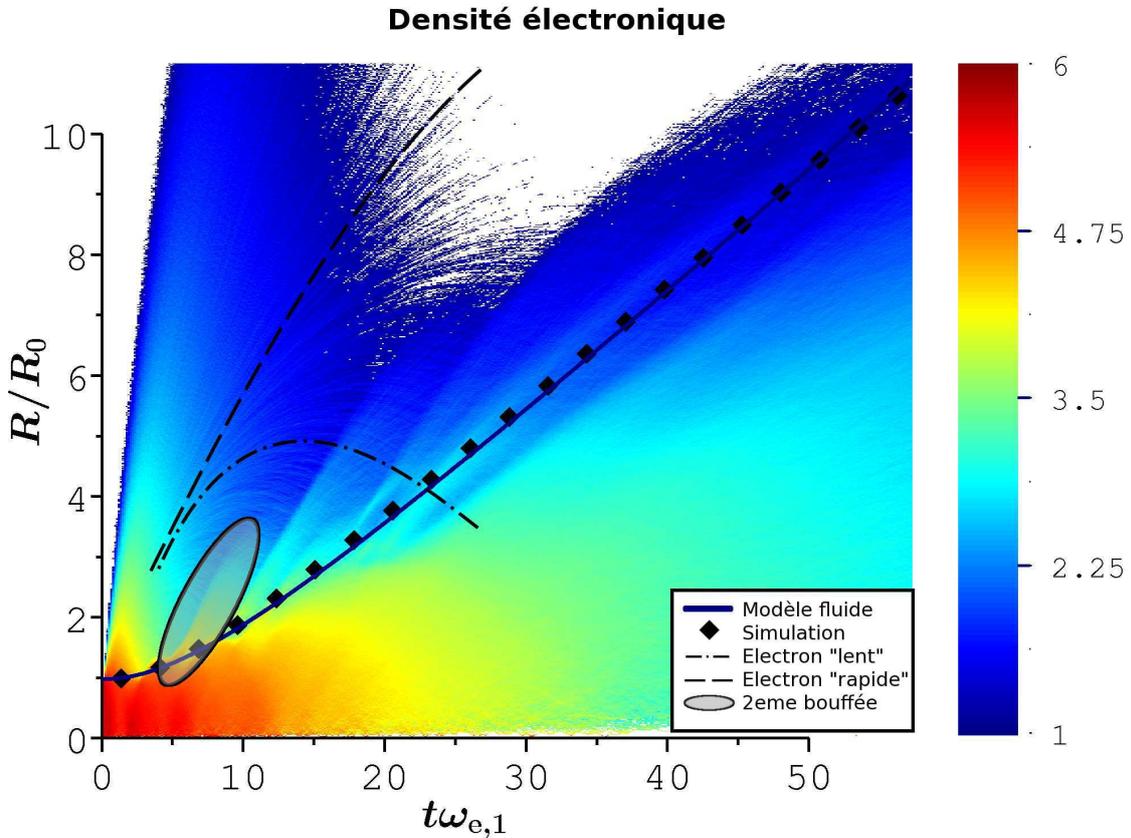


FIG. 5.8: Logarithme de la densité électronique et position du front d'ions mesurée dans la simulation (diamants) et donnée par le modèle. Les tirets montrent les trajectoires de deux électrons fuyants : un suffisamment rapide pour quitter le système, et un autre, plus lent, qui fini par être recapturé. La surface grisée indique la zone où l'on aperçoit la deuxième bouffée d'électrons.

Distribution d'énergie des ions

Le spectre d'énergie des ions à la fin de la simulation est montré sur la figure 5.9. A ce moment, la vitesse du front d'ions peut être supposée constante et l'énergie potentielle négligeable. La distribution d'énergie du modèle est également tracée pour les mêmes jeux de paramètres que la figure 5.7. Les cas chargé et neutre sont tous les deux qualitativement en accord avec la distribution de la simulation. La principale différence entre la simulation et le modèle est la présence d'un pic d'énergie au niveau du front. Ce pic est dû au recouvrement des ions au niveau du front qui est décrit dans [10; 18]. Ce recouvrement se manifeste également par la formation d'un petit pic dans le profil de densité ionique au niveau du front. Il est visible sur la figure 5.7.

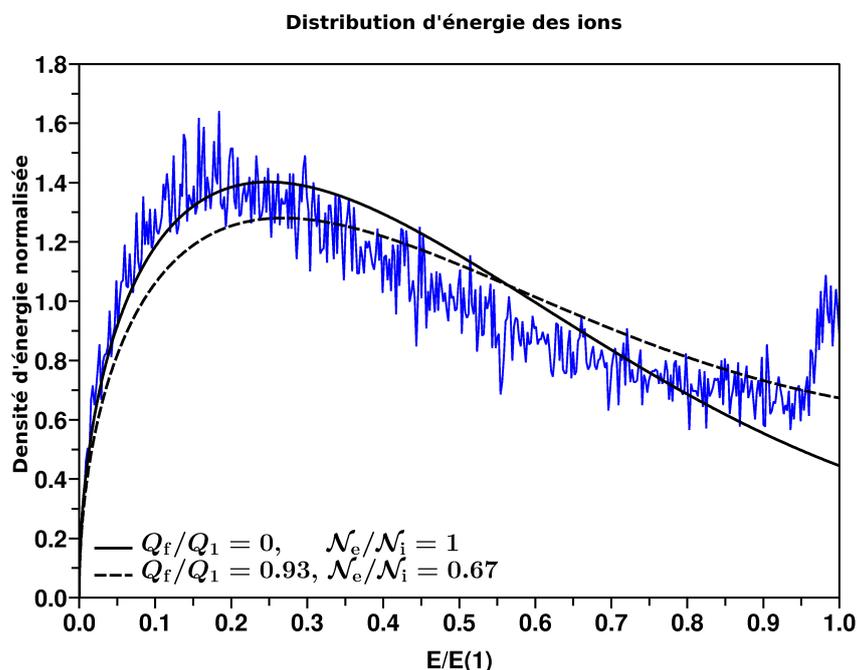


FIG. 5.9: Distribution d'énergie des ions à la fin de la simulation comparée à la distribution d'énergie du modèle auto-similaire pour le cas neutre avec $\Lambda^2 = 0.02$ et le cas chargé avec $\Lambda^2 = 0.08$ et $Q_f/Q_1 = 0.93$ correspondant à un plasma où le nombre total d'électrons est 67% du nombre total d'ions.

Conclusion

La solution auto-similaire est en accord qualitatif avec la simulation numérique présentée. Des simulations plus longues sont néanmoins requises pour vérifier que cette solution est bel et bien un attracteur de l'état final du système quand la mémoire des conditions initiales a été complètement perdue. Ce n'est pas encore tout à fait le cas dans les simulations qui ont été présentées ici. Par ailleurs, le modèle fluide utilisé ici suppose que les températures électroniques radiales et tangentielles soient égales. Or ce n'est pas le cas dans nos simulations. Le modèle pourrait donc certainement être encore amélioré en prenant en compte l'aspect anisotrope du tenseur de pression comme il est d'usage de le faire dans la description du vent solaire [8].

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Cette thèse s’appuie sur l’idée simple que les interactions gravitationnelles et coulombiennes sont suffisamment similaires pour pouvoir être simulées par les mêmes techniques numériques, et en particulier, par la technique N-Corps. Nous avons montré que l’algorithme *falcON* (un code N-Corps moderne de la classe des codes en arbre) pouvait tout à fait s’appliquer aux problèmes de physique des plasmas à condition de traiter séparément les espèces de charge positive et celles de charge négative. Dans la limite de validité de l’approximation électrostatique, ce code a l’énorme avantage de pouvoir s’appliquer, a priori, à tout type de plasma car aucune hypothèse n’est requise sur la quantité ou le type de collision en son sein ni sur la distribution de vitesse des particules. Cela permet de simuler des plasmas fortement hors équilibre ou des interfaces entre des plasmas très différents, ce qui est assez spécifique à cette technique de simulation.

La première application de ce nouvel outil est l’illustration de phénomènes connus. La description étant faite “à la particule près”, les simulations N-Corps nous donnent accès à des informations très précises. On peut ainsi observer précisément la trajectoire d’un électron qui subit des collisions, le champ électrique qu’il ressent pendant cette collision, ses orbites dans un nuage de Debye qui entoure une charge centrale, ou encore ses oscillations plasma suite à la perturbation de la population électronique. Ces données sont précieuses pour le chercheur mais aussi pour l’enseignant car cela permet aux étudiants de toucher du doigt des phénomènes qui ne sont, au final, pas si complexes que ça.

Ce code nous a également permis de mesurer le flux de chaleur électronique dans un plasma modérément couplé soumis à un gradient de température. Le flux mesuré est inférieur au flux canonique de Spitzer et Härm obtenu pour un plasma faiblement couplé. La correction est significative et supérieure à celle trouvée par Li et Petrasso qui ont essayé de prendre en compte le couplage du plasma avec un opérateur de collision de type Fokker-Planck. Ce type de plasma n’étant pas accessible par d’autres moyens de simulations, nous obtenons donc là une information particulièrement intéressante.

Enfin, le code N-Corps nous a aidé à étudier l’expansion d’un plasma dans le vide.

La simulation nous a permis de valider le modèle autosimilaire de la section 5.3 qui rend assez bien compte de l'état asymptotique du plasma en expansion.

Nous avons aussi mis en évidence des développements nécessaires à l'optimisation de l'algorithme *falcON* pour les plasmas. Le calcul direct du terme de dipôle, pour ne plus avoir à distinguer les particules en fonction de leur charge, procurerait déjà un gain précieux en temps de calcul et en précision. Ensuite, augmenter l'ordre du développement dans le calcul des interactions entre cellules permettrait d'atteindre un régime de plus haute précision et donc de pouvoir prendre en compte les collisions proches plus finement. Enfin, une parallélisation du code semble inévitable pour pouvoir augmenter le nombre de particules et avoir des résultats moins bruités que ceux que l'on a typiquement pour le moment. L'ajout dans *falcON* des termes de correction relativiste du champ à l'ordre $(v/c)^2$ afin d'inclure des phénomènes électromagnétiques est une perspective intéressante mais qui implique une refonte complète de l'algorithme de base afin de permettre un calcul des forces utilisant la position *et* la vitesse des charges dans le système.

Une nouvelle méthode de simulation numérique des plasmas a donc été mise au point, testée et utilisée pendant cette thèse. Elle a déjà donné quelques résultats et en donnera certainement d'autres dans l'avenir car elle a encore une grande marge d'optimisation. De plus, son atout étant qu'elle peut être utilisée pour simuler tout type de plasmas, son application n'est pas restreinte à l'astrophysique comme illustré par l'application à l'étude de l'expansion d'un plasma dans le vide qui intéresse tout particulièrement la communauté des plasmas de fusion.

Annexe A

Interaction entre deux cellules

Dans cette annexe nous détaillons les calculs d'interaction entre les cellules qui se trouvent dans [6] et qui permettent de retrouver les les équations (3.4), (3.5) et (3.6).

Soient deux tenseurs \mathbf{T} et \mathbf{S} respectivement d'ordre t et s . Alors le résultat du produit tensoriel $\mathbf{T} \otimes \mathbf{S}$ sera un tenseur \mathbf{V} d'ordre $t + s$ tel que

$$\mathbf{V}_{i_1, i_2, \dots, i_{t+s}} = \mathbf{T}_{i_1, i_2, \dots, i_t} \times \mathbf{S}_{i_{t+1}, i_{t+2}, \dots, i_{t+s}} \quad (\text{A.1})$$

Un vecteur \mathbf{v} multiplié par lui même n fois au sens des tenseurs est alors écrit $\mathbf{v}^{(n)}$ et est un tenseur d'ordre n .

Le produit interne tensoriel est noté \odot . En supposant arbitrairement $t \geq s$ on a $\mathbf{T} \odot \mathbf{S} = \mathbf{U}$ et \mathbf{U} est un tenseur d'ordre $t - s$ défini comme suit

$$\mathbf{U}_{i_1, i_2, \dots, i_{t-s}} = \sum_{k_1} \sum_{k_2} \dots \sum_{k_s} \mathbf{T}_{i_1, i_2, \dots, i_{t-s}, k_1, k_2, \dots, k_s} \times \mathbf{S}_{k_1, k_2, \dots, k_s} \quad (\text{A.2})$$

La différentielle d'ordre n d'une fonction f de trois variables réelles x, y, z dérivable n fois en un point de coordonnées (x_0, y_0, z_0) est une fonction de dx, dy et dz et s'écrit

$$d^n f_{x_0, y_0, z_0} = \left(\frac{\partial}{\partial x} dx + \frac{\partial}{\partial y} dy + \frac{\partial}{\partial z} dz \right)^n f(x_0, y_0, z_0) \quad (\text{A.3})$$

cette écriture signifiant qu'on développe la parenthèse comme une puissance ordinaire en mettant ∂x^p au lieu de $(\partial x)^p$, et l'on reporte f après les ∂^n du numérateur. Par la formule du trinôme on peut écrire

$$d^n f_{x_0, y_0, z_0} = \sum_{i+j+k=n} \frac{n!}{i!j!k!} dx^i \frac{\partial^i f}{\partial x^i} \Big|_{x_0, y_0, z_0} dy^j \frac{\partial^j f}{\partial y^j} \Big|_{x_0, y_0, z_0} dz^k \frac{\partial^k f}{\partial z^k} \Big|_{x_0, y_0, z_0} \quad (\text{A.4})$$

qui s'écrit aussi plus simplement en utilisant les opérateurs définis précédemment

$$d^n f_{x_0, y_0, z_0} = (dx, dy, dz)^{(n)} \odot \nabla^{(n)} f(x_0, y_0, z_0) \quad (\text{A.5})$$

où ∇f est l'opérateur gradient qui, avec les notations précédentes, peut être vu comme un vecteur de coordonnées $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$. De l'équation (A.5) on déduit le développement en série de Taylor (3.3).

Ensuite, en introduisant (3.3) dans (3.1) en limitant la somme sur j à l'ensemble des particules de la cellule B on obtient

$$\phi_{B \rightarrow A}(\mathbf{x}) = - \sum_{y_i \in B} \mu_i \sum_{n=0}^p \frac{1}{n!} (\mathbf{x} - \mathbf{y}_i - (\mathbf{G}_A - \mathbf{G}_B))^{(n)} \odot \nabla^{(n)} g(\mathbf{R}) + \mathcal{R}_p \quad (\text{A.6})$$

En utilisant la formule du binôme on développe le terme $(\mathbf{x} - \mathbf{y}_i - (\mathbf{G}_A - \mathbf{G}_B))^{(n)}$ et on rentre dans les termes à l'intérieur des signes somme.

$$\phi_{B \rightarrow A}(\mathbf{x}) = - \sum_{y_i \in B} \sum_{n=0}^p \sum_{m=0}^n \mu_i \frac{1}{n!} C_n^m (\mathbf{x} - \mathbf{G}_A)^m (-1)^{n-m} (\mathbf{G}_B - \mathbf{y}_i)^{(n-m)} \odot \nabla^{(n)} g(\mathbf{R}) + \mathcal{R}_p \quad (\text{A.7})$$

Quand l'indice n vaut une certaine valeur n_0 , la somme sur l'indice m va de 0 à n_0 . Si l'on inverse l'ordre des signes somme dans l'équation précédente, il faut donc prendre en compte le fait que, inversement, lorsque l'indice m vaut un certain m_0 , l'indice n lui va de m_0 à p . En inversant les signes somme on a donc

$$\phi_{B \rightarrow A}(\mathbf{x}) = - \sum_{y_i \in B} \sum_{m=0}^p \sum_{n=m}^p \mu_i \frac{1}{n!} C_n^m (\mathbf{x} - \mathbf{G}_A)^m (-1)^{n-m} (\mathbf{G}_B - \mathbf{y}_i)^{(n-m)} \odot \nabla^{(n)} g(\mathbf{R}) + \mathcal{R}_p \quad (\text{A.8})$$

Qui peut également s'écrire en faisant le changement de variable $n = n - m$

$$\phi_{B \rightarrow A}(\mathbf{x}) = - \sum_{y_i \in B} \sum_{m=0}^p \sum_{n=0}^{p-m} \mu_i \frac{1}{(n+m)!} C_{(n+m)}^m (\mathbf{x} - \mathbf{G}_A)^m (-1)^n (\mathbf{G}_B - \mathbf{y}_i)^{(n)} \odot \nabla^{(n+m)} g(\mathbf{R}) + \mathcal{R}_p \quad (\text{A.9})$$

En remarquant que $\frac{C_{(n+m)}^m}{(n+m)!} = \frac{1}{n!m!}$ et en factorisant l'expression précédente on retrouve les équations (3.4), (3.5) et (3.6).

Annexe B

Modifying the *falcON* code for plasma simulations

B.1 Introduction

falcON is a hierarchical $O(N)$ force calculation code for the approximate computation between N mutually interacting bodies. The underlying algorithm, mainly intended for gravitationally interacting bodies, has been extensively described in the reference article by the author of the code W. Dehnen [6] (hereafter D2002). This note is about a possible extensions of the basic algorithm to make it applicable to plasma simulations, i.e. with the possibility of having both attractive and repulsive forces in the system, while keeping the $O(N)$ computational complexity of the algorithm. Even though, both electrostatic and gravitational force fields are governed by the Poisson equation, non exact methods (like the *falcON* algorithm) to solve Poisson's equation in the gravitational case may not be uncritically transposed to the electrostatic case. For example, the electrostatic field due to a system of positive and negative charged particles can vanish exactly, whereas any system of gravitationally interacting bodies induces a non vanishing gravitational field. Concerning *falcON*, the most important difference arises because in a globally neutral plasma of N particles the monopole contribution to the electrostatic field is zero, whereas in the gravitational case the monopole term is proportional to the sum of all masses in the system which is always positive. In addition, given that in the original version of *falcON* the multipole expansion of the field is barycentric, the dipole term is zero by construction. In a plasma, the dipole term is often dominant, the monopole term being generally small or zero.

Details on the *falcON* algorithm can be found in Dehnen's article ([6]). In section B.2 we propose a better suited definition of the expansion center for the approximate and in section B.3 the associated expansion coefficients.

B.2 Modifying the definition of the expansion center

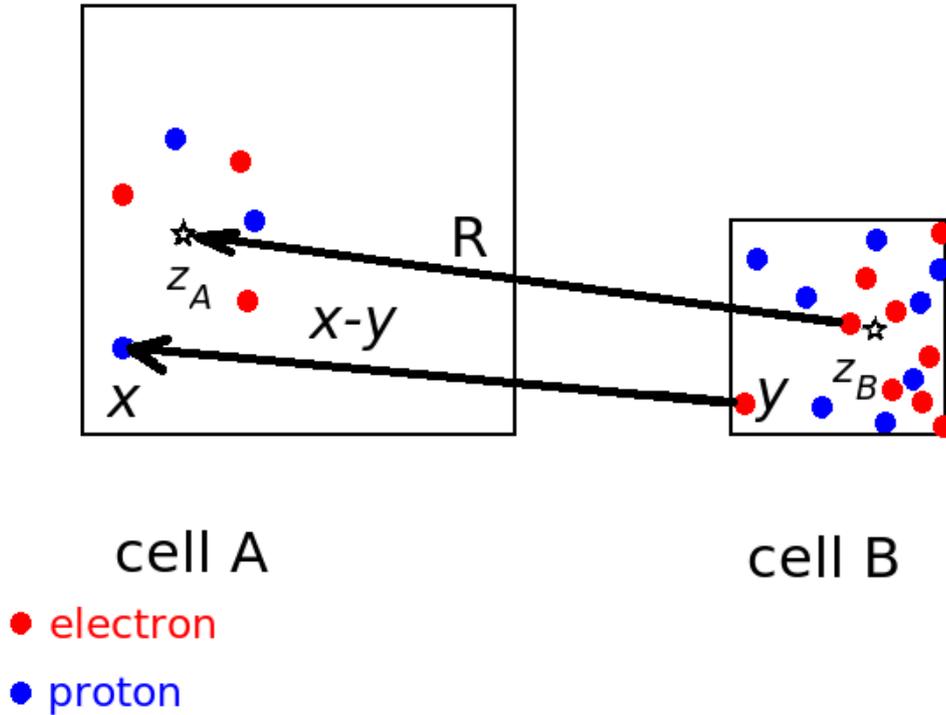


FIG. B.1: Two interacting cells (boxes). The stars indicate the position of the "center of mass" based on the sum of the absolute value of the charges μ_i in the corresponding cell according to equation (B.1). The figure has been adapted from Fig 1 in reference [6].

The algorithm is based on a multipole expansion of the electrostatic force acting on the bodies in cell A due to all bodies in cell B for well separated cells (see figure B.1). The key point is a convenient definition of the expansion center z_B based on the position and on the *electric charge* μ_i of all charges i in cell B. It is reasonable to set

$$z_B \equiv \frac{\sum_i |\mu_i| y_i}{\sum_i |\mu_i|}. \quad (\text{B.1})$$

This new definition of the expansion center has the advantage of being identical to the original definition in Dehnen's paper when all μ_i in the system are positive. In the case of two charges of equal strength and opposite sign (e.g. an electron and a proton) z_B is located at half the distance between the two charges, which is a convenient location for a multipole expansion. With the old definition in [6] one has μ_i instead of $|\mu_i|$ in (B.1). In this case the expansion center would be located at $z_B \rightarrow \infty$ because of the vanishing denominator !

B.3 The new version of the field tensors

The potential at every position x in cell A generated by all charges in cell B is given by the expansion

$$\Phi_{B \rightarrow A}(x) = - \sum_{m=0}^p \frac{1}{m!} (x - z_A)^{(m)} \odot \mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{m,p} + \mathcal{R}_p(\Phi_{B \rightarrow A}) \quad (\text{B.2})$$

where $x^{(n)}$ indicates the n -fold outer product of the vector x with itself, \odot the tensor inner product and \mathcal{R}_p the Taylor reminder due to multipole terms of order higher than p . Given the definition (B.1) of the expansion center z_B , the field tensors $\mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{m,p}$ in equation (B.2) do now depend on the dipole moment M^1 , which vanishes by construction in the gravitational case. The general expression for the field tensors in (B.2) is

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{m,p} = \sum_{n=0}^{p-m} \frac{(-1)^n}{n!} \nabla^{(n+m)} g(\mathbf{R}) \odot \mathbf{M}_B^n \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{M}_B^n = \sum_{y_i \in B} \mu_i (y_i - z_B)^{(n)} \quad (\text{B.4})$$

where $\mathbf{R} \equiv z_A - z_B$ and $g(\mathbf{R}) = 1/|\mathbf{R}|$ is the spherical Green function. As in [6], we limit the expansion to the order $p = 3$. Using the following definition for the operator D^m

$$D^m \equiv \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^m g(r) \Big|_{r=|\mathbf{R}|} \quad (\text{B.5})$$

so that, for example, D^2 writes

$$D^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial g(r)}{\partial r} \right) \Big|_{r=|\mathbf{R}|} \quad (\text{B.6})$$

The explicit form of the relevant coefficients (using Einstein's sum convention), including contributions proportional to the non vanishing dipole M^1 , can be written as (assuming Einstein's summation convention)

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A}^{0,3} = M^0 D^0 + \frac{1}{2} M_{ii}^2 D^1 + \frac{1}{2} R_i R_j M_{ij}^2 D^2 - R_i M_i^1 D^1 + O(M^3) \quad (\text{B.7})$$

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A, i}^{1,3} = R_i \left(M^0 D^1 + \frac{1}{2} M_{jj}^2 D^2 + \frac{1}{2} R_j R_k M_{jk}^2 D^3 \right) + R_j M_{ij}^2 D^2 - M_i^1 D^1 - R_i R_j M_j^1 D^2 \quad (\text{B.8})$$

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A, ij}^{2,3} = M^0 (\delta_{ij} D^1 + R_i R_j D^2) - M_k^1 \left[(\delta_{ij} R_k + \delta_{ki} R_j + \delta_{jk} R_i) D^2 + R_i R_j R_k D^3 \right] \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{C}_{B \rightarrow A, ijk}^{3,3} = M^0 \left[(\delta_{ij} R_k + \delta_{ki} R_j + \delta_{jk} R_i) D^2 + R_i R_j R_k D^3 \right]. \quad (\text{B.10})$$

Box surrounded terms are new with respect to [6]. Note that the octopole term M^3 only appears in the $\mathbf{C}_{\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{A}}^{0,3}$. Following [6], we ignore this contribution since it does not affect the force field $\nabla\Phi$.

Annexe C

Corrections relativistes

Dans la section 2.3, nous avons fait l'hypothèse "non relativiste". Cette hypothèse est cruciale pour la validité de toutes nos simulations. Dans cette annexe nous allons préciser certains des termes qui sont négligés lorsque nous faisons cette approximation.

C.1 Interaction particules-champs

Jusqu'à présent, nous avons toujours supposé que le champ électrique créé par une charge ne dépendait que de sa position P . Cela implique que tout déplacement de la particule modifie instantanément le champ qu'elle crée en tout point de l'espace et que donc l'information de sa position s'est propagée à une vitesse infinie. Or, d'après la relativité, la vitesse de propagation d'une information est nécessairement inférieure à celle de la lumière. Dans le cadre relativiste, le champ modifié sera donc ressenti en un certain point M avec un retard de $\|\mathbf{PM}\|/c$.

Il est possible de prendre en compte ces effets de la manière suivante. En continuant de supposer que les vitesses sont petites devant celle de la lumière mais en incluant les effets de retard jusqu'à l'ordre $(v/c)^2$ (approximation de Darwin), la force totale exercée par une charge q_1 de vitesse \mathbf{v} sur une charge q_2 de vitesse nulle (on se place dans le référentiel adéquat) situé à une distance R de q_1 s'écrit [11] :

$$\mathbf{F}_{1 \rightarrow 2} = q_2 \left[\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \wedge \mathbf{B} \right] \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (\text{C.2})$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{rot}(\mathbf{A}) \quad (\text{C.3})$$

$$\phi = \frac{q_1}{R} \quad (\text{C.4})$$

$$\mathbf{A} = \frac{q_1}{2cR} (\mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}) \quad (\text{C.5})$$

où \mathbf{n} est le vecteur unitaire dirigé de q_1 vers q_2 . ϕ et \mathbf{A} sont respectivement les potentiels électrique et vecteur créés par q_1 . Dans l'équation C.2, on reconnaît la force de Coulomb en $\nabla\phi$ décrite dans la section 2.3. A cela vient s'ajouter un terme supplémentaire en $(v/c)^2$, nouvelle composante du champ électrique qui dépend de la vitesse et de l'accélération de q_2 .

La force de Lorentz est le second terme du membre de droite de l'équation C.1. Cette force, qui est également en $(v/c)^2$, n'est pas due aux effets de retards mais est elle aussi négligée dans l'approximation électrostatique.

falcoN ne calcule pas ces forces et un remaniement profond de l'algorithme serait nécessaire pour pouvoir le faire. Non seulement des dépendances en vitesse et en accélération apparaissent, mais de plus, le code utilise le principe d'action-réaction pour réduire le nombre d'opérations or ce principe n'est plus vrai entre deux particules qui interagissent via la force de Lorentz.

C.2 Rayonnement

Si l'on pousse le développement à un ordre encore supérieur, on prend en compte la rayonnement des particules qui perdent alors de l'énergie proportionnellement à (a^2/c^3) où a est l'accélération de la particule. Il s'agit du rayonnement de freinage d'une charge accélérée. Cela ne peut pas être pris en compte par un code N-Corps classique car, pour gérer la propagation du rayonnement électromagnétique, il faudrait mettre en place une grille de calcul spatiale sur laquelle les champs électromagnétiques autonomes seraient définis.

C.3 Principe fondamental de la dynamique

Notre schéma d'avancement utilise le second principe de Newton, à savoir que l'accélération $\mathbf{\Gamma}$ d'une masse ponctuelle est égale à la force \mathbf{F} qui s'exerce sur elle divisée par sa masse m . Ce principe n'est plus valable dans le cas relativiste si on se place dans un repère où la particule a une vitesse non nulle. L'accélération de la particule va alors, en plus, dépendre de sa vitesse \mathbf{v} de la manière suivante

$$m\gamma\mathbf{\Gamma} = \mathbf{F} - \frac{1}{c^2} (\mathbf{F}\cdot\mathbf{v}) \mathbf{v} \quad (\text{C.6})$$

où $\gamma = (1 - (v/c)^2)^{-1/2}$. Comme pour la force de Lorentz, il s'agit d'une correction en $(v/c)^2$.

C.4 Conclusion

Négliger les termes en $(v/c)^2$ suffit donc à se ramener à la force de Coulomb telle que nous l'utilisons dans nos calculs et simulations.

Globalement, les corrections relativistes rendent l'accélération de chaque particule dépendante des vitesses et accélérations de toutes les autres. Elles nécessitent donc de très lourdes modifications dans le code. La simulation N-Corps d'interaction électromagnétique entre particules faiblement relativistes reste néanmoins envisageable mais nous en sommes encore très éloigné.

Annexe D

Articles

D.1 The trajectory of an electron in a plasma

Publié dans *American Journal of Physics* en Octobre 2008.

The trajectory of an electron in a plasma

Arnaud Beck^{a)} and Nicole Meyer-Vernet

LESIA, Observatoire de Paris, CNRS, UPMC, Université Paris Diderot, 5 Place Jules Janssen, 92190 Meudon, France

(Received 20 December 2007; accepted 14 May 2008)

Collisions in gaseous plasmas are fundamentally different from collisions in neutral gases because a charged particle interacts simultaneously with many others via the Coulomb potential. This difference is not as intuitive for students as the billiard ball like collisions of neutral particles. We present trajectories of electrons in a weakly coupled plasma obtained from particle simulations. The trajectories illustrate the concept of distant collisions and the variation of the free path with energy, which has major consequences in plasma physics. © 2008 American Association of Physics Teachers. [DOI: 10.1119/1.2942411]

I. INTRODUCTION

A major difference between a plasma and a gas of neutral particles is the nature of collisions between particles. The collisions between neutral particles are similar to collisions between billiard balls, so that particle trajectories can be pictured as a succession of straight lines separated by abrupt changes in direction each time two particles approach each other by less than their diameter. The particle mean free path is the average distance traveled between such encounters.

The situation is completely different in a gas of charged particles. In this case each particle interacts simultaneously with a large number of distant particles via the Coulomb electric field, so that its trajectory experiences a superposition of many small perturbations. The mean free path is the average distance that the particle travels to accumulate enough small perturbations to produce a large variation in its motion.¹ The free path strongly increases with energy because fast particles are almost unperturbed by the Coulomb potential.

It has long been understood that long range Coulomb collisions play a major role in plasma physics. They make the velocity distribution function Maxwellian, equalize the temperatures of the different plasma components, and control the various transport coefficients, all this without the particles, on average, becoming close to each other. Quantifying these effects is crucial to understanding plasmas. The strong increase of the mean free path with energy is at the heart of some fundamental properties, such as the failure of classical calculations of transport coefficients in plasmas that are not strongly collisional.²

It is important that plasma physics students grasp the nature of the collisions in plasmas. Textbooks generally illustrate the collisions by hand-drawn sketches of the assumed trajectory of a particle. In this note we present several computed electron trajectories in a weakly coupled plasma obtained from simulations using N -body techniques usually applied to gravitational dynamics.³ The computed trajectories serve to better illustrate the meaning of the mean free path and its variation with energy.

II. FUNDAMENTAL LENGTHS IN A PLASMA

Consider a completely ionized plasma consisting of n electrons of charge $-e$ and n ions of charge e per unit volume. The magnitude of the potential energy of two particles at distance r from each other due to the Coulomb interaction is $e^2/4\pi\epsilon_0 r$. When two particles come close enough that this

energy becomes comparable to the kinetic energy of their relative motion, their trajectories are perturbed by a large angle. In a plasma at temperature T this angle is greater than $\pi/2$ if the colliding particles approach each other by a distance less than approximately $r_{\pi/2}$, which is given by

$$r_{\pi/2} = \frac{e^2}{12\pi\epsilon_0 k_B T}. \quad (1)$$

This distance is often called the strong interaction radius. More precisely, it is the impact parameter for which a proton deflects a typical electron (of kinetic energy $3k_B T/2$) by $\pi/2$, or equivalently the separation at which their interaction energy is twice the kinetic energy of their relative motion.

The mean interparticle distance $\langle r \rangle \approx n^{-1/3}$ defines the typical energy of interaction $e^2/4\pi\epsilon_0 \langle r \rangle$; dividing by $k_B T$ yields the coupling parameter:

$$\Gamma = \frac{n^{1/3} e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}. \quad (2)$$

The plasma is said to be weakly coupled when $\Gamma \ll 1$. In this case the average interparticle distance is much greater than $r_{\pi/2}$. The condition $\Gamma \ll 1$ holds for most space plasmas, and we will make this assumption for the rest of the paper. In this case, the mean number of particles close enough to a given particle to undergo a large-angle deviation is about $n r_{\pi/2}^3 < \Gamma^3 \ll 1$. The probability that this configuration occurs is therefore very small.

The other fundamental length is the Debye length $L_D = (\epsilon_0 k_B T / n e^2)^{1/2}$. It represents the distance beyond which the electrostatic field of a charge is screened by the other particles, which distribute themselves around a given charge to produce an oppositely charged sheath.⁴ For the shielding to be effective and the plasma to be electrically quasi-neutral, two conditions must be met: its size must be larger than L_D , and there must be many particles in a volume of size L_D . Because $L_D = \langle r \rangle / (4\pi\Gamma)^{1/2}$, the latter inequality is $4\pi\Gamma \ll 1$, which is similar to the weakly coupled inequality in Eq. (2), albeit somewhat stronger.

III. THE FREE PATH OF PLASMA PARTICLES

As discussed in Sec. II, a particle has, at any instant, a very small probability of suffering a close collision that produces a large angle deviation. At the same time it is subject to the Coulomb field of all the particles in a volume of size L_D , that is, about $n L_D^3 = (4\pi\Gamma)^{-3/2} \gg 1$ particles, each of which

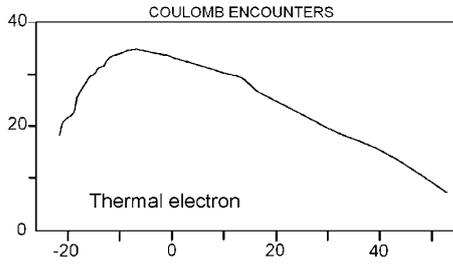


Fig. 1. Trajectory of a thermal electron in a plasma with $\Gamma=0.02$. The figure is a projection of the three-dimensional trajectory, with axes labeled in units of the average inter-particle distance.

produce only a small perturbation because the mean inter-particle distance is much greater than $r_{\pi/2}$. We now ask what determines the mean free path: The rare and strong close collisions or the frequent and weak distant interactions?

First, let us consider the close collisions. Because any encounter closer than $r_{\pi/2}$ produces a large perturbation, the effective cross section for deviations due to such encounters is the surface of a disk of radius $r_{\pi/2}$, that is, $\sigma_{c,close} = \pi r_{\pi/2}^2$. The corresponding free path is the length of a cylinder of section $\sigma_{c,close}$ containing one particle, that is, $\ell_{fc} \sim 1/n\pi r_{\pi/2}^2$.

Let us now consider only distant collisions. Consider an electron passing by an ion (assumed at rest because of its large mass), with impact parameter $b > r_{\pi/2}$. Let Δv_{\perp} be the variation in velocity perpendicular to the initial direction. The deflection produced by such a collision is equal to the Coulomb energy $e^2/(4\pi\epsilon_0 b)$ divided by the kinetic energy,¹ which for an electron of kinetic energy $3k_B T/2$ is

$$\frac{\Delta v_{\perp}}{v} \approx \frac{2r_{\pi/2}}{b}, \quad (3)$$

if $b < L_D$ and is zero otherwise because the particles cannot feel the electric field at distances greater than the Debye length. These collisions induce deflections in random directions which tend to cancel, so that the average deflection is zero but the mean square is not. These collisions will eventually lead to a significant velocity change just as for a random walk. Because the number of collisions of impact parameter b producing a square deviation $(\Delta v_{\perp}/v)^2$ is proportional to $2\pi b$, the effective cross section for deviations due to distant interactions only is given by

$$\sigma_{c,distant} = \int_{r_{\pi/2}}^{L_D} \left(\frac{\Delta v_{\perp}}{v}\right)^2 2\pi b db \approx 8 \ln(\Lambda) \sigma_{c,close} \quad (4)$$

with $\Lambda = L_D/r_{\pi/2} = 12\pi n L_D^3 \approx \Gamma^{-3/2}$. We see that the effective cross section is the integral of the square deflections due to distant collisions at a given time multiplied by the area in which they take place. The corresponding mean free path is the distance the electron must travel to encounter enough particles so that the sum of $(\Delta v_{\perp}/v)^2$ equals unity; from Eq. (4) it is thus smaller than the mean free path for close collisions ℓ_{fc} by the factor $8 \ln(\Lambda)$.

The dimensionless parameter $\lambda = \ln(\Lambda)$, often called the Coulomb logarithm, is a measure of the importance of distant interactions with respect to close ones. In a weakly

Table I. Parameters used in the text for a weakly coupled plasma.

Γ	λ	$r_{\pi/2}/\langle r \rangle$	$\ell_D/\langle r \rangle$	$\ell_t/\langle r \rangle$
2×10^{-2}	5.9	6.7×10^{-3}	2.0	152

coupled plasma λ is much greater than unity. Thus the distant collisions are strongly dominant so that the mean free path is equal to:

$$\ell_f \approx \frac{\ell_{fc}}{8\lambda} \approx \frac{3\langle r \rangle}{4\pi\Gamma^2 \ln(1/\Gamma)}, \quad (5)$$

where we have approximated λ by $\ln(\Gamma^{-3/2})$. An exact calculation yields a value that is not very different.¹

Note that we should distinguish collisions between electrons and ions from the collisions between like particles. The former only change the velocity direction but not its magnitude, whereas the latter change both the direction and amplitude of the velocity. This difference is due to the fact that for electron-ion collisions, one of the particles may be considered at rest (the massive ion), which is not the case for like particle collisions.⁵

IV. PLAYING WITH ELECTRONS

To illustrate these properties we show the trajectories of particles computed using a N -body simulation method. The system consists of $N=2 \times 10^6$ particles ($N/2$ protons and $N/2$ electrons). The idea of the simulation is simple. We compute the Coulomb forces on each particle by the $N-1$ other ones. Each force is integrated over a small time step according to a leap frog scheme⁶ which gives the updated velocity and position of each particle.³ The initial velocity distribution function is a Maxwellian of temperature T for both electrons and protons. The particles evolve in a cubic volume whose faces reflect the particles back inside the domain to ensure a constant total number of particles. This method is expensive in computational time but allows us to

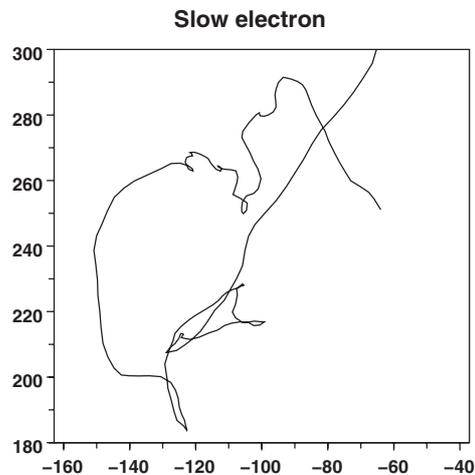


Fig. 2. Trajectory of a slow electron ($v \approx 0.6v_T$) in a plasma with $\Gamma=0.02$. The figure is a projection of the three-dimensional trajectory, with axes labeled in units of the average inter-particle distance.

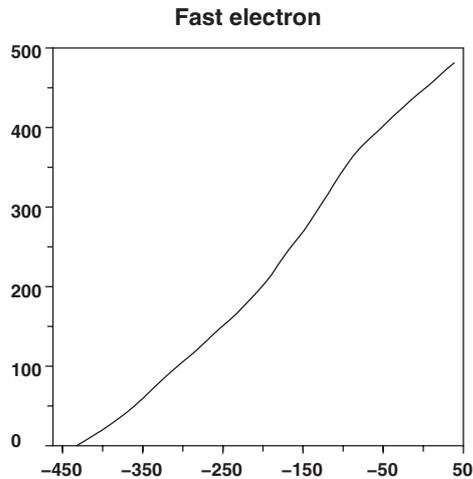


Fig. 3. Trajectory of a fast electron ($v \approx 2.3v_T$) in a plasma with $\Gamma=0.02$. The figure is a projection of the three-dimensional trajectory, with axes labeled in units of the average inter-particle distance.

include the slightest details of the physics into the simulation. In particular, the trajectory of all particles is known.

Figure 1, which is adapted from Ref. 7, shows the trajectory of an electron with the mean square speed. The figure is a projection in the plane (x, y) of a three-dimensional trajectory of an electron for a time during which it does not cross the plane boundaries of the volume. The plasma parameters are given in Table I.

A fundamental property of the mean free path is its dependence on energy. Equation (1) gives the strong interaction radius for a thermal electron having the mean square speed v_T . For an electron of speed v the strong interaction radius $r_{\pi/2}$ must be multiplied by $(v_T/v)^2$, and the effective cross section by $(v_T/v)^4$. Hence the mean free path is different from that of a thermal electron by the factor $(v/v_T)^4$. Hence an electron moving only three times slower or faster than average has a mean free path smaller or greater by two orders of magnitude. This difference is illustrated in Figs. 2 and 3, which show the trajectories of electrons with speeds equal to respectively 0.6 and 2.3 times the thermal speed.

We suggest showing these figures to students and asking them to calculate the various plasma scales from the value of Γ and to comment on the trajectories. Note that the mean free path given by Eq. (5) and in Table I is for a three-

dimensional trajectory, but Figs. 1–3 are two-dimensional projections. Thus the mean free paths in the figures are less than the actual values by a factor of about 2. Figure 1 suggests a free path of $\approx 100\langle r \rangle$, in rough agreement with Eq. (5) which gives a value of $152\langle r \rangle$. Note that in Fig. 2 the speed $v \approx 0.6v_T$ is approximate, because the particle undergoes many collisions, including electron-electron collisions that change its speed, so that its speed varies between about $0.3v_T$ and $0.9v_T$. This variation implies that its mean free path varies between about 1.23 and $100\langle r \rangle$. Students could also be asked to estimate the evolution of the electron velocity in time by looking at its trajectory. The aim is to spot the areas at which the particle is subject to more frequent collisions and to relate the collision frequency to the particle speed: Areas of higher collision frequency are areas of slower motion. The trajectory of the fast electron in Fig. 3 is simpler. Its mean free path is large ($\approx 4.2 \times 10^3 \langle r \rangle$) and the electron undergoes few collisions so that its motion is almost straight and uniform.

^{a)}Electronic mail: arnaud.beck@obspm.fr

¹Lyman Spitzer, Jr., *Physics of Fully Ionized Gases* (Wiley, Princeton, NJ, 1962), 2nd ed.

²See, for example, J. D. Scudder, *Astrophys. J.* **398**, 299–318 (1992); J. F. Luciani, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1664–1667 (1983). Because the mean free path of the fast particles can be several times the typical length scale of the plasma, their properties can be very different from the local particles. Consequently, a local classical calculation is likely to give incorrect results.

³More details of the N -body techniques for plasma simulations can be found in A. Beck, “N-body plasma simulations,” Thesis Observatoire de Paris, 2008. The algorithm and its application to gravitational dynamics is discussed in W. Dehnen, “A hierarchical $\mathcal{O}(N)$ force calculation algorithm,” *J. Comput. Phys.* **179**, 27–42 (2002).

⁴Particles moving faster than the thermal ions can only be shielded by electrons; particles moving faster than the thermal electrons are not shielded at all and produce Langmuir waves. In the absence of equilibrium and/or for dimensions different from three, the shielding may be very different from the conventional one. See, for example, A. J. M. Garrett, “Screening of point charges by an ideal plasma in two and three dimensions,” *Phys. Rev. A* **37**, 4354–4357 (1988), N. Meyer-Vernet, “Aspects of Debye shielding,” *Am. J. Phys.* **61**, 249–257 (1993).

⁵For collisions between electrons the calculation must be done in the center-of-mass frame, and the mean free path for change in the velocity direction is greater by a factor of about 2.

⁶See T. Quinn, N. Katz, J. Stadel, and G. Lake, “Time stepping N-body simulations,” eprint arXiv:astro-ph/9710043.

⁷Adapted from N. Meyer-Vernet, *Basics of the Solar Wind* (Cambridge U.P., Cambridge, 2007).

D.2 Heat flux in a moderately coupled plasma

En cours de revue après soumission à *European Physical Journal D*.

EPJ manuscript No.
(will be inserted by the editor)

Ab initio simulations of the heat flux in a moderately coupled plasma and steep temperature gradients

Arnaud Beck and Filippo Pantellini

Observatoire de Paris, LESIA, 5 Place Jules Janssen, 92195 Meudon, France
e-mail: Arnaud.Beck@obspm.fr

Abstract. We use ab initio numerical simulations of a moderately coupled (Coulomb logarithm $\lambda = 3.8$), classical, electron-proton plasma to investigate the electron heat flux in a steep temperature gradient. The temperature gradient is forced by confining the plasma within a cylinder with “thermal” walls at both ends. The thermal Knudsen number $K_{e,T}$, defined as the ratio of the electron mean free path to the characteristic scale of variation of the temperature, is in the range $10^{-3} \lesssim K_{e,T} \lesssim 10^{-1}$. We show that under such circumstances the electron heat flux is approximately 3/4 of the canonical Spitzer&Härm value for $K_{e,T} \lesssim 5 \cdot 10^{-2}$. For $K_{e,T} \gtrsim 5 \cdot 10^{-2}$ the non local contribution to the heat flux from the thermal walls is no longer negligible and the heat flux saturates at roughly 10^{-1} times the free streaming value. The simulations are based on N -body techniques which are widely used in the context of gravitationally interacting bodies but rarely in the context of interacting charges. Such simulations have the advantage of not relying on any particular choice of the collision operator in Boltzmann’s equation.

PACS. 52.25.Fi Transport properties – 45.50.Tn Collisions – 44.10.+i Heat conduction

1 introduction

We adapted the FalcON code, originally developed by W. Dehnen [1] for system of gravitationally interacting bodies, to the case of a system of a large number of interacting positive and negative charges.

More specifically, in this paper we apply the N -body technique to the study of the heat flux in an, overall neutral, and moderately coupled electron-proton plasma characterized by a Coulomb logarithm in the range $2 \lesssim \lambda \lesssim 10$ (cf. equation (1)). The Coulomb logarithm λ for an electron-proton plasma at temperature T and electron density n_e is a dimensionless parameter usually defined as

$$\lambda \equiv \ln \left(\frac{\lambda_D}{r_s} \right). \quad (1)$$

where $\lambda_D \equiv (k_B T \epsilon_0 / n_e e^2)^{1/2}$ is the Debye length, k_B the Boltzmann constant, $r_s \equiv e^2 / 12\pi \epsilon_0 k_B T$ the strong interaction radius, e the absolute value of the electron charge and ϵ_0 the electrical permittivity of free space. The Debye length λ_D is the typical spatial scale required by the plasma to screen a local charge excess. Indeed, despite the electrostatic interaction being a long distance interaction, any two charged particles in the plasma do not interact if their separation exceeds the Debye length. Thus, at a given time, any particle in the plasma interacts simultaneously with all particles within a distance of order λ_D . Most of these interactions have little influence on the particle’s trajectory unless the interacting distance is not much larger than the strong interaction radius r_s . The latter corresponds to the distance between two electrons such that their

interaction energy $e^2 / 4\pi \epsilon_0 r_s$ is twice their individual characteristic kinetic energy $\frac{3}{2} k_B T$. The strong interaction radius r_s corresponds to the impact parameter for a 90° deflection of a thermal electron interacting with a stationary positive ion of charge e . In extremely hot plasmas the strong interaction radius eventually becomes shorter than the mean electron De Broglie length $\lambda_e = \hbar / m_e \langle v^2 \rangle^{1/2}$ (where $\langle v^2 \rangle = 3k_B T / m_e$, $\hbar = h / 2\pi$ and h is the Planck constant) and quantum effects can no longer be neglected in the treatment of close encounters. In such an event our model, which is based on classical electrostatics, fails as most close encounters will be dominated by quantum mechanical effects, and the Coulomb logarithm definition of Equation (1) is no longer the pertinent dimensionless parameter characterizing the plasma. The requirement $r_s \gtrsim \lambda$ for the validity of the classical approach requires temperatures $T \lesssim 10^5 K$.

A plasma is said to be weakly coupled if $\lambda \geq 10$ and strongly coupled if $\lambda \leq 1$. In this paper we consider a moderately coupled plasma with $\lambda = 3.8$, which corresponds to a Coulomb coupling parameter $\Gamma = 0.11$. The coupling parameter Γ is the average ratio of the electrostatic to kinetic energy of neighbor electrons in the plasma, i.e.

$$\Gamma \equiv \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 a k_B T} \quad (2)$$

where $a \equiv (3/4\pi n_e)^{1/3}$ is the Wigner-Seitz radius. We note that the coupling parameter Γ and the Coulomb logarithm λ are equivalent parameters as they are linked by the relation

$$\lambda = \ln \left(\frac{\sqrt{3}}{\Gamma^{3/2}} \right) = \ln(9N_D) \quad (3)$$

From equation 3 it follows that the number of electrons N_D enclosed by a sphere of radius λ_D is larger than unity when $\lambda \gtrsim 2$. Consequently, a moderately coupled plasma, unlike the weakly coupled ones, does not necessarily have much more than one electron in this sphere. In this particular case, the use of statistical means (i.e. particle distribution functions) to compute the plasma's spatial and temporal behavior may be inappropriate. Another difference between weakly and moderately coupled plasmas is that, with $\lambda \gtrsim 10$, the number of particles making distant collisions is so much larger than the number of particles making close collisions, that the latter's contribution to the transport coefficients can be neglected. Under such conditions, relatively simple collision operators, including only the first moment of the distribution function, can satisfactorily be used in the Boltzmann equation in transport coefficient computations [see e.g. 2]. Whereas in moderately coupled plasmas, when λ is reduced below ~ 10 , the relative importance of close encounters becomes increasingly large and the collision operators, required to increase accuracy to better than $\sim \lambda^{-1}$, become increasingly complicated and unpractical [3, 2]. On the other hand, the $\lambda \lesssim 10$ regime appears to be particularly well suited for, *ab initio* N -body simulations where all kind of collisions are naturally included. In such numerical models, the limitations are merely computational, as in N -body simulations the spatial resolution of the particles' trajectories must be of the order of the strong interaction radius $r_s \ll \lambda_D$ while the typical system size must extend over several times λ_D in order to account for the effects of distant encounters. In practice classical N -body simulations are limited to classical plasmas in the moderately coupled regime $2 \lesssim \lambda \lesssim 10$.

Laser plasmas and inertially confined fusion plasmas are sometimes in the moderately coupled regime (see [4] and [5] for references). The solar interior is also in the moderately coupled regime, with the upper 70,000 km of the convection zone being in the classical regime with $r_s \gtrsim \lambda_e$.

The problem of the heat conduction in a strong temperature gradient has been investigated theoretically a few decades ago in the case of weakly coupled plasmas [6, 7, 8]. Using the physically justified technique of forcing the anisotropic portion of the electron distribution function $f_1(v)$ to be smaller than the isotropic portion $f_0(v)$ such that the total distribution f remains positive in the Legendre development $f = f_0 + \mu f_1$ used in the standard Spitzer and Härm procedure. Bell et al [6] and Shvarts et al [7] suggest that the electron heat flux q_e is always substantially smaller than the free streaming limit $q_0 \equiv n_e(k_B T)^{3/2}/m_e^{1/2}$ confirming the experimental findings of [9]. Shvarts et al [7] do also indicate that q_e falls below the canonical Spitzer and Härm value $q_{e,S}$ for $K_{e,T} \gtrsim 2 \cdot 10^{-3}$. Luciani et al [8] use a non local extension of the classical Spitzer-Härm expression of the electron heat flux which includes the contributions from the temperature profile up to a distance of the order of the mean free path from the point of observation. The Luciani et al expression only depends on the temperature and density profile in the vicinity of the observation point and not on a manipulation of $f_1(v)$. Despite being quite different from the approach of [6, 7] Luciani et al [8] do also find that the maximum heat flux is limited to about $0.1q_0$, a value which is consistent with our results (see Figure 3).

In this paper we show that in a moderately coupled plasma the electron heat flux is substantially smaller than the Spitzer flux $q_{e,S}$ over the entire investigated range $10^{-3} \gtrsim K_{e,T} \gtrsim 10^{-1}$, if the classical estimate of the mean free path (presumably valid in the $\lambda \gtrsim 10$ regime) is used in the definition of the Knudsen number $K_{e,T}$. The electron heat flux is shown to peak at $q_e \approx 10^{-1}q_0$ for the $K_{e,T} \approx 5 \cdot 10^{-2}$. We note that in the collisionless limit the Knudsen number is undefined but not the heat flux which can be calculated analytically [10]

$$q_{NC} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{n_e k_B^{3/2}}{m_e^{1/2}} (T_1 T_2^{1/2} - T_2 T_1^{1/2}) \quad (4)$$

In the numerical set-up, the non collisional (non local) contribution to the heat flux q_{NC} due to the free streaming of electrons from the thermostats only becomes relevant for $K_{e,T} \gtrsim 5 \cdot 10^{-2}$ when $q/q_{NC} \gtrsim 0.35$ (see Table 1). One possible interpretation is that the classical collision frequency resulting from the Spitzer and Härm treatment for weakly coupled plasmas underestimates the real collision frequency in moderately coupled plasmas.

2 The model

We simulate the stationary state of N mutually interacting charged particles ($N/2$ protons and $N/2$ electrons) confined within a cylinder of height L and radius R . Values of L and R for all runs are given in Table 1. The basic setup for the simulations is shown in figure 1. Particles reaching one of the two boundaries of the cylinder at $z = 0$ and $z = L$ are re-injected following resting Maxwellian velocity distributions at temperatures T_1 and $T_2 > T_1$, respectively. Particles hitting the curved wall of the cylinder are reflected back elastically into the cylinder's interior. Because of the upper thermostat being hotter than the lower thermostat a heat flux q is expected to flow down the temperature gradient. The heat flux intensity in the cylinder is a function of the plasma parameters. We note that this experimental set-up is similar to the set-up in the heat front simulations of Luciani et al [8] where a hot and a cold region are connected by steep temperature and density profiles. The main parameters which affect the heat flux intensity are the Coulomb logarithm λ and the thermal Knudsen number $K_{T,\alpha}$ defined as

$$K_{T,\alpha} \equiv \frac{l_\alpha}{L_T} \quad (5)$$

where l_α is the collisional mean free path for a typical particle of species α and $L_T \equiv \partial(\ln T)/\partial z$ is the characteristic scale of variation of the temperature profile along the z direction.

The definition of the collisional mean free path l_α in terms of fluid quantities, such as the density, the temperature and λ is model dependent as the definition depends on the actual choice of the collision operator [see e.g. 3]. In order to facilitate comparisons with other authors, we adopt the canonical collision times for both electrons and protons in a quasi neutral and weakly coupled plasma [3, 2],

$$\tau_e = \frac{3m_e^{1/2}(k_B T_e)^{3/2}}{4\sqrt{2}\pi n \lambda e^4} \quad (6)$$

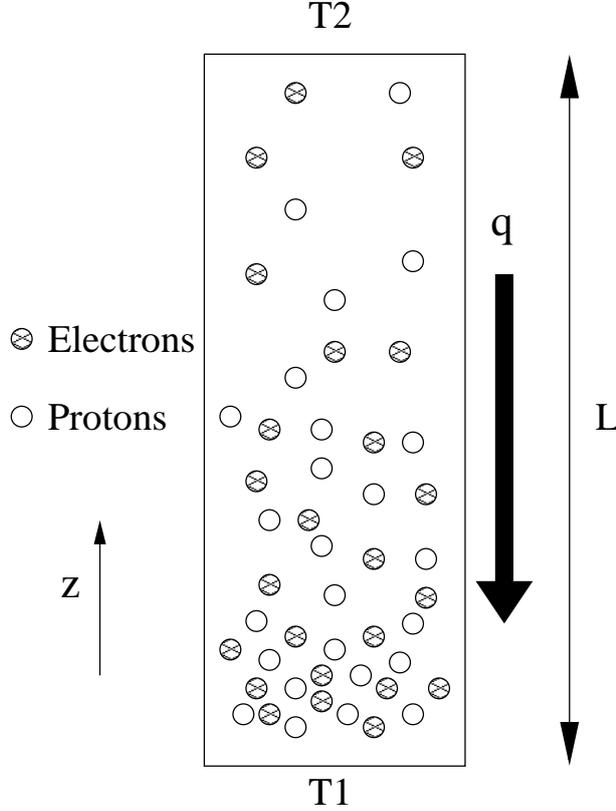


Fig. 1. Schematic illustration of the simulated system: a collection of $N/2$ electrons and $N/2$ protons confined within a cylinder of length L and radius R . The temperature gradient imposed by the thermostat at both ends of the cylinder at temperature T_1 (at $z = 0$) and $T_2 > T_1$ (at $z = L$) drive a heat flux q .

$$\tau_i = \frac{3m_p^{1/2}(k_B T_p)^{3/2}}{4\sqrt{\pi} n \lambda e^4} \quad (7)$$

where $n = n_e = n_p$ is either the proton or the electron number density. These collision times are pertinent to plasmas with $\lambda \gtrsim 10$. In a moderately coupled plasma where $10 \gtrsim \lambda$, the above collision times may merely represent a zero order estimate of the effective collision times. However, the advantage of using the collision times (6) and (7) for all values of λ permits the unambiguous definition of the Knudsen number which is the crucial parameter which determines the heat flux intensity in a plasma (see below). The mean free path l_α for a particle of species α is a function of the collision times (6) and (7) and the species characteristic velocity v_α (thermal velocity)

$$v_\alpha \equiv \left(\frac{2k_B T_\alpha}{m_\alpha} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

The mean free path is then simply given by

$$l_\alpha = \tau_\alpha v_\alpha. \quad (9)$$

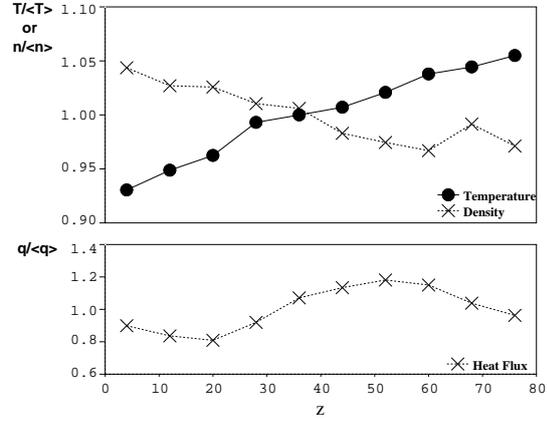


Fig. 2. Run 5: Electron density and temperature (top panel) and electron heat flux (bottom panel) from ten bins along the cylinder axis. All quantities are normalized to their average value in the cylinder.

which we use to characterize the plasma's collisionality independently of whether or not the collision times (6) and (7) represent good estimates of the effective collision times.

Concerning the temperature length scale L_T in the simulations, we note that when the temperature difference between the two thermostats is small, such that $(T_2 - T_1)/T_1 \ll 1$, L_T can be assumed to be constant:

$$L_T \equiv \left[\frac{\partial(\ln T)}{\partial z} \right]^{-1} \approx \frac{L}{2} \frac{T_2 + T_1}{T_2 - T_1}. \quad (10)$$

We restrict our simulations to the limit of small temperature variations in the system such that the L_T can effectively be assumed to be spatially constant. As an example, Figure 2 shows the density, temperature and heat flux as a function of z for Run 5. Apart from the statistical fluctuations, the temperature is seen to increase linearly with z , by about 10%, between the thermostats. The density decreases linearly by the same amount ensuring a constant pressure. The electron heat flux has a clearly defined mean value but is not completely constant over the whole simulation domain, indicating that the system is still relaxing.

3 Simulation parameters

We show results from eight runs. In all runs the plasma is characterized by the same Coulomb logarithm $\lambda = 3.8$ while the thermal Knudsen number $K_{T,e}$ ranges approximately from 10^{-3} to 10^{-1} . As already stated, there are five free parameters: the cylinder length L , the cylinder radius R , the total number of particles N , and the temperatures T_1 and T_2 of the thermostats at both ends of the cylinder. We are interested in the role of the collisions in the transport properties of the plasma so it is essential that a thermal particle makes at least a few collisions on its way from one thermostat to the other. This requirement, which is also a necessary condition for a temperature gradient to exist, can be expressed as $l_e/L < 1$.

4

Beck & Pantellini: Heat flux in moderately coupled plasma

Run	$K_{T,e}$	L/λ_D	R/λ_D	q/q_{NC}	l_e/L
1	$1.25 \cdot 10^{-3}$	280	5.2	0.15	0.07
2	$2.50 \cdot 10^{-3}$	198	6.2	0.19	0.10
3	$3.07 \cdot 10^{-3}$	161	6	0.22	0.13
4	$5.33 \cdot 10^{-3}$	140	7	0.23	0.15
5	$1.70 \cdot 10^{-2}$	443	6	0.25	0.13
6	$2.90 \cdot 10^{-2}$	161	10	0.32	0.23
7	$4.98 \cdot 10^{-2}$	90	11	0.34	0.30
8	$7.40 \cdot 10^{-2}$	70	24	0.67	2.1

Table 1. All parameters listed are computed using the temperature and densities at the center of the cylinder, at $z = L/2$. Proton to electron mass ratio is $m_p/m_e = 50$ for all runs.

The cylinder radius R is typically of the order of a few $\gtrsim \lambda_D$ and $L/\lambda_D \gg 1$. All simulations are performed with a proton to electron mass ratio $m_p/m_e = 50$. This helps reducing computational times considerably without any significant impact on the numerical values of the transport properties as the condition $m_p \gg m_e$ is still holding.

The relevant parameters for the eight runs are shown in Table 1.

4 Results

In all runs, particles are initially uniformly distributed inside the cylinder, following a Maxwellian distribution at temperature $\frac{1}{2}(T_1 + T_2)$. The system then freely evolves under the effect of the sole electrostatic forces towards a stationary state, with stable temperature and density profiles and approximately constant proton and electron heat fluxes. Asymptotically the system reaches a state of energy equipartition between species (i.e. $T_e = T_p$) and quasi neutrality $n_e = n_p$ except near the boundaries over scales of the order of the Debye length $\lambda_D \ll L$. Figure 3 shows the electron heat flux q_e , normalized to the free streaming flux $q_0 = n_e(k_B T)^{3/2}/m_e^{1/2}$, for the eight runs of Table 1 once a stationary state with an approximately spatially and temporally constant electron heat flux has been reached. The temperature used to determine q_0 is the initial temperature $\frac{1}{2}(T_1 + T_2)$ which is also the temperature in the middle of the cylinder once the stationary state is reached. The heat flux values and the associated error bars in Figure 3 represent the average and the standard deviation obtained by measuring the heat flux in 10 equally spaced bins along the z axis as illustrated in Figure 2. We note that the Spitzer&Härm flux given by [11, 12]

$$q_{e,S} = 3.2 \frac{k_B T}{m_e} n_e \tau_e \nabla(k_B T) \quad (11)$$

only depends on the Knudsen number and the free streaming flux q_0 . In normalized units we then write

$$\tilde{q}_{e,S} = \frac{q_{e,S}}{q_0} = 2.26 K_{T,e}. \quad (12)$$

Figure 3 shows that the measured heat flux systematically lies below the Spitzer&Härm flux, even at low Knudsen numbers. The normalized heat flux appears to depend linearly on the Knudsen numbers, exactly as $\tilde{q}_{e,S}$, provided the temperature

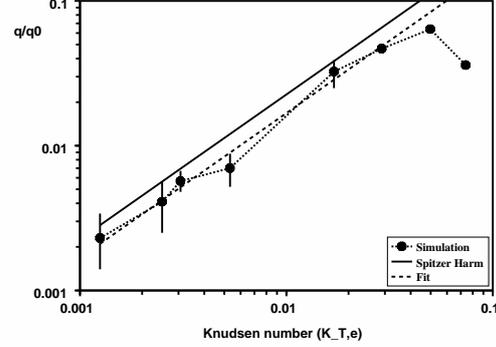


Fig. 3. Circles show the normalized electron heat flux measured in the 8 runs listed in Table 1 as a function of the Knudsen number $K_{T,e}$. The normalized Spitzer&Härm electron heat flux is shown as a reference. The linear fit, based on the 6 points to the left corresponds to a heat flux which is only 3/4 of the Spitzer&Härm flux. The Coulomb logarithm is $\lambda = 3.8$ for all runs.

gradient is not too steep, i.e. $K_{T,e} \lesssim 5 \cdot 10^{-2}$. A linear fit (excluding the two points corresponding to the steepest temperature gradients) gives

$$\tilde{q} = \frac{q}{q_0} \approx 1.68 K_{T,e} \quad (13)$$

Finding an electron flux which is systematically smaller than $\tilde{q}_{e,S}$ is not necessarily surprising as the computation of $q_{e,S}$ is based on a collision operator which neglects terms in λ^{-1} and the moments of the velocity distribution function of order ≥ 2 (see [2, 3] for a discussion on this point). Corrections of order λ^{-1} may be neglected in the weakly coupled plasma regime $\lambda \gtrsim 10$ but not for $\lambda = 3.8$. In [5], Li and Petrasso use a modified collision operator including λ^{-1} terms which are shown to effectively reduce the conventional Spitzer&Härm flux. However, the modification of the heat flux predicted by Li and Petrasso [5] is only of order $1/6\lambda$ which is much smaller than observed in our simulations. The Li and Petrasso correction is clearly insufficient to explain the result of Figure 3.

When the temperature gradients are as steep as in the simulations shown in this paper, non local contributions to the heat flux may not be negligible. In order to evaluate the non local contributions to the heat flux, we have computed the collisionless electron heat flux q_{NC} (see equation (4)) for all runs, i.e. the heat flux generated by the thermostats if the electrons were allowed to stream freely (with no velocity variations) from one thermostat to the other. Table 1 shows that the collisionless flux q_{NC} is always substantially larger than the measured flux q excepted for Run 8. We conclude, that, at least in the case of Maxwellian boundaries, the non local contribution to the heat flux is not dominant as long as $K_{e,T} \lesssim 5 \cdot 10^{-2}$. In the high Knudsen number domain ($K_{T,e} \gtrsim 0.05$), the heat flux appears to saturate at a level $\lesssim 10^{-1} q_0$, as already mentioned in [9] and [7] for the $\lambda \gtrsim 10$ case.

5 Conclusion

Numerical simulations of a moderately coupled electron-proton plasma in the classical regime (Coulomb logarithm $\lambda = 3.8$) have been used to quantify the strength of the electron heat flux in a steep temperature gradient. The simulations are based on N -body techniques which are particularly well suited for moderately coupled plasmas and have the enormous advantage of producing results which do not depend on a particular choice of the collision operator in the Boltzmann equation.

As expected for the highest Knudsen numbers ($K_{T,e} \gtrsim 5 \cdot 10^{-2}$), when non local (collisionless) contributions to the heat flux become dominant, the electron heat flux q_e is seen to saturate at $\sim 10^{-1}$ times the free streaming flux q_0 . For $K_{T,e} \lesssim 5 \cdot 10^{-2}$ the normalized flux q_e/q_0 linearly depends on the Knudsen number $K_{T,e}$. However, the intensity of the flux is found to be only about 75% of the classical Spitzer & Härm flux.

References

1. W. Dehnen. A hierarchical $O(N)$ Force Calculation Algorithm. *Journal of Computational Physics*, 179:27–42, June 2002.
2. V.E. Golant, A.P. Zhilinsky, and I.E. Sakharov. *Fundamentals of plasma physics*. John Wiley & Sons, New York, 1980.
3. S.I. Braginskii. Transport processes in plasmas. In M.A. Leontovich, editor, *Reviews of Plasma Physics*, volume 1, pages 205–311. Consultants Bureau, New York, 1965.
4. R. D. Petrasso. Plasmas everywhere. *Nat*, 343:21–22, January 1990.
5. C. Li and R.D. Petrasso. Fokker-planck equation for moderately coupled plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 70:3063–3066, May 1993.
6. A. R. Bell, R. G. Evans, and D. J. Nicholas. Electron energy transport in steep temperature gradients in laser-produced plasmas. *Physical Review Letters*, 46:243–246, January 1981.
7. D. Shvarts. Self-consistent reduction of the spitzer-härm electron thermal heat flux in steep temperature gradients in laser-produced plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 47:247–250, July 1981.
8. J.F. Luciani and P. Mora. Nonlocal heat transport due to steep temperature gradients. *Phys. Rev. Lett.*, 51:1664–1667, October 1983.
9. D. R. Gray and J. D. Kilkeny. The measurement of ion acoustic turbulence and reduced thermal conductivity caused by a large temperature gradient in a laser heated plasma. *Plasma Physics*, 22:81–111, February 1980.
10. S. Landi and F.G.E. Pantellini. On the temperature profile and heat flux in the solar corona: Kinetic simulations. *A&A*, 372:686–701, June 2001.
11. L. Spitzer and R. Härm. Transport phenomena in a completely ionized gas. *Phys. Rev.*, 89:977–981, March 1953.
12. J.D. Huba. Nrl plasma formulary. *Office of Naval Research*, 2006.

D.3 Expansion of a plasma into vacuum

Sous Presse. Accepté à *Plasma Physics and Controlled Fusion* en Octobre 2008.

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum: self-similar solution and ab initio simulations

Arnaud Beck and Filippo Pantellini

LESIA, Observatoire de Paris, CNRS, UPMC, Université Paris Diderot;
5 Place Jules Janssen, 92195 Meudon, France

E-mail: Arnaud.Beck@obspm.fr, Filippo.Pantellini@obspm.fr

PACS numbers: 52.50.Jm, 5238.Kd, 52.65.Cc

Submitted to: *Plasma Phys. Control. Fusion* (Version: 18 September 2008)

Abstract. We present a self similar three dimensional and spherically symmetric fluid model of the expansion of an either globally neutral or globally charged collisionless plasma into vacuum. As in previous works by other authors the key parameter of the model is the ratio of the electron Debye length to the radius R of the expanding ion sphere. The main difference with respect to the recently published model of Murakami and Basko [1] is that the electron temperature is spatially non uniform. The major consequence of the spatial variability is that the self-similar solution is characterized by the presence of a sharp electron front at some finite distance ahead of the ion front. Explicit analytic expressions for the self-similar profiles of the ion and electron densities, the electron temperature and the heat flux are given for the region inside the ion front. The model is shown to be in good qualitative agreement with results from ab initio plasma simulations.

1. Introduction

Plasmas freely expanding into vacuum are commonly observed in the astrophysical context. Examples are the negatively charged dust particles in cometary tails expanding into the interplanetary space [2, 3] or the expansion of the solar wind plasma into the wake region of inert objects such as asteroids or the moon [4]. Besides the astrophysical studies, most of the material on freely expanding plasmas has been published in the context of laser-matter generated plasmas [5, 6, 7, 8] or discharge generated plasmas [9]. During the last decade, the particular case of the collisionless spherical expansion has focused attention after the experimental confirmation that the irradiation of small cluster of deuterium atoms with high intensity laser pulses can produce a sufficiently large number of up to MeV ions for efficient fusion reactions to occur [10]. In a typical laser-cluster fusion experiment all, or just a fraction of the electrons are instantly stripped from the cluster atoms or molecules and heated to up to keV energies by the laser field [11, 10, 6]. The heated electrons depart from the cluster leaving a clump of positively charged ions which become accelerated under the action of their mutual electrostatic repulsion. To lowest order, the spatial structure of the expanding plasma consists in two distinct regions. An inner region (the ion sphere), surrounding the expansion centre, where both ions and electrons are present, and an outer region, populated by electrons only [12, 1, 13]. The detailed structure is generally more complex, especially in the case of large clusters where the initial heating is spatially non uniform. In this case a two-component electron distribution and intricate spatial and temporal structures of the expanding plasma are expected [14, 15]. As shown in [6, 16] the minimum cluster size for a two-component electron distribution to form is a function of the cluster's chemical composition and of the lasers' characteristics.

Numerical studies have shown that even in the most simple case with only one single Maxwellian electron population the initial evolution of the system is characterized by wave steepening of the ion fluid velocity profile with associated formation of a peaked ion front and development of plasma microinstabilities as the ion velocity becomes multi-valued [17, 18]. Thus, as first pointed out on theoretical grounds in [17] and subsequently observed in plasma discharge experiments [9], the late time (self-similar) ion density profile is sometimes expected to be smoothed out by the microinstabilities at the ion front. Recent two and three-dimensional kinetic simulations [14, 13] have also pointed out how critically the expanding plasma depends on the characteristics of the laser pulses used to heat the electrons. However, a model is only useful if it is simple and if it contains all of the fundamental ingredients of the problem. We therefore restrict our model to the case of one single, not necessarily isothermal electron fluid, and an infinitely steep ion front. The model describes the self-similar expansion of one single, spherically symmetric plasma plunged in an infinite empty volume. As already pointed out in [17] it is expected that the expansion is self-similar when the radius of the expanding plasma bubble largely exceeds the initial radius of the bubble, i.e. after a time long enough for the memory of the initial conditions to be lost. Ions are assumed to be cold with

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

3

a discontinuous ion-front while the electrons' density and temperature are related to each other by a simple polytropic law. The ion and electron fluid velocities are assumed to be shear-free, meaning that they vary linearly with the distance from the expansion centre [19]. The linear variation of the fluid velocity with respect to the radial distance is necessary condition for the solution to be self-similar unless some special conditions are assumed near the expansion centre [20].

The self-similar solution we propose differs from previously published self-similar solutions [1, 8] in that the electrons are not assumed to be spatially isothermal, in accordance with results from two dimensional PIC simulations [14] and our N -body simulation of Section 3. The implications of a spatially varying electron temperature is that the electron heat flux is finite with energy flowing towards the expansion centre. In addition, the electron density drops to zero at some distance ahead of the ion front while it extends to infinity in the Murakami and Basko model. For completeness, we note that self-similar isothermal solutions similar to the one discussed in [1, 8] but with a moving inner boundary, have been published in [21, 22, 20].

The paper is divided into two main sections. In section 2 we present the complete theory of the self-similar model. In section 3 we compare the model with results from a numerical N -body simulation.

2. Self-similar two fluid model

We describe the self-similar expansion of a plasma into vacuum within the context of a two species (ions and electrons) spherically symmetric fluid model. The main difference with respect to the self-similar model of Murakami and Basko [1] is that the electron temperature is not assumed to be spatially uniform. The spatial dependence of the electron temperature being confirmed by the case simulation presented in section 3. As in the Murakami and Basko model we do consider the limit where the thermal energy of the electron fluid is much larger than the thermal energy of the ion fluid (cold ion limit).

2.1. Basic assumptions and equations

In this section, for the sake of completeness and to avoid ambiguities, we do briefly present the definitions and assumptions whereon our model is based.

2.1.1. Definition of the plasma We consider a non magnetized two species collisionless electron-ion plasma with an electron to ion mass ratio $m_e/m_i \ll 1$. For simplicity we assume single ionized ions with charge $q_i = e$ (e is the elementary charge) the generalization to higher ionization levels being a trivial extension of the model.

2.1.2. Fluid equations The collisionless hypothesis allows the systematic construction of fluid equations by computing the velocity moments of Vlasov's equation [23].

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

4

Assuming spherical symmetry, and postulating isotropic velocity distribution functions, the order zero and order one velocity moments of the non relativistic Vlasov equation for species $j = i, e$ (ions and electrons) lead to the continuity and momentum equations in the form

$$\frac{\partial n_j}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 n_j v_j) = 0 \quad (1)$$

$$\varrho_j \left(\frac{\partial v_j}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_j}{\partial r} \right) = - \frac{\partial p_j}{\partial r} + n_j q_j \mathcal{E} \quad (2)$$

where n_j , $\varrho_j \equiv m_j n_j$, v_j and p_j are the number density, the mass density, the fluid velocity and the pressure for species j . As usual, the electric field \mathcal{E} appearing in the momentum equation is implicitly determined by the spatial distribution of ions and electrons via Poisson's equation

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \mathcal{E}) = 4\pi e (n_i - n_e). \quad (3)$$

The system of fluid equations is closed with a barotropic equation of state for the electrons

$$p_e = p_e(\varrho_e) = A \varrho_e^\gamma. \quad (4)$$

and $p_i = 0$ for the ions. As already pointed out in [1] the only choice for the polytropic index which is compatible with a self-similar solution of the equations is $\gamma = \frac{4}{3}$, unless the plasma is quasi-neutral in all points of space, as for the self-similar solutions proposed in [18]. We discuss this point in more details in section 2.2.

2.1.3. Shear-free flow In addition to the spherical symmetry of the flow we postulate it to be shear-free. As shown in [19] the shear-free hypothesis implies that the fluid velocity v_j must be a linear function of the radial coordinate r multiplied by an arbitrary function of time $H_j(t)$, i.e. $v_j = r H_j(t)$. Of course shear-free flows are a rather restrictive class of spherically symmetric flows. For example, it has been first pointed out in [17] for the quasi-neutral planar case and more recently in [24, 13] for the so-called Coulomb explosion, the case where the totality of the electrons can escape from the cluster, that for non uniform initial ion densities the ion velocity profile inevitably steepens until it becomes multiple-valued and potentially unstable to plasma microinstabilities. The shear-free assumption may still be pertinent for the late time evolution of the system when the volume occupied by the expanding plasma greatly exceeds the initial volume, and all wave activity has been damped out through wave-particle interactions.

The consequence of the shear-free flow assumption is that the continuity equation (1) reduces to

$$\frac{\partial \tilde{n}_j}{\partial t} + r H_j \frac{\partial \tilde{n}_j}{\partial r} = 0, \quad \text{with } \tilde{n}_j \equiv n_j r^3 \quad (5)$$

whose general solution is $\tilde{n}_j = \tilde{n}_j(r/R_j)$ where the spatial scale R_j is a function of time such that $H_j = \dot{R}_j/R_j$, where overdots represent the time derivative d/dt . Thus,

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

5

assuming flow velocities of the type

$$v_j = r \frac{\dot{R}_j}{R_j} \equiv \xi_j \dot{R}_j \quad (6)$$

ensures both, that the flow is shear-free, and that the continuity equation (1) is identically satisfied for any density profile $\tilde{n}_j = \tilde{n}_j(\xi_j)$ where $\xi_j = r/R_j$ is the self-similar coordinate for species j . We conclude this section by noting that velocity profiles that are not linear in r can lead to self-similar solutions in a limited region of space. For example, in [20] the fluid velocity is assumed to be zero at an inner boundary $r = r_0 > 0$.

2.1.4. Zero electron-ion drift velocity In the previous section we did not put any constraints on the temporal evolution of the scaling lengths R_j . However, because of the electrostatic coupling between species, we do not expect ions and electrons to evolve on different scales. We then postulate the same scaling length $R(t) \equiv R_i = R_e$ for both species, which is equivalent to assuming equal fluid velocities $v \equiv v_e = v_i$. The overall fluid motion for both ions and electrons is therefore a function of just one single scaling length R :

$$v = \xi \dot{R}. \quad (7)$$

For example, the zero drift assumption implies that the density ratio n_i/n_e at the self-similar position $\xi = r/R$ does not change in time.

2.1.5. Cold ions approximation Given the zero drift hypothesis $v_e = v_i$ and assuming that the ion pressure term $\varrho_i^{-1} \partial p_i / \partial r$ is small compared to the electron pressure term $\varrho_e^{-1} \partial p_e / \partial r$, it follows from (2) that the electric field within the ion sphere, where both electrons and ions coexist, only depends on the spatial variation of the electron pressure:

$$\frac{e\mathcal{E}}{m_e} = -\frac{m_i}{m_e + m_i} \frac{1}{\varrho_e} \frac{\partial p_e}{\partial r} \approx \frac{1}{\varrho_e} \frac{\partial p_e}{\partial r} \quad (8)$$

Using the above expression for the electric field, instead of Poisson's equation (3), does considerably simplify the electron momentum equation within the ion sphere leading to simple analytic expressions for the density and temperature profiles in that particular region.

2.2. Plasma structure inside of the ion sphere

We chose the ion front to be located at $r = R(t)$, or, in terms of the self-similarity variable ξ , at $\xi = 1$. All of the ions are therefore located within the spherical volume $\xi \leq 1$ where the electric field is given by equation (8). Substituting this expression for the electric field in the momentum equation for the electrons (2) leads to the simpler form

$$\varrho_e \left(\frac{\partial v_e}{\partial t} + v_e \frac{\partial v_e}{\partial r} \right) = -\alpha \frac{\partial p_e}{\partial r} \quad (9)$$

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

6

where we have defined the small, dimensionless variable $\alpha \equiv m_e/(m_e + m_i) \approx m_e/m_i$. Using the barotropic closure (4) and the shear-free flow (7) one can write (9) in terms of a differential equation for the dimensionless electron density $N_e \equiv n_e R^3 = \tilde{n}_e/\xi^3$:

$$N_e \xi \ddot{R} R^2 = -\alpha \gamma A (N_e m_e)^{\gamma-1} R^{-3\gamma+4} \frac{\partial N_e}{\partial \xi}. \quad (10)$$

The general solution of this equation is not self-similar as it depends explicitly on the spatial scale R . However, one can make the left-hand side of equation (10) independent of R by setting $\ddot{R} R^2 = k_1$. The meaning of the constant k_1 becomes clear immediately by noting that in a self-similar solution the net charge of the plasma within an arbitrary sphere of radius ξ must be constant in time. Thus, if $Q(\xi)$ is the net charge within a sphere of radius ξ we can write the momentum equation (2) for the ions as

$$m_i \xi \ddot{R} R^2 = e \frac{Q(\xi)}{\xi^2}. \quad (11)$$

and consequently $k_1 = e Q_1 / m_i$ is just a measure of the net charge $Q_1 \equiv Q(1)$ of the ion sphere $\xi \leq 1$. The explicit dependence on the spatial scale R in the right-hand side of equation (10) is then easily eliminated by setting $\gamma = \frac{4}{3}$ leading to the simple equation

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{N_e}{N_1} \right) = -k_2 (1 + \alpha) \xi \left(\frac{N_e}{N_1} \right)^{2/3} \quad (12)$$

where $N_1 = N_e(1)$ is a reference density which we chose to be the electron density at the edge of the ion sphere and where k_2 is a dimensionless parameter denoting the relative importance of electrostatic and kinetic energy of an electron at $\xi = 1$

$$k_2 \equiv \frac{3}{4} \frac{e Q_1}{R} \frac{1}{k_B T(1)}. \quad (13)$$

In (13) k_B is the Boltzmann constant and $T(1)$ the electron temperature at $\xi = 1$. As k_2 is not allowed to vary in time we deduce that in the self-similar solution the electron temperature goes as $T(\xi) = T_0(\xi) R_0 / R$ and where the index 0 refers to time $t = 0$ (also see [1]).

2.2.1. Electron density profile inside of the ion sphere The solution of equation (12) is a simple polynomial

$$\begin{aligned} \frac{N_e}{N_1} &= \left[1 - \frac{k_2}{6} (1 + \alpha) (\xi^2 - 1) \right]^3 \\ &\approx \left[1 - \frac{k_2}{6} (\xi^2 - 1) \right]^3. \end{aligned} \quad (14)$$

The smaller k_2 , i.e. the hotter the plasmas, the flatter the electron density profile. A schematic representation of the electron density profile in the inner region is shown in figure 1.

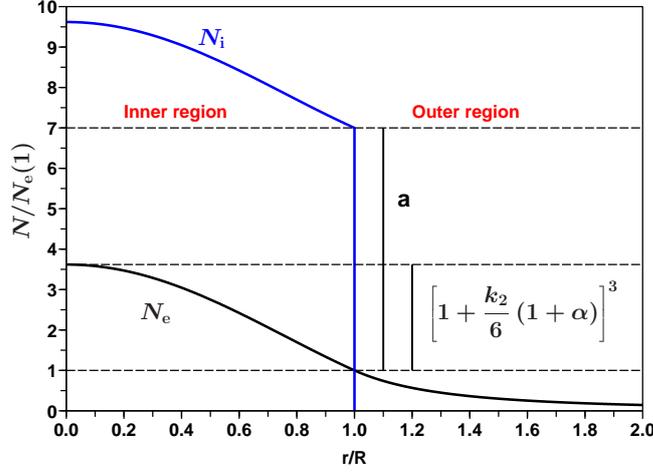


Figure 1. Dependence of the ion and electron density profiles on the parameters a and k_2 . The departure from charge neutrality in the inner region is specified by the parameter $a = [N_i(1) - N_e(1)]/N_e(1)$ and the curvature of the density profiles near $r = 0$ by k_2 . As shown in section 2.3, the parameters a and k_2 are not independent of each other.

2.2.2. Electric field and ion density profiles inside the ion sphere The electric field in the inner region is given by equation (8), together with the polytropic approximation $p_e \propto \varrho_e^{4/3}$ and the equation for the electron density (14). Not considering the constant factors one then easily finds that the $r^2 \mathcal{E} \propto \xi^3$. With Q_1 being the net charge of the ion sphere, the electric field at $\xi = 1$ is just $\mathcal{E}(1) = eQ_1/R^2$ and the electric field in the inner region must be

$$E(\xi \leq 1, t) = \frac{Q_1}{R(t)^2} \xi. \quad (15)$$

We note that the electric field always peaks at the edge of the ion sphere ensuring that any given ion is always less accelerated than all ions ahead of it. Thus, as it must necessarily be, no ion overtaking occurs during the self-similar phase of the expansion. Ion overtaking is nevertheless a common event during the early, non self-similar phase of the expansion, unless very special initial conditions are chosen such that the electric field increases monotonically from $r = 0$ to $r = R$ [24, 13].

In order to compute the ion density we multiply Poisson's equation (3) by R^3 and rewrite it in terms of the self-similar variable ξ

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (r^2 \mathcal{E}) = 4\pi e \xi^2 (N_i - N_e). \quad (16)$$

Since $r^2 \mathcal{E} \propto \xi^3$ it follows that $N_i - N_e$ is a constant:

$$\frac{N_i(\xi)}{N_1} = \frac{N_e(\xi)}{N_1} + a, \quad \text{for } \xi \leq 1 \quad (17)$$

where, as before, $N_1 = N_e(1)$ and where the constant $a = 3Q_1/(4\pi e N_1)$ is settled by the constraint that the net charge in the ion sphere is $Q_1 = \int_0^1 dx 4\pi x^2 (N_i - N_e)$. The

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

8

dimensionless constant a can therefore be interpreted as the relative departure from charge neutrality at $\xi = 1$, i.e. $a = [N_i(1) - N_e(1)]/N_e(1)$ (see figure 1).

2.3. Structure of the plasma outside of the ion sphere

The region $\xi > 1$ is populated by electrons only. The electric field for this region is obtained by integration of the Poisson equation (16) with $N_i = 0$

$$\mathcal{E}R^2 = \frac{1}{\xi^2} \left(Q_1 - 4\pi e \int_1^\xi dx x^2 N_e(x) \right). \quad (18)$$

Plugging this expression for the electric field into the electron momentum equation (2) for $j = e$ conducts to the integro-differential equation for the electron density in the region ahead of the ion sphere

$$\frac{1}{N_1^{1/3}} \frac{N_e'}{N_e^{2/3}} = -k_2 \left[\alpha\xi + \frac{1}{\xi^2} \left(1 - \frac{3}{aN_1} \int_1^\xi dx x^2 N_e(x) \right) \right] \quad (19)$$

where the prime symbol $'$ stands for the derivative with respect to the self-similar variable $\partial/\partial\xi$. Equation (19) must be integrated numerically. We used a standard adaptive Runge-Kutta solver for all figures of the paper. However, even without performing the integration, the equation tells us that the electrons extends to a maximum radial distance ξ_f . For example, in the particular case of overall neutral plasma, for $\xi \rightarrow \infty$ the second term on the right-hand side of (19), which is essentially the electric field, must vanish. In this case, sooner or later, it must be that the electron density decreases as $N_e \propto -\xi^6$ which necessarily implies $N_e = 0$ for a finite value of ξ . Knowing that both the density and the electric field vanish at some finite distance $\xi = \xi_f$ (the electron front) we conclude that at that particular distance $N_1^{-1/3} N_e'/N_e^{2/3} = -k_2 \alpha \xi_f$ and that therefore in the vicinity of ξ_f the density rapidly falls off as $N_e \propto (\xi_f - \xi)^3$. This is an important difference with respect to the infinite electron precursor of the Murakami and Basko model [1].

Equation (19) is a function of two constants a and k_2 which are apparently independent of each other. However, if one assumes that the electron density is not discontinuous in $\xi = 1$ so that $N_e(1^+)/N_1 = 1$ can be used as a boundary condition, the two constants a and k_2 are constraint by the requirement that the electric field and the density both vanish at $\xi = \xi_f$. The former condition implies that $3(aN_1)^{-1} \int_1^{\xi_f} dx x^2 N_e(x) = 1$. The $k_2(a)$ dependence for an overall neutral plasma and an electron to ion mass ratio $\alpha = 1/50$ is graphically illustrated in figure 2. The fact that a and k_2 are not independent shows that for a given choice of the charge separation parameter a there is only one possible choice of the parameter k_2 such that the electron density and the electric field both vanish at exactly the same position ξ_f . Thus, the behaviour of the system depends on the value of one single dimensionless parameter. For coherence with previous works on the subject [1, 13] we use a combination of a and k_2 to define the key parameter

$$\Lambda^2 \equiv \frac{a}{4k_2} = \left[\frac{\lambda_{D1}}{R} \right]^2 \quad (20)$$

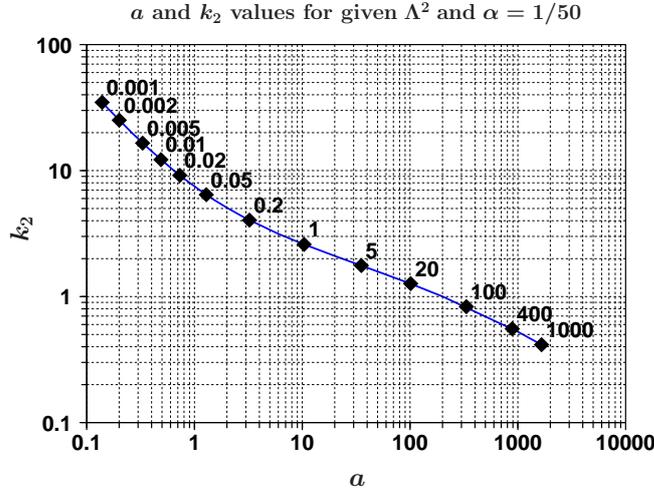


Figure 2. Relation between the parameters a , k_2 and $\Lambda^2 \equiv (\lambda_{D1}/R)^2$ for an overall neutral plasma and $\alpha = 1/50$ obtained by numerically solving the differential equation for the electron density ahead of the ion front (19).

where $\lambda_{D1} = [kT(1)/4\pi e^2 n_e(1)]^{1/2}$ is the electron Debye length at the ion front $\xi = 1$. An additional parameter is required if the plasma of the self-similar solution is not globally neutral (see section 2.3.1).

Two examples illustrating a moderate and a strong charge separation, respectively, are shown in figure 3. As the charge separation grows with growing temperature we may class the two examples as mild and hot, respectively. Not surprisingly, the electrons being less coupled to the ions in the hot case (right panels) the electron precursor extends to a significantly larger distance ahead of the ion front with an overall flatter density profile. In figure 4 the profiles for 4 different values of Λ^2 are shown starting from a quasi-neutral (mild) case with $\Lambda^2 = 0.02$ where electrons hardly detach from the ion sphere up to the hot case with $\Lambda^2 = 3$ which already resembles to a Coulomb explosion [13].

2.3.1. Overall charged plasma In the previous section we considered the case of an overall neutral plasma, i.e. a plasma where the total number of ions \mathcal{N}_i equals the total number of electrons \mathcal{N}_e . However, in some experiments (real or numerical), as in the numerical simulation presented in the Section 3, a non negligible fraction of electrons may be sufficiently energetic to become completely decoupled from the ion sphere. These electrons do essentially conserve their original speed and their evolution is trivial. Only the electrons which remain coupled to the ions do then participate to the self-similar evolution of the remnant which is not necessarily globally neutral.

If we assume that the plasma remnant's global charge is $Q_f \equiv e(\mathcal{N}_i - \mathcal{N}_e)$, one has to integrate equation (19) under the condition that the electric field at the electron front is just $E(r_f) = Q_f/r_f^2$ which corresponds to let $(\dots) \rightarrow Q_f/Q_1$ for

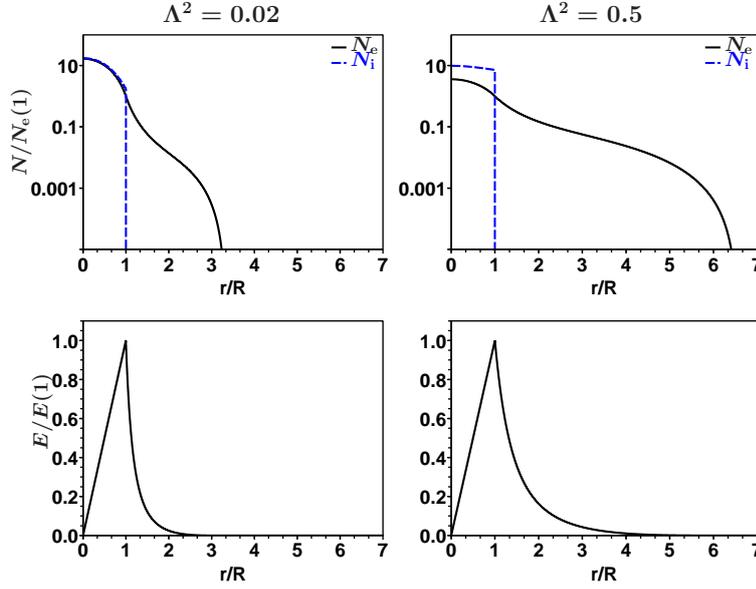


Figure 3. Electron and ion density profiles (top panels) and electric field profiles for two different values of Λ^2 . The left panels correspond to a quasi-neutral (mild) case with $\Lambda^2 = 0.02$. The right panels correspond to a strongly non neutral (hot) case with $\Lambda^2 = 0.5$.

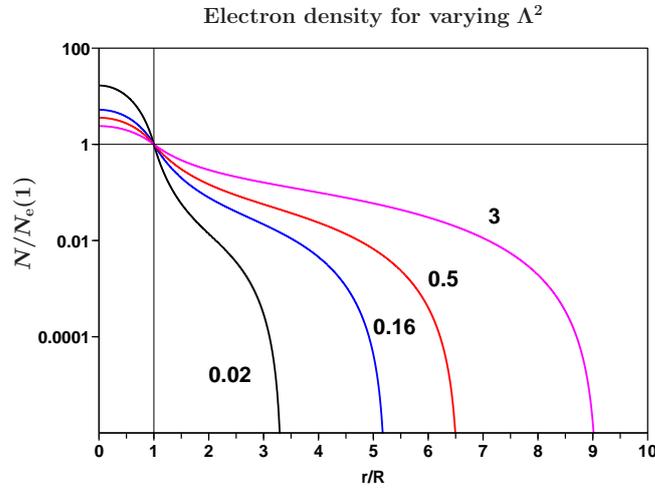


Figure 4. Electron density profiles for an overall neutral plasma and various values of Λ^2 . The electron to ion mass ratio is $\alpha = 1/50$ for this figure and for all figures in the paper.

$\xi \rightarrow \xi_f$ in (19). Near the electron front, the differential equation (19) reduces to $N_1^{-1/3} N_e' / N_e^{2/3} = -k_2 [\alpha \xi_f + \xi_f^{-2} Q_f / Q_1]$ while the electric field is $E(\xi_f) / E(1) = \xi_f^{-2} Q_f / Q_1$. Thus, in the charged case, as in the neutral case discussed in the previous section, the electron density decreases as $N_e \propto (\xi_f - \xi)^3$ for $\xi \rightarrow \xi_f$. In figure 5 the self-similar profiles for a neutral plasma (left panels) and a charged plasma (right panels) are shown. Both

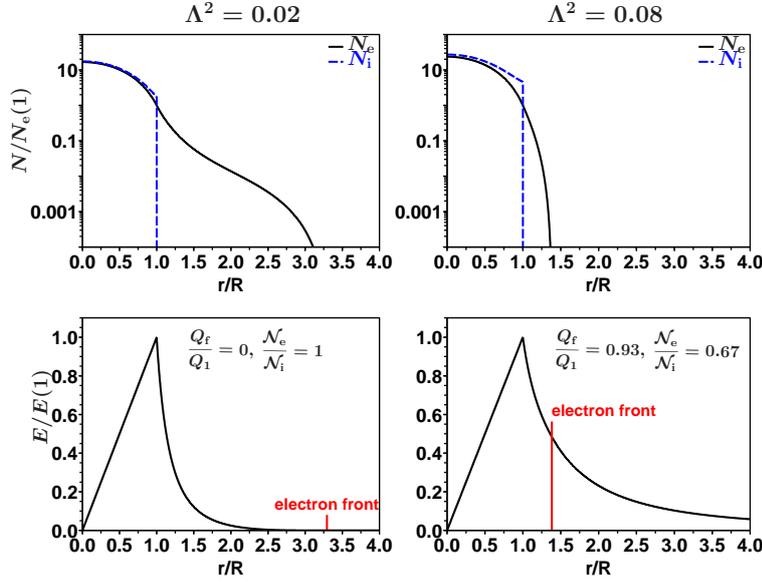


Figure 5. Electron and ion density profiles (top panels) and electric field profiles for two different values of the total charge Q_f/Q_1 and Λ^2 . The total number of electrons in the charged system is only 67% of the total number of ions so that the electric field is not zero at the electron front. In the neutral case $\Lambda^2 = 0.02$ with $(a, k_2) = (0.73, 9.16)$ (left panels) while for the charged case $\Lambda^2 = 0.08$ with $(a, k_2) = (3.6, 11)$ (right panels). The electron front is much closer to the ion front in the charged case, despite being characterized by a larger value of Λ . These two particular examples are discussed further in connection with the numerical simulation of section 3.

cases are rather mild with ($\Lambda^2 = 0.02$ and $\Lambda^2 = 0.08$ respectively). In the charged case, the total number of electrons is only 2/3 of the total number of ions. Not surprisingly, the electron front is substantially closer to the ion front in the charged case compared to the neutral case because of the missing electrons. The k_2 parameter being larger in the charged case, both the ion and electron densities decrease faster in the charged case than in the neutral case, even though the latter is the coldest of the two. The plasma parameters for the two examples in figure 5 have been chosen for the ion density profiles to fit the density profile of the case simulation presented in section 3.

2.4. Ion front motion

The position of the ion front $R(t)$ can be computed explicitly from the equation of motion by integrating the condition $\dot{R}R^2 = k_1 = eQ_1/m_i$ which expresses the conservation in time of the net charge of the ion sphere. Thus, the differential equation for $R(t)$ can be written in the form

$$\dot{R}^2 = -2\frac{k_1}{R} + V_\infty^2 \quad (21)$$

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

12

where V_∞ is to the asymptotic velocity of the ion front. If we assume that the ion front is initially at rest, then $V_\infty^2 = 2k_1/R_0$ and therefore

$$\dot{R}^2 = V_\infty^2 \left(1 - \frac{R_0}{R}\right). \quad (22)$$

Multiplying equation (22) by $(R_0\omega_{e,1})^{-1}$, where $\omega_{e,1} = [4\pi e^2 n_e(1)/m_e]^{1/2}$ is the electron plasma frequency at $\xi = 1$, leads to the differential equation in the normalized time variable $\tilde{t} \equiv t\omega_{e,1}$ and the normalized ion front position $\tilde{R} \equiv R/R_0$

$$\frac{d\tilde{R}}{d\tilde{t}} = \left(\frac{2a\alpha}{3}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{1}{\tilde{R}}\right)^{1/2} \quad (23)$$

whose solution is

$$\tilde{t} \left(\frac{2a\alpha}{3}\right)^{1/2} = \left[\tilde{R}(\tilde{R} - 1)\right]^{1/2} + \ln\left(\sqrt{\tilde{R}} + \sqrt{\tilde{R} - 1}\right). \quad (24)$$

We note that for $a \gg 1$ one has $\omega_{e,1}\sqrt{a\alpha} \approx \omega_{i,1}$ (see (17)) and (24) reduces to the expression given in [13] for the case of a pure Coulomb explosion. The solution (24) shows that the characteristic time scale for approaching the asymptotic velocity is of order of $(\omega_{e,1}\sqrt{a\alpha})^{-1}$ indicating that acceleration time and wave period of Langmuir oscillations near the ion front are of the same order for $\sqrt{a\alpha}$ of order unity.

2.5. Ion energy distribution

Using (15) the total (kinetic + electrostatic) energy of an ion at any position $\xi \leq 1$ can be written as

$$E = \frac{1}{2}m_i\xi^2\dot{R}^2 - \frac{1}{2}\frac{eQ_1}{R}\xi^2. \quad (25)$$

From the ion front equation of motion (21) and the equation for the electric field (15) one finds that the energy of an ion at position ξ grows in time as

$$E(\xi, t) = \left[\frac{1}{2}m_iV_\infty^2 - \frac{3}{2}\frac{eQ_1}{R(t)}\right]\xi^2. \quad (26)$$

approaching the asymptotic value $E(\xi) \approx \frac{1}{2}m_i\xi^2V_\infty^2$ for $t \rightarrow \infty$. Given that the ion density profile $N_i(\xi)$ is known through equations (17) and (14) the number of ions in the interval $[\xi, \xi + d\xi]$ (normalized to the total number \mathcal{N}_i) is explicitly given by

$$dN_i([\xi, \xi + d\xi]) = 4\pi\xi^2N_i(\xi^2)d\xi. \quad (27)$$

Using the energy-position relation (25) and the density distribution (27), one obtains the number of ions in the energy interval $[\tilde{E}, \tilde{E} + d\tilde{E}]$:

$$dN_i([\tilde{E}, \tilde{E} + d\tilde{E}]) = 2\pi\tilde{E}^{1/2}N_i(\tilde{E})d\tilde{E}. \quad (28)$$

where $\tilde{E} = E/E(1) = \xi^2$ is the energy of an ion at position ξ normalized to the energy of an ion at $\xi = 1$. The distribution $dN_i/d\tilde{E}$ of the ions kinetic energy in the system is shown in figure 6 for various values of Λ^2 .

We note that for $\Lambda^2 \gtrsim 0.2$ the distribution peaks at the maximum energy, corresponding to the contribution of the ions at $\xi = 1$. For $\Lambda^2 \lesssim 0.2$ the contribution

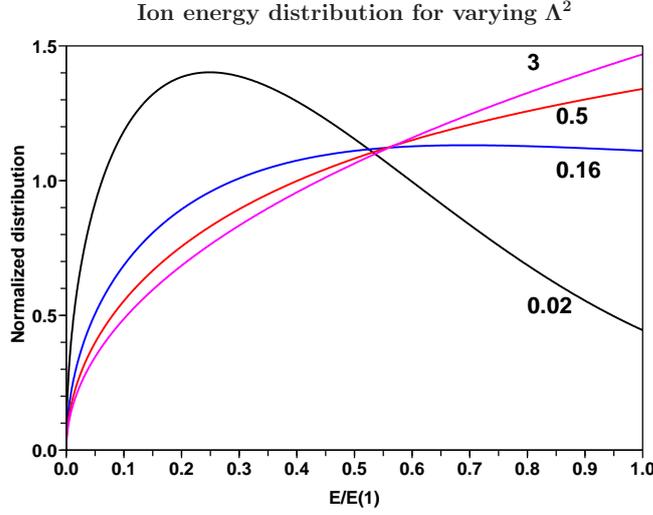


Figure 6. Ion energy distribution for $\alpha = 1/50$ and various values of Λ^2 . The figure is qualitatively similar to results from numerical simulations shown in figure 9 of [13].

from the ions near the front $\xi = 1$ is no longer dominant since their relative number decreases with decreasing Λ^2 as shown by equations (14) and (17) or even figure 4. The structure of the ion energy spectrum and its dependence on Λ^2 is qualitatively similar to the spectra in [25, 13].

2.6. Electron heat flux

In order to compute the heat flux q carried by the electrons we write the energy equation in Lagrangian form, derived from the collisionless Boltzmann equation, for a spherically symmetric flow and isotropic electron temperature [26]:

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial r} \right) = -\frac{T}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (vr^2) - \frac{1}{n_e k_B r^2} \frac{\partial}{\partial r} (qr^2) \quad (29)$$

The first term on the right corresponds to the cooling of the fluid element due to the expansion, the second term to the cooling (or heating) of the fluid element collisionless heat conduction. For a polytropic fluid with $T \propto n_e^{\gamma-1}$ equation (29) can be written in the form:

$$\frac{3}{2} \left(\frac{\gamma - \frac{5}{3}}{\gamma - 1} \right) n_e k_B \frac{DT}{Dt} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (qr^2) \quad (30)$$

where $D/Dt \equiv \partial/\partial t + v\partial/\partial r$ is the convective derivative. As expected, equation (30) shows that the electron heat flux vanishes when the polytropic index equals the adiabatic value $\gamma_{\text{ad}} = \frac{5}{3}$ and infinity for the isothermal index $\gamma = 1$. Since the spatial profiles of both density and temperature are flat near the expansion centre we find that the heat flux near the expansion centre is given by $q(r) \simeq \frac{1}{2} n_e k_B r \partial T / \partial t < 0$, indicating that energy is transported in the direction of decreasing r , i.e. in the direction of increasing temperature. The reason for this non intuitive behaviour is that the energy flux goes

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

14

from high to low entropy regions but not necessarily from regions of high to regions of low temperature. In general, in a collisional gas or in a fluid, temperature and entropy vary together and energy effectively flows down the temperature gradient. In the polytropic approximation entropy variations ds and temperature variations dT are related via [27]

$$\frac{ds}{\mathcal{R}} = \frac{3}{2} \left(\frac{\gamma - \frac{5}{3}}{\gamma - 1} \right) \frac{dT}{T} = -\frac{3}{2} \frac{dT}{T} \quad (31)$$

where \mathcal{R} is the gas constant and where $\gamma = \frac{4}{3}$ has been set. The entropy-temperature relation indicates that spatial and temporal variations of the electron temperature are opposite with respect to the spatial and temporal variations of the entropy. Thus, in the self-similar solution of the expansion problem, entropy increases spatially away from the expansion centre with a logarithmic divergence $s \propto -\ln(\xi_f - \xi)$ for $\xi \rightarrow \xi_f$. Similarly, in the central region, near $r = 0$, one has $\partial s / \partial t = -\frac{3}{2} \mathcal{R} \partial \ln T / \partial t > 0$. Entropy grows in time because the reduction of entropy due to cooling is more than compensated by the entropy increase due to the fluid expansion.

Specialising to shear-free flows $v = \xi \dot{R}$ with the self-similar polytropic index $\gamma = \frac{4}{3}$, the energy equation (30) simplifies to

$$\frac{3}{2} k_B T N_e \frac{\dot{R}}{R^3} = -\frac{1}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 q) \quad (32)$$

The left-hand side of this expression is strictly positive indicating that the heat flux is directed towards the expansion centre, against the temperature gradient, in all parts of the fluid. Equation (32) can be solved for the heat flux which after some rearrangements becomes

$$q(\xi, t) = -6\pi e^2 N_1^2 \Lambda^2 \frac{\dot{R}}{R^4} \frac{1}{\xi^2} \int_0^\xi \left[\frac{N_e(x)}{N_1} \right]^{4/3} x^2 dx. \quad (33)$$

This equation shows that at any given time t the energy $|4\pi\xi^2 R^2 q(\xi, t)|$ which flows towards the centre through the sphere of radius ξ increases monotonically with the distance ξ , reaching a maximum at the electron front $\xi = \xi_f$. The heat flux at any position ξ varies in time as $-\dot{R}/R^4$. Thus, according to (33), the heat flux, which is initially zero if the initial expansion velocity is assumed to be zero, first grows in time until it reaches a maximum intensity at the time when $R = \frac{9}{8} R_0$. At later times the heat flux intensity decreases everywhere monotonically and, in particular for $R \gg 1$, the expansion velocity can be assumed to be constant and $q \propto R^{-4} \propto t^{-4}$.

3. Ab initio simulation

In this section we present a numerical case simulation of a two species collisionless plasma expanding into vacuum. We use a slightly modified version of Walter Dehnen's non relativistic N -body code [28], initially conceived for gravitational problems. N -body simulations have the advantage of not resting on simplifying assumptions being merely based on Newton's second law of motion and Coulomb's law to compute the self-consistent evolution of a system of point charges. The major disadvantage of

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

15

N -body simulations, compared to either fluid [29, 30], semi-kinetic [13] or even fully kinetic simulations [31, 14, 4] resides in the computational difficulty to follow the plasma evolution over a sufficiently long physical time for the system to enter into a clean self-similar phase. The choice of an artificially small mass ratio m_i/m_e , necessary to keep the computational time within reasonable limits, is another drawback of the N -body simulations. On the other hand, N -body simulations are more realistic representations of collisionless systems with a small number of particles than ideal, noise-free, simulations based on the Vlasov-Poisson system. Strictly speaking the Vlasov-Poisson equations are only applicable to plasmas where the number of electrons within the Debye sphere tends to infinity. However, in real plasma-cluster experiments the number of atoms in a cluster is rather small, ranging between 10^3 [32] and 10^7 [6]. Accordingly, in the simulation of this section a total number of $1.5 \cdot 10^5$ ions and an equal number of electrons have been chosen. The parameter Λ having been selected in the the most interesting regime for numerical simulations $\Lambda = \mathcal{O}(0.1)$ (see Section 3.1), the expected number of electrons in Debye sphere is of order 10^2 . As explained in [33], the applicability of a Vlasov-Poisson model for a system with such a small number of particles is questionable since a non negligible fraction of orbits are expected to become chaotic, i.e. non reversible, during the time of the simulation. Thus, contrary to the prediction of the Vlasov-Poisson model, in the N -body and in the corresponding real system, the total Gibbs entropy is not constant but a growing function of time.

3.1. Plasma parameters and initial conditions

We simulate a total of $1.5 \cdot 10^5$ single ionized ions and an equal number of electrons. The ion to electron mass ratio is $m_i/m_e = 50$. Such a mass ratio is sufficiently large for the two fluid model of Section 2 to be applicable.

At $t = 0$ ions and electrons are distributed uniformly within a sphere of radius R_0 . Initially, all ions are motionless whereas the electrons's velocities are drawn following a Maxwell-Boltzmann distribution at temperature T_0 and zero bulk velocity.

The initial temperature T_0 and density $n_{i,0} = n_{e,0} = n_0$ are selected for the expansion to be in the mild regime with $\Lambda = \mathcal{O}(0.1)$, the hot case $\Lambda \gg 1$ corresponding to the Coulomb explosion and the cold case $\Lambda \ll 1$ to the quasi-neutral case.

The strong interaction radius $r_s \equiv e^2/3k_B T$, representing the characteristic distance for binary collisions, is taken to be much smaller than the ion sphere R and even much smaller than the average distance between electrons $n_e^{-1/3}$. The mean free path for a binary collisions of a test electron with another electron in the system can be estimated to be $\lambda_{ee,\text{bin}} = 1/n_e 4\pi r_s^2 = 9(k_B T)^2/4\pi e^4 n_e$. Using the definition of the key parameter $\Lambda^2 = k_B T R^{-2}/4\pi n_e e^2$, and the polytropic relation $T \propto N_e^{1/3}$, the normalized mean free path for binary collisions becomes

$$\frac{\lambda_{ee,\text{bin}}(\xi)}{R} = 36\pi\Lambda^4 N_e(1) \left[\frac{N_e(\xi)}{N_e(1)} \right]^{-4/3} \quad (34)$$

which shows explicitly that in the self-similar model the collisionality does not evolve

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

16

in time as the right-hand side of (34) is constant. In weakly coupled plasmas where the Coulomb logarithm $\ln(\lambda_D/r_s) \gtrsim 5$, binary collisions are unimportant compared to the cumulative effect of long distant interactions with impact parameters of the order $\lambda_D \gg r_s$. The mean free path can then be obtained in the Fokker-Planck approximation which is given, within a constant factor of order unity, by $\lambda_{ee,FP} \sim \lambda_{ee,bin} \ln^{-1}(\lambda_D/r_s)$ [34].

In the simulation the Coulomb logarithm is larger than unity, the density at the ion front $N_1 \approx 2 \times 10^3$ and the key parameter $\Lambda^2 \gtrsim 0.02$ (see figure 10). We can then make an estimate of the mean free path at the ion front $\lambda_{ee,FP}(1) \sim \lambda_{ee,FP}(1) \gtrsim 90R \gg R$. which confirms that the plasma is collisionless and that it can be treated in the frame of the collisionless fluid model of section 2.

3.2. Density and temperature profiles inside of the ion sphere

Figure 7 shows that the simulated ion density profile can be fairly well approximated using the self-similar density from (17) with $\Lambda^2 = 0.02$ and an overall neutral plasma. On the other hand, the electron density predicted by the model are substantially higher than the density observed in the simulation everywhere within the ion sphere. A much better agreement for both ion and electron densities can be obtained by assuming that the plasma is not globally neutral as shown in the right panel of Figure 7 where the total number of electrons is only 2/3 of the total number of ions and $\Lambda^2 = 0.08$. The fact that the non neutral model provides a better approximation is the consequence of a non negligible fraction of electrons having a sufficiently high initial energy to escape from the system keeping the memory of the initial condition which is not compatible with the self-similar solution. The flattening of the electron density profile from the simulation for $\xi \gtrsim 1.6$ is a trace of these escaping electrons which are even better visible in figure 9. Figure 9 also shows that some of the electrons located ahead of the ion front are falling back towards the ion sphere on time scales which are of the order of the simulation time. These slowly falling electrons do still carry the memory of the initial conditions and may not yet be entirely compatible with the asymptotic solution.

The small ion excess observed in the simulation when approaching the ion front is due to ion overtaking which has been shown to occur whenever the electric field maximum occurs in a region of decreasing ion density [24, 13].

In figure 8 the electron temperature profile at the end of the simulation is compared to the model predictions based on the same two sets of parameter used for figure 7. As already announced, the electron temperature measured in the simulation is strongly dependent on the spatial variable ξ despite having been uniform at $t = 0$. The agreement between simulation and model prediction is rather satisfactory for $\xi \lesssim 0.8$ for both the overall neutral and the overall charged case. In particular the convex shape of the temperature profile predicted by the theory is apparent in the simulated profile. The spike in the temperature near $\xi = 0.9$ is a transient feature due to the presence of counterstreaming electron beams. Indeed, as shown in figure 9, electron beams are

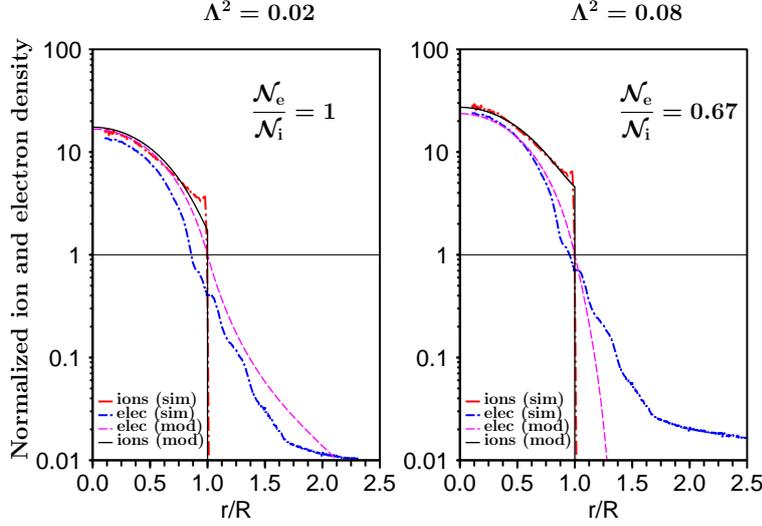


Figure 7. Rescaled density profiles for both ions and electrons from the simulation compared to model profiles. The model profiles in the left panel correspond to those of an overall neutral plasma and $\Lambda^2 = 0.02$. The model profiles in the right panel correspond to those of a globally charged plasma with $\Lambda^2 = 0.08$, and a total number of electrons \mathcal{N}_e which is only 67% of the total number of ions \mathcal{N}_i . The experimental profiles have been obtained by averaging the densities from the simulation during the time interval $7 \leq t\omega_{e0} \leq 41$ (see figure 9). The model densities have been normalized as to make the total number of ions in the simulation to be equal to the total number of ions in the model. All densities have been normalized to the model electron density $N_e(1)$ (see equation (14)).

sporadically expelled from the ion sphere. Most of these beams, except the very first one, are not energetic enough to escape and fall back into the ion sphere where they first appear as inward propagating beams and later, passed the pericentre, again as outward propagating beams.

3.3. Ion front expansion and electron density fluctuations

Figure 9 shows the electron density in arbitrary units and the position of the ion front as a function of time. Given the difficulty of predicting the value of Λ^2 based on the initial choice of the electron temperature we fit the ion front position using equation (24). The fit produces an estimate of the parameter a and, from which, using Figure 2, one deduces the value of the key parameter $\Lambda^2 = 0.08$ and the scaling of the time axis in terms of the electron plasma frequency.

The figure shows that regardless of the strong electron density fluctuations around the ion front, the latter closely follows the temporal evolution of equation (24). The time period of the electron density fluctuations near the ion are compatible with a period of the order $2\pi/\omega_e(1)$. The slowing down of the oscillation frequency with time is a consequence of the decreasing plasma frequency $\omega_e(t) \propto n_e^{1/2} \propto R^{-3/2}$. Individual

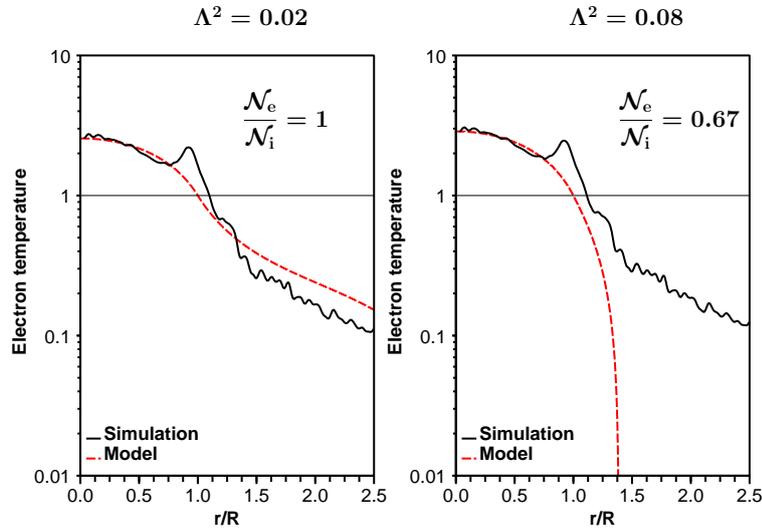


Figure 8. Electron temperature profiles at the end of the simulation compared to model profiles for an overall neutral model with $\Lambda^2 = 0.02$ (left panel) and for a globally charged plasma with $\Lambda^2 = 0.08$, and a total number of electrons which is only 0.67% of the total number of ions (right panels).

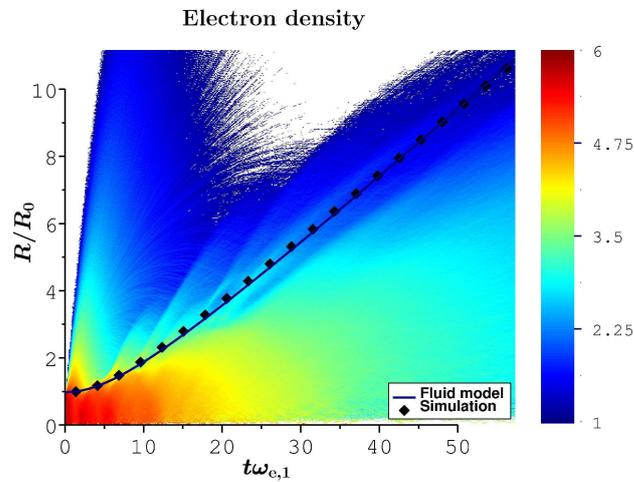


Figure 9. Logarithm of the electron density and ion front position measured in the simulation (diamonds). The $\tilde{R}(t)$ curve has been obtained by forcing the self-similar solution (24) to pass through the latest position of the ion front observed in the simulation with $\Lambda^2 = 0.08$ and $\alpha = 1/50$.

electron trajectories are visible in the upper part of the figure. Some electrons are clearly "falling" back onto the expanding ion sphere. However, a non negligible fraction of electrons, of the order of $\frac{1}{3}$ the total number, have a sufficiently high initial kinetic energy to freely escape from the system. In the long run, once the not bounded electrons

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

19

have escaped, the system does more likely evolve according to the self-similar solution of a charged plasma with $Q_f/Q_1 = 0.33$ as suggested by the good agreement between the profile from the simulation and the manual fit in the right panel of figure 7.

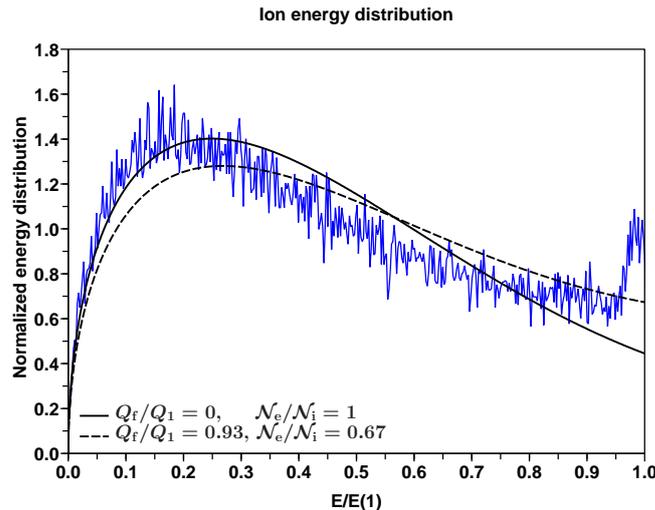
3.4. Ion energy distribution

Figure 10. Ion energy distribution at the end of the simulation compared to the energy distributions from the self-similar model for the neutral case with $\Lambda^2 = 0.02$ and the charged case with $\Lambda^2 = 0.08$ and $Q_f/Q_1 = 0.93$ corresponding to a plasma where the total number of electrons is 67% of the total number of ions.

The energy spectrum of the ions in the simulation is shown in figure 10 at the end of the simulation when the ion front velocity can be assumed to be constant and the electrostatic energy stored in the ions negligible. Also shown are the model energy distributions for the two sets of plasma parameters used for the two panels in figure 7. Both the charged and the neutral case do qualitatively agree with the distribution from the simulation. The main difference between simulation and model is the existence of a secondary peak in the ion energy distribution from the simulation. This secondary peak at the ion front is a remnant of the initial condition, due, at least in part, to ion overtaking as described in [24, 13]. Ion overtaking does also manifest itself with the formation of a peak in the ion density profile which is visible on the ion density profiles near $\xi = 1$ in figure 7. However, as shown in [20], a spike near the maximum energy can also be part of a self-similar solution by relaxing the zero velocity condition at $\xi = 0$.

4. Conclusions

We have presented a new spherically symmetric self-similar solution for the problem of the expansion of a collisionless, either globally neutral or globally charged plasma, into vacuum. The model is based on a two fluid system of equations derived from

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

20

the collisionless Boltzmann equation with a polytropic closure for the electrons and a zero temperature closure for the ions. The model is similar to the one recently published in [1] with the notable difference that electrons are non isothermal. The consequence is the appearance of a sharp electron front at some distance ahead of the ion front and an inwards directed heat flux. Analytic expressions for the ion and electron densities as well as for the electron heat flux and the ion energy distribution are given for the region inside the ion sphere. The self-similar solution has been found to be in good qualitative agreement with results from an ab initio numerical simulation. Longer simulations than the one presented are needed to establish if the self-similar solution is effectively an "attractor" for the late evolution of the system, when the memory of the initial conditions are lost. We note that the fluid model is based on the restrictive assumption that the radial and tangential temperatures of the electron fluid are equal. This condition is not necessarily satisfied in the collisionless limit where the pressure tensor can be anisotropic. Thus, an even better agreement between model and numerical simulations may be obtained by assuming a non isotropic pressure tensor for the electron fluid which is a current assumption in the context of solar wind modelling [26] possibly with a different equation of state for the radial and tangential directions. However, allowing for the pressure to be anisotropic does only make sense if some physical mechanism (e.g. plasma instability) triggering the degree of anisotropy has been previously identified.

We conclude by observing that the presented self-similar solution is expected to apply to the late expansion of a plasma resulting from the irradiation of small clusters of atoms where the totality of the electrons are heated to high energies independently of their original location within the cluster. The case of an expanding plasma with two distinct electron populations is certainly a more realistic representation of the case of large clusters [16, 15, 1] worth being addressed in a future publication. In this respect, we note that the two populations case with a mild, cluster bounded population, and a hot, escaping population, has already been discussed implicitly in Section 2.3.1 where we have treated the case of an overall charged plasma. The generalization of the solution to the case of two or more populations of electrons with different temperatures and densities should be straightforward and much easier to carry out than the more ambitious generalization to an anisotropic electron pressure tensor.

References

- [1] M. Murakami and M. M. Basko. Self-similar expansion of finite-size non-quasi-neutral plasmas into vacuum: Relation to the problem of ion acceleration. *Physics of Plasmas*, 13:2105–+, January 2006.
- [2] S. R. Pillay, S. V. Singh, R. Bharuthram, and M. Y. Yu. Self-similar expansion of dusty plasmas. *Journal of Plasma Physics*, 58:467–474, October 1997.
- [3] K. E. Lonngren. Expansion of a dusty plasma into a vacuum. *Planetary and Space Science*, 38:1457–1459, November 1990.
- [4] P. C. Birch and S. C. Chapman. Two dimensional particle-in-cell simulations of the lunar wake. *Physics of Plasmas*, 9:1785–1789, May 2002.

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

21

- [5] S. Ter-Avetisyan, M. Schnürer, H. Stiel, U. Vogt, W. Radloff, W. Karpov, W. Sandner, and P. V. Nickles. Absolute extreme ultraviolet yield from femtosecond-laser-excited Xe clusters. *Phys. Rev. E*, 64(3):036404–+, September 2001.
- [6] I. Last and J. Jortner. Tabletop Nucleosynthesis Driven by Cluster Coulomb Explosion. *Physical Review Letters*, 97(17):173401–+, October 2006.
- [7] P. Mora. Thin-foil expansion into a vacuum. *Physical Review E*, 72(5):056401–+, November 2005.
- [8] N. Qi and M. Krishnan. Experimental verification of a simple, one-dimensional model for the hydrodynamic expansion of a laser-produced plasma into vacuum. *Physics of Fluids B*, 1:1277–1281, June 1989.
- [9] G. Hairapetian and R. L. Stenzel. Particle dynamics and current-free double layers in an expanding, collisionless, two-electron-population plasma. *Physics of Fluids B*, 3:899–914, April 1991.
- [10] T. Ditmire, J. Zweiback, V. P. Yanovsky, T. E. Cowan, G. Hays, and K. B. Wharton. Nuclear fusion from explosions of femtosecond laser-heated deuterium clusters. *Nature*, 398:489–492, April 1999.
- [11] D. M. Villeneuve, G. D. Enright, R. Fedosejevs, M. D. J. Burgess, and M. C. Richardson. Energy partition in CO₂-laser-irradiated microballoons. *Physical Review Letters*, 47:515–518, August 1981.
- [12] P. Mora. Plasma Expansion into a Vacuum. *Physical Review Letters*, 90(18):185002–+, May 2003.
- [13] F. Peano, J. L. Martins, R. A. Fonseca, L. O. Silva, G. Coppa, F. Peinetti, and R. Mulas. Dynamics and control of the expansion of finite-size plasmas produced in ultraintense laser-matter interactions. *Physics of Plasmas*, 14:6704–+, May 2007.
- [14] Y. Kishimoto, T. Masaki, and T. Tajima. High energy ions and nuclear fusion in laser-cluster interaction. *Physics of Plasmas*, 9:589–601, February 2002.
- [15] B. N. Breizman and A. V. Arefiev. Ion acceleration by hot electrons in microclusters. *Physics of Plasmas*, 14(7):073105–+, July 2007.
- [16] B. N. Breizman, A. V. Arefiev, and M. V. Fomyts'kyi. Nonlinear physics of laser-irradiated microclusters. *Physics of Plasmas*, 12(5):056706–+, May 2005.
- [17] C. Sack and H. Schamel. Nonlinear dynamics in expanding plasmas. *Physics Letters A*, 110:206–212, July 1985.
- [18] C. Sack and H. Schamel. Plasma expansion into vacuum - A hydrodynamic approach. *Physics Reports*, 156:311–395, December 1987.
- [19] E. N. Glass. Newtonian spherical gravitational collapse. *Journal of Physics A Mathematical General*, 13:3097–3104, September 1980.
- [20] N. Kumar and A. Pukhov. Self-similar quasineutral expansion of a collisionless plasma with tailored electron temperature profile. *Physics of Plasmas*, 15(5):053103–+, May 2008.
- [21] R. F. Schmalz. New self-similar solutions for the unsteady one-dimensional expansion of a gas into a vacuum. *Physics of Fluids*, 28:2923–2925, September 1985.
- [22] R. F. Schmalz. Free unsteady expansion of a polytropic gas: Self-similar solutions. *Physics of Fluids*, 29:1389–1397, May 1986.
- [23] T. H. Stix. *Waves in plasmas*. American Institute of Physics Press, 1992.
- [24] A. E. Kaplan, B. Y. Dubetsky, and P. L. Shkolnikov. Shock Shells in Coulomb Explosions of Nanoclusters. *Physical Review Letters*, 91(14):143401–+, October 2003.
- [25] F. Peano, F. Peinetti, R. Mulas, G. Coppa, and L. O. Silva. Kinetics of the Collisionless Expansion of Spherical Nanoplasmas. *Physical Review Letters*, 96(17):175002–+, May 2006.
- [26] E. Endeve and E. Leer. Coronal heating and solar wind acceleration; gyrotopical electron-proton solar wind. *Solar Physics*, 200:235–250, May 2001.
- [27] L.D. Landau and E.M. Lifshits. *Fluid mechanics. 2nd ed. Volume 6 of Course of Theoretical Physics. Transl. from the Russian by J. B. Sykes and W. H. Reid*. Pergamon Press, 1987.
- [28] W. Dehnen. A hierarchical $\mathcal{O}(N)$ Force Calculation Algorithm. *Journal of Computational Physics*, 179:27–42, June 2002.

Spherical expansion of a collisionless plasma into vacuum

22

- [29] C. Sack and H. Schamel. SUNION-An Algorithm for One-Dimensional Laser-Plasma Interaction. *Journal of Computational Physics*, 53:395–+, March 1984.
- [30] H. Schamel. Lagrangian fluid description with simple applications in compressible plasma and gas dynamics. *Physics Reports*, 392:279–319, March 2004.
- [31] T. Grismayer, P. Mora, J. C. Adam, and A. Héron. Electron kinetic effects in plasma expansion and ion acceleration. *Physical Review E*, 77(6):066407–+, June 2008.
- [32] T. Ditmire, J. W. G. Tisch, E. Springate, M. B. Mason, N. Hay, J. P. Marangos, and M. H. R. Hutchinson. High Energy Ion Explosion of Atomic Clusters: Transition from Molecular to Plasma Behavior. *Physical Review Letters*, 78:2732–2735, April 1997.
- [33] H. E. Kandrup, I. V. Sideris, and C. L. Bohn. Chaos and the continuum limit in charged particle beams. *Physical Review Special Topics Accelerators and Beams*, 7(1):014202–+, January 2004.
- [34] J.D. Huba. *NRL Plasma Formulary*. Naval Research Laboratory, Washington, DC, 2006.

Bibliographie

- [1] J.E. Barnes and P. Hut. A hierarchical $O(N\log N)$ Force Calculation Algorithm. *Nature*, 324 :446–449, December 1986.
- [2] A. Beck and N. Meyer. The trajectory of an electron in a plasma. *Am. J. Phys.*, under press 2008.
- [3] P. C. Birch and S. C. Chapman. Two dimensional particle-in-cell simulations of the lunar wake. *Physics of Plasmas*, 9 :1785–1789, May 2002.
- [4] T. C. Bishop, D. S. Robert, and R. D. Skeel. Difficulties with Multiple Time Stepping and Fast Multipole Algorithm in Molecular Dynamics. *J. Comput Chem.*, 18 :1785–1791, December 1998.
- [5] W. Dehnen. Towards optimal softening in three-dimensional N-body codes. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 324 :273–291, June 2001.
- [6] W. Dehnen. A hierarchical $O(N)$ Force Calculation Algorithm. *Journal of Computational Physics*, 179 :27–42, June 2002.
- [7] T. Ditmire, J. Zweiback, V. P. Yanovsky, T. E. Cowan, G. Hays, and K. B. Wharton. Nuclear fusion from explosions of femtosecond laser-heated deuterium clusters. *Nature*, 398 :489–492, April 1999.
- [8] E. Endeve and E. Leer. Coronal heating and solar wind acceleration ; gyrotropic electron-proton solar wind. *Solar Physics*, 200 :235–250, May 2001.
- [9] E. N. Glass. Newtonian spherical gravitational collapse. *Journal of Physics A Mathematical General*, 13 :3097–3104, September 1980.
- [10] A. E. Kaplan, B. Y. Dubetsky, and P. L. Shkolnikov. Shock Shells in Coulomb Explosions of Nanoclusters. *Physical Review Letters*, 91(14) :143401–+, October 2003.
- [11] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics*, volume 2. Pergamon Press, Oxford, England, 1 edition, 1960.

-
- [12] C. Li and R.D. Petrasso. Fokker-planck equation for moderately coupled plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 70 :3063–3066, May 1993.
- [13] J.F. Luciani and P. Mora. Nonlocal heat transport due to steep temperature gradients. *Phys. Rev. Lett.*, 51 :1664–1667, October 1983.
- [14] JR. Lyman Spitzer. *Physics of Fully Ionized Gases 2nd. ed.* John Wiley & Sons, 1962.
- [15] N. Meyer-Vernet. *Basics of the Solar Wind.* Cambridge University Press, Cambridge, England, 2007.
- [16] P. Mora. Plasma Expansion into a Vacuum. *Physical Review Letters*, 90(18) :185002–+, May 2003.
- [17] M. Murakami and M. M. Basko. Self-similar expansion of finite-size non-quasi-neutral plasmas into vacuum : Relation to the problem of ion acceleration. *Physics of Plasmas*, 13 :2105–+, January 2006.
- [18] F. Peano, J. L. Martins, R. A. Fonseca, L. O. Silva, G. Coppa, F. Peinetti, and R. Mulas. Dynamics and control of the expansion of finite-size plasmas produced in ultraintense laser-matter interactions. *Physics of Plasmas*, 14 :6704–+, May 2007.
- [19] S. Pfalzner and P. Gibbon. A 3D hierarchical tree code for dense plasma simulation. *Computer Physics Communications*, 79 :24–38, February 1994.
- [20] S. R. Pillay, S. V. Singh, R. Bharuthram, and M. Y. Yu. Self-similar expansion of dusty plasmas. *Journal of Plasma Physics*, 58 :467–474, October 1997.
- [21] Quinn, T.,Katz, N., Stadel, J. and Lake, G. Time stepping N-body simulations. *arXiv :astro-ph/9710043*, 1997.
- [22] S.A. Rodionov and N.Ya. Sotnikova. Optimal Choice of the Softening Length and Time-Step in N-body Simulations. *Astronomy Reports*, 49 :470–476, April 2005.
- [23] S. Rosseland. Electrical state of a star. *MNRAS*, 84 :720, June 1924.
- [24] C. Sack and H. Schamel. Plasma expansion into vacuum - A hydrodynamic approach. *Physics Reports*, 156 :311–395, December 1987.
- [25] J. D. Scudder. On the causes of temperature change in inhomogeneous low-density astrophysical plasmas. *ApJ*, 398 :299–318, October 1992.

-
- [26] D. Shvarts. Self-consistent reduction of the spitzer-härm electron thermal heat flux in steep temperature gradients in laser-produced plasmas. *Phys. Rev. Lett.*, 47 :247–250, July 1981.
- [27] L. Spitzer and R. Härm. Transport phenomena in a completely ionized gas. *Phys. Rev.*, 89 :977–981, March 1953.
- [28] B.A. Trubnikov. Particle interaction in a fully ionized plasma. In M.A. Leontovich, editor, *Reviews of Plasma Physics*, volume 1, pages 205–311. Consultants Bureau, New York, 1965.