









# Modélisation Cinétique : Applications aux Plasmas Froids Hors-Equilibre

**Laurent Garrigues**

Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie – LAPLACE  
Groupe de Recherche, Energétique, Plasmas, Hors-Equilibre - GREPHE  
Université de Toulouse, CNRS-UPS-INPT  
Bâtiment 3R2, 118 Route de Narbonne  
31062 Toulouse Cedex 09, France

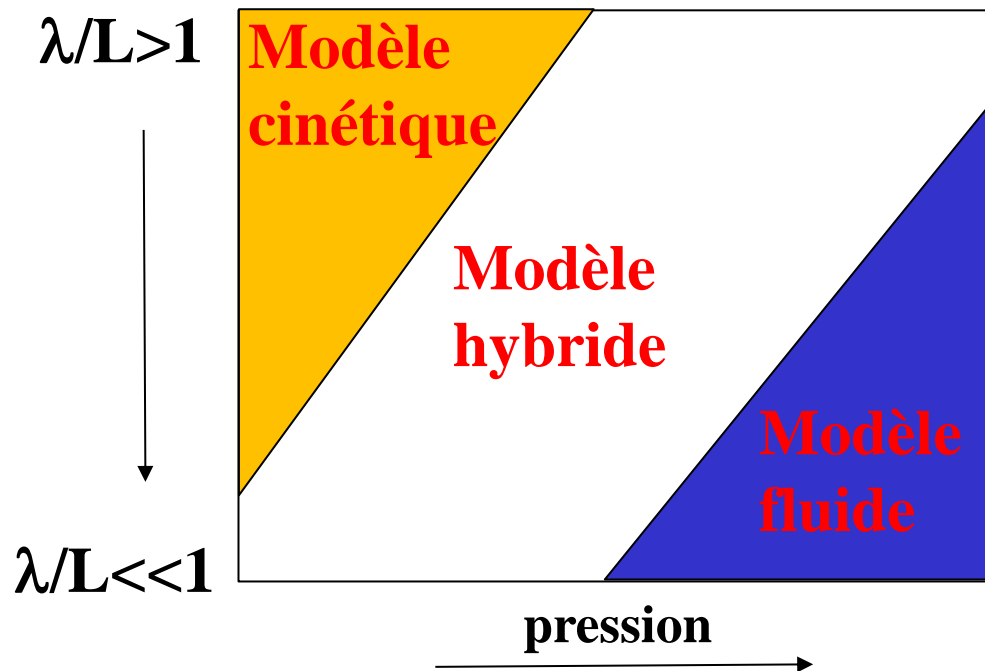
*[laurent.garrigues@laplace.univ-tlse.fr](mailto:laurent.garrigues@laplace.univ-tlse.fr)*

# Plan

- Approche cinétique 
- Techniques de parallélisation 
- Dérives en champs E et B croisés 
- Décharge Penning 
- Le propulseur de Hall 
- Conclusions & remerciements 

# Modèle cinétique

- Étude des plasmas faiblement collisionnels



# Modèle PIC électrostatique

- Équation de Boltzmann avec collisions

$$\frac{\partial}{\partial t} f_s + \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_s + \mathbf{a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} f_s = \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f_s \right\}_{coll}$$

$$f_s \equiv f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

$$\mathbf{a} = q_s (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}_{ext}) / m_s$$

- Équation de Poisson

$$\nabla \cdot [\epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = \rho(\mathbf{r}, t)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_s q_s \int f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$$

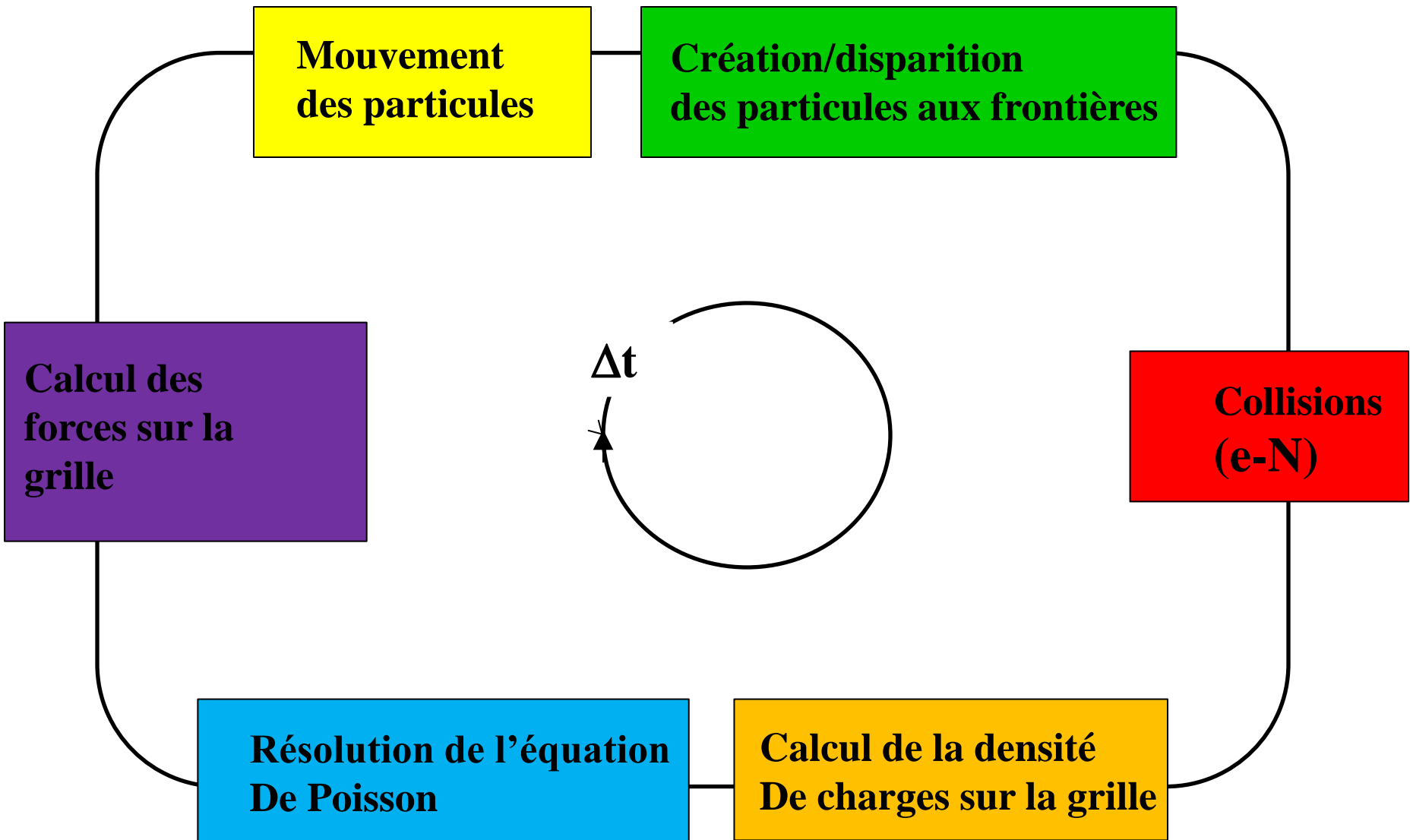
# Principe des simulations PIC

- Échantillonner la fonction de distribution  $f_s$  à l'aide d'un nombre fini  $p$  de particules (**macro-particules**)

$$f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_p f_{s,p}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

- Faire évoluer l'ensemble de ces particules définies par leur position et vitesse dans le champ qu'elles créent et modifient (avec l'action d'un champ magnétique extérieur), tout en faisant des collisions
- Introduction d'une grille temporelle (et contrainte associée)
- Introduction d'une grille spatiale (et contrainte associée)

# “Cycle” d’un modèle PIC



# Equations du mouvement des particules

## Mouvement des particules

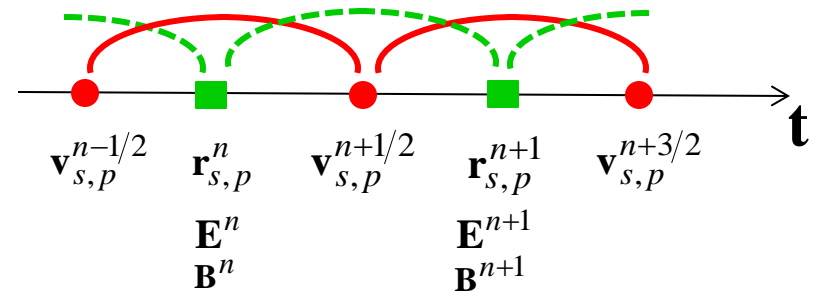
- Equations de Newton (non relativiste) :

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r}_{s,p} = \mathbf{v}_{s,p} \quad m_s \frac{d}{dt} \mathbf{v}_{s,p} = \mathbf{F} = q_s (\mathbf{E} + \mathbf{v}_{s,p} \times \mathbf{B})$$

- Echantillonnage : millions de particules pendant des milliers de pas de temps
- Schéma « Leap-Frog » saute-mouton : stockage uniquement des grandeurs à l'instant précédent

$$m_s \frac{\mathbf{v}_{s,p}^{n+1/2} - \mathbf{v}_{s,p}^{n-1/2}}{\Delta t} = q_s \left( \mathbf{E}^n + \frac{\mathbf{v}_{s,p}^{n+1/2} + \mathbf{v}_{s,p}^{n-1/2}}{2} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}^n) \right)$$

$$\frac{\mathbf{r}_{s,p}^{n+1} - \mathbf{r}_{s,p}^n}{\Delta t} = \mathbf{v}_{s,p}^{n+1/2}$$



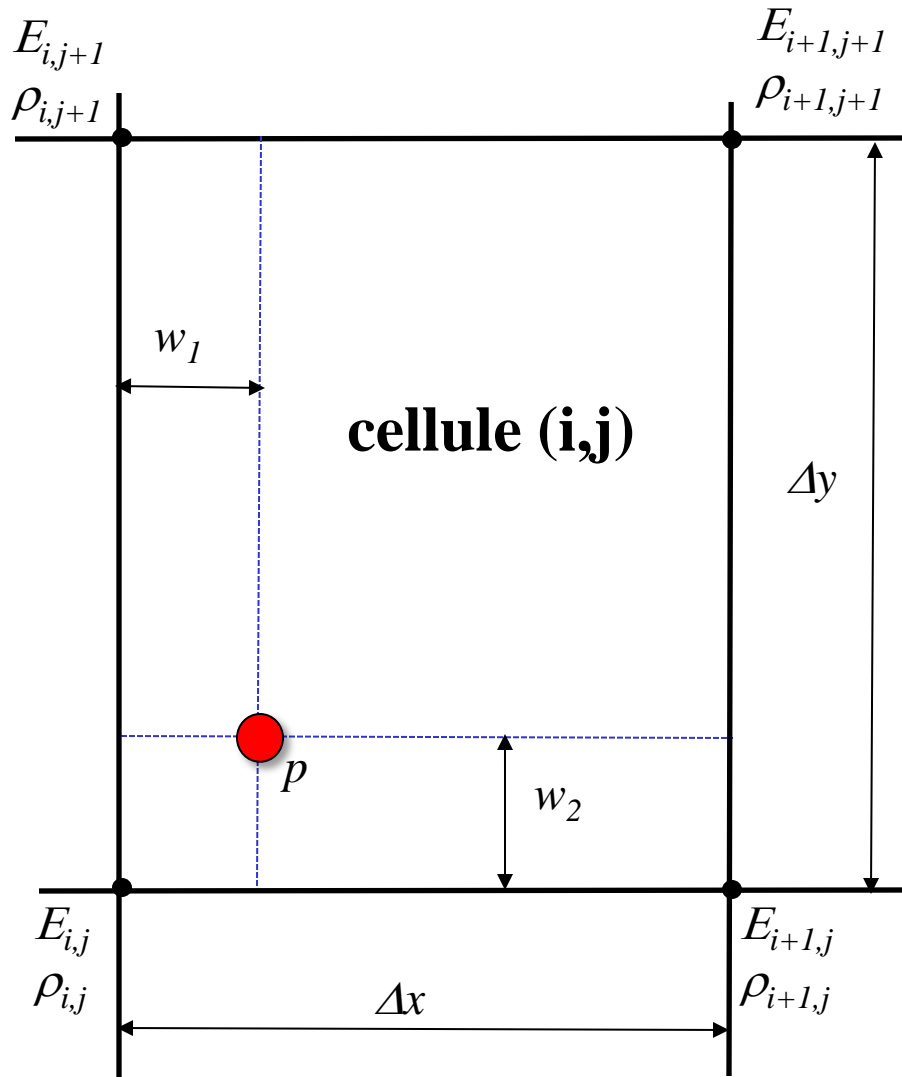
# Traitement des collisions en volume

**Collisions  
(e-N)**

- Méthode statistique : Monte Carlo
- Calculer le nombre de particules qui font des collisions
- Calculer des fréquences de collision (élastique, excitation et ionisation) à partir des jeux de sections efficaces, de la densité de gaz et de l'énergie des particules incidentes
- Calculer les nouvelles composantes de vitesse, création/disparition de particules supplémentaires (ionisation, attachement)



# Assignment des charges sur la grille



$$Q_{i,j,p} = (1 - w_1)(1 - w_2)$$

$$Q_{i+1,j,p} = w_1(1 - w_2)$$

$$Q_{i,j+1,p} = (1 - w_1)w_2$$

$$Q_{i+1,j+1,p} = w_1w_2$$

$$\rho_{i,j} = \sum_s q_s \sum_p Q_{i,j,p}$$

**Calcul de la densité  
De charges sur la grille**

# Equation de Poisson

- Equations de Poisson

$$\nabla \cdot [\epsilon \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)] = \rho(\mathbf{r}, t)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_s q_s \int f_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$$

- Champ électrique dérive d'un potentiel

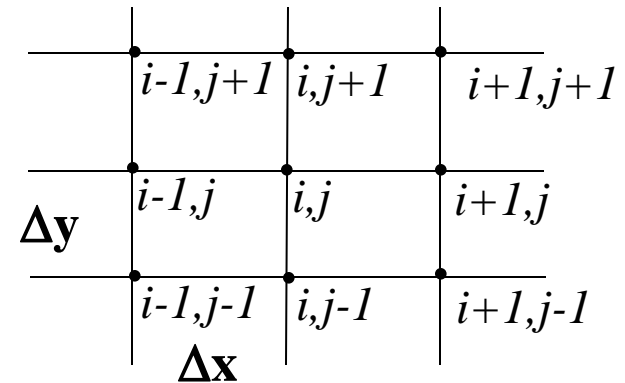
$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot [\Phi(\mathbf{r}, t)]$$

- Discrétisation centrée (cas du vide)

$$\frac{\Phi_{i-1,j}^n - 2\Phi_{i,j}^n + \Phi_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{\Phi_{i,j-1}^n - 2\Phi_{i,j}^n + \Phi_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} = -\frac{\rho_{i,j}^n}{\epsilon_0}$$

- Résolution : inversion de matrice, méthode itérative, TFR, etc.

Résolution de l'équation  
De Poisson



# Contraintes

- Contraintes sur le pas de temps

$$\Delta t = \min \left[ \frac{0.2}{\omega_{p,s}}, \frac{0.2}{\omega_{c,s}}, \frac{\Delta x}{v_{s,th}}, \frac{1}{v_{coll}^{\max}} \right]$$

$$\omega_{p,s} = \sqrt{\frac{q_s^2 n_s}{m_s \epsilon_0}} \quad v_{s,th} = \sqrt{\frac{8k_B T_s}{\pi m_s}}$$

$$\omega_{c,s} = \frac{q_s B}{m_s}$$

- Contrainte sur le pas en espace

$$\Delta x < \lambda_{d,s}$$

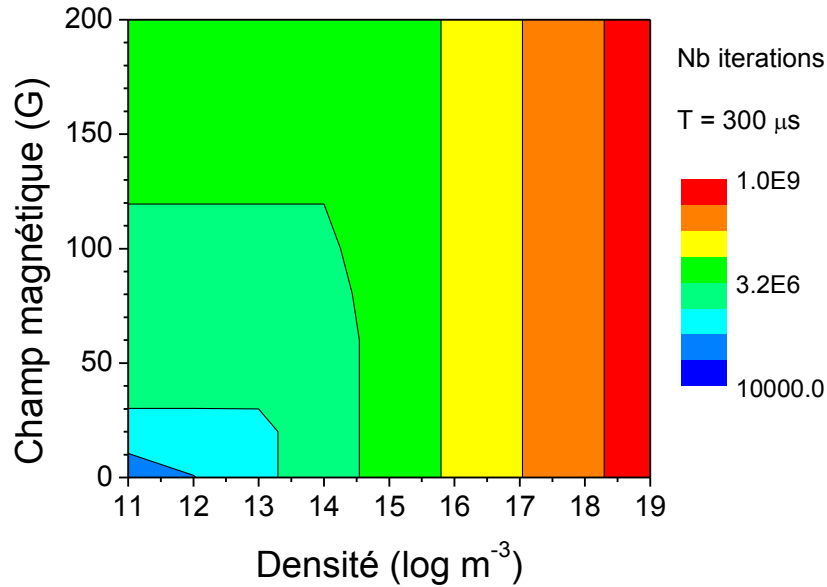
$$\lambda_{d,s} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_s}{q_s^2 n_s}}$$

- Contrainte sur la statistique – bruit numérique

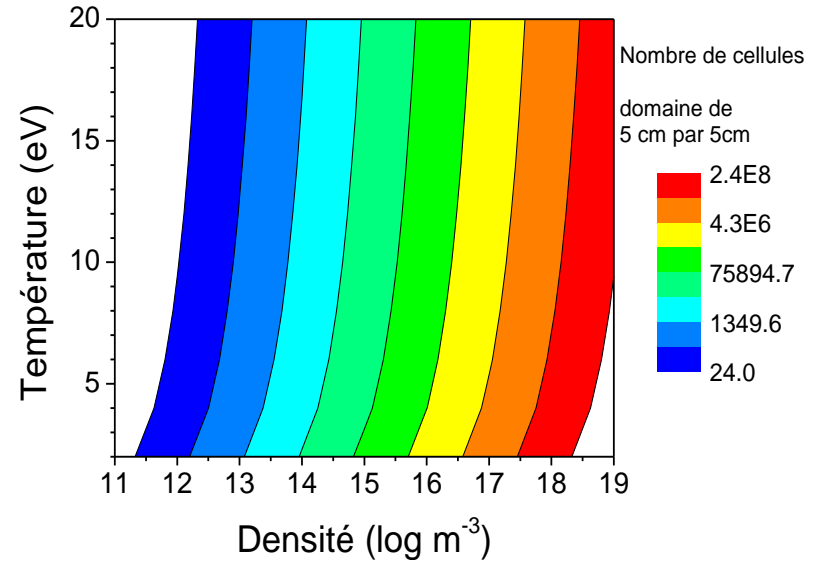
$$N_{s,p} > 100' N_{cell}$$

# Illustration

$\Delta t$



$\Delta x$



- fortes contraintes aux fortes densités
- lever les contraintes ?

# Méthode Scaling

$$\omega_{p,s} = \sqrt{\frac{q_s^2 n_s}{m_s \gamma \epsilon_0}}$$

$$\lambda_{d,s} = \sqrt{\frac{\gamma \epsilon_0 k_B T_s}{q_s^2 n_s}}$$

- Augmentation de la permittivité ( $\gamma \sim 100-1000$ )
- Lever les contraintes sur la fréquence plasma et long. de Debye
- Limite : épaisseur des gaines, gaines collisionnelles et magnétisées

# Méthode Implicite

- Etudier des phénomènes lents (devant la fréquence plasma électronique) et dont la longueur d'onde est supérieure à la longueur de Debye
- Utilisation d'un schéma qui amortit ces ondes
- Discrétisation du mouvement des particules différente

$$m_s \frac{\mathbf{v}_{p,s}^{n+1/2} - \mathbf{v}_{p,s}^{n-1/2}}{\Delta t} = q_s \left( \mathbf{E}^{n+1} + \frac{\mathbf{v}_{p,s}^{n+1/2} + \mathbf{v}_{p,s}^{n-1/2}}{2} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}^n) \right)$$

- Pas en espace  $\times 10^{-20}$ , Pas de temps  $\times 10^{-20}$

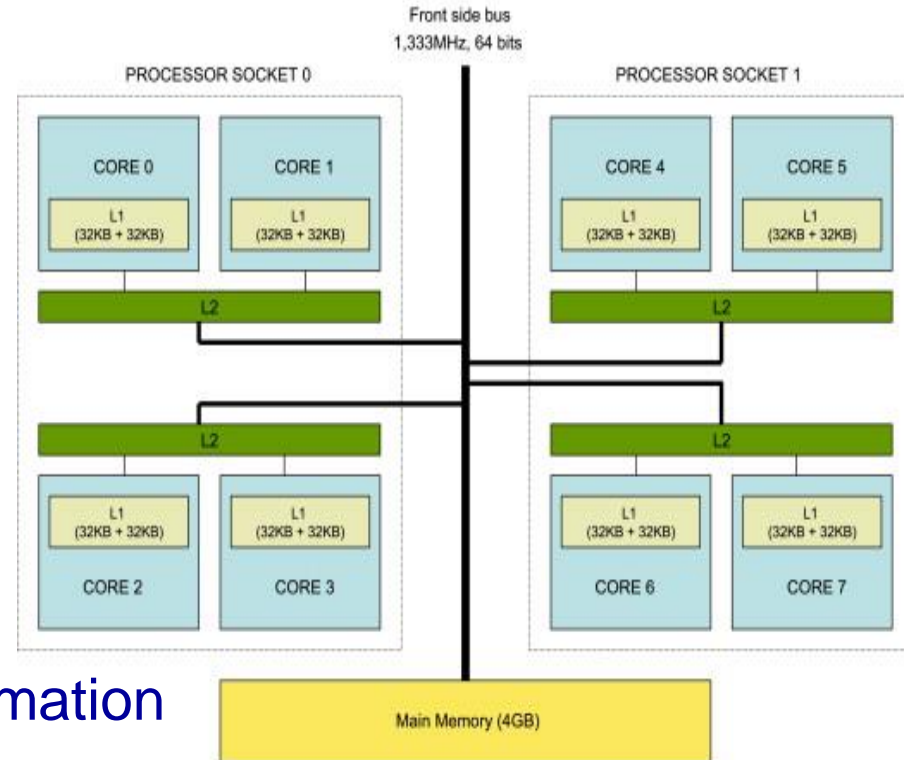
# Bibliographie



- Plasma Physics via Computer Simulation, C.K. Birdsall and A.B. Langdon, McGraw-Hill, 1985.
- Computer Simulation using Particles, R.W. Hockney and J.W. Eastwood, McGraw-Hill, 1981.
- Computer Plasma Physics with Applications to fusion and Astrophysics, T. Tajima, Addison-Wesley Publishing Company, 1989.
- Particle Simulation of Plasmas, J.M. Dawson, *Review of Modern Physics* **55**, 403 (1983).
- Particle Simulation of Plasmas: Review and Advances, J. Verboncoeur, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **47**, A231 (2005).
- Particle Simulations for Space Weather, G. Lapenta, *Journal of Computational Physics* **231**, 795 (2011).

# Le calcul parallèle, c'est quoi ?

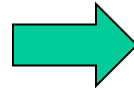
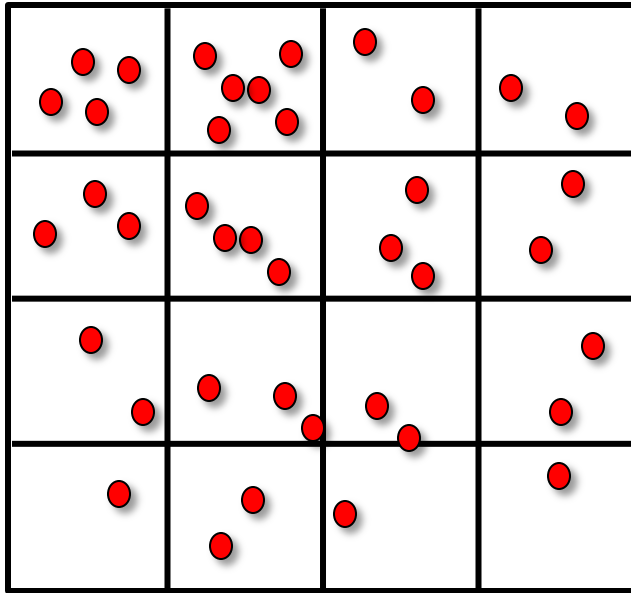
- Utiliser plusieurs processeurs pour effectuer un calcul
- Calculs plus rapides (diviser par N proc. en théorie)
- Difficultés :
  - Partage des tâches
  - Gestion des échanges d'information
- Outils de parallélisation programmation
  - Utiliser l'architecture parallèle du processeur
  - OpenMP : mémoire partagée
  - MPI : mémoire distribuée



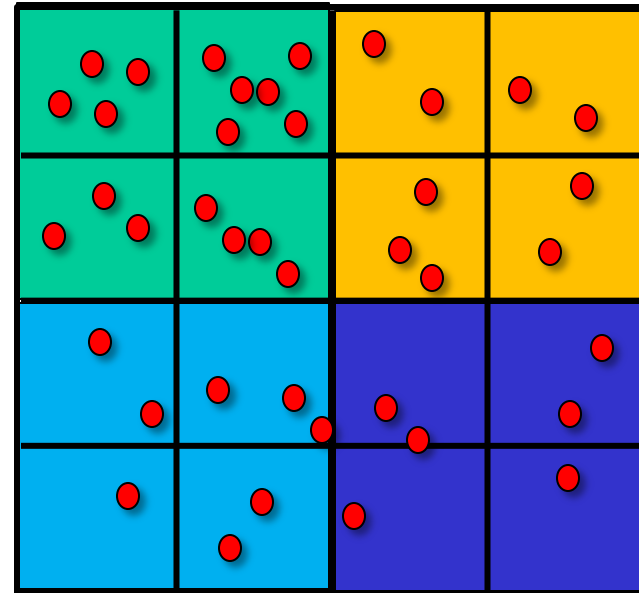


# Décomposition de domaine

1 Processeur

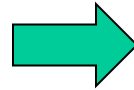
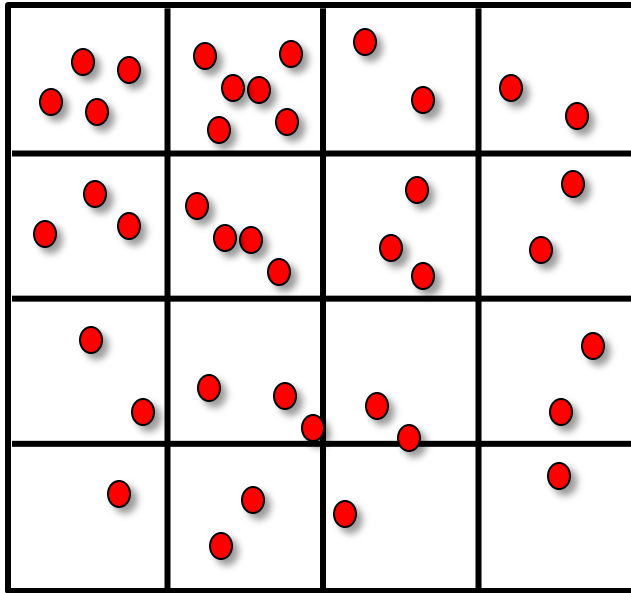


1 Processeur  
4 cœurs

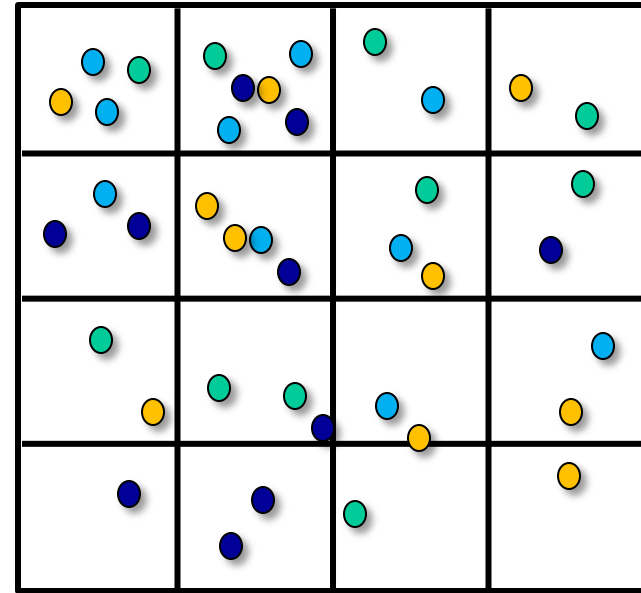


# Décomposition en particules

1 Processeur

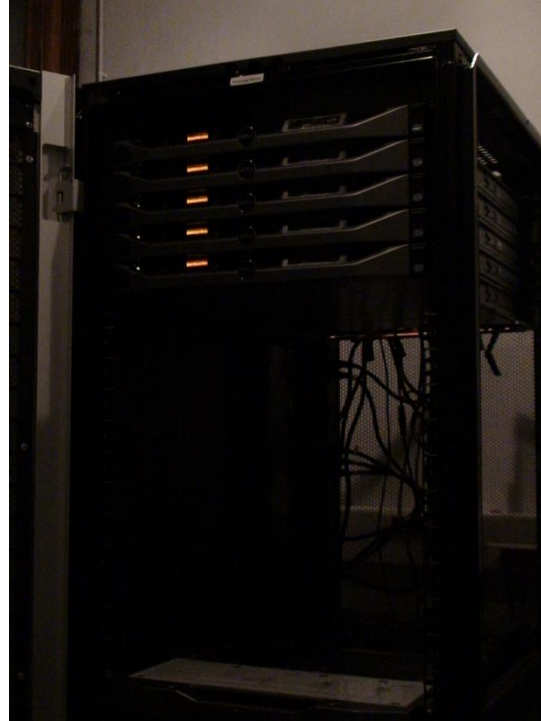


1 Processeur  
4 coeurs



# Moyens de calcul

**Clusters LAPLACE  
(188 processeurs)**



**Supercalculateur EOS  
Université Paul Sabatier  
(12200 processeurs)**



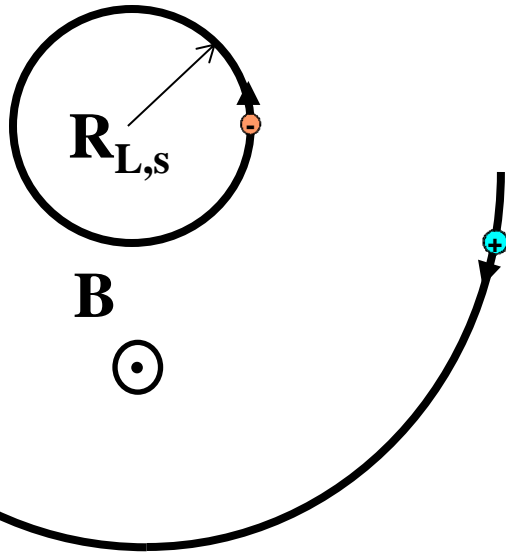
**EOS - 183ème place au  
TOP500 Juin 2014**

# Bibliographie



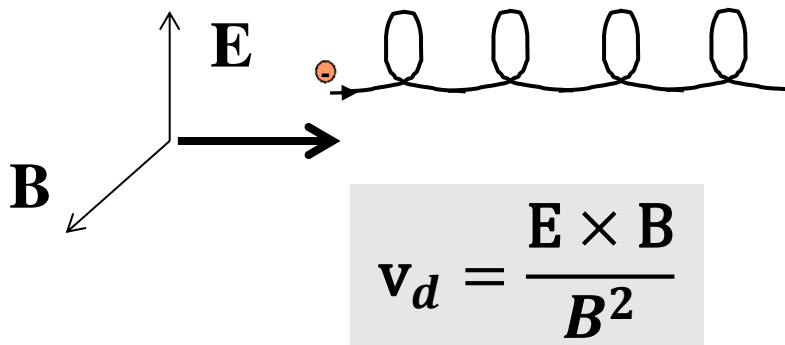
- The Sourcebook of Parallel Computing, edited by J. Dongarra, I. Foster, G. C. Fox, W. Gropp, K. Kennedy, L. Torczon, and A. White, Morgan Kaufman publishers (2002).
- Parallel Computing: Architectures, Algorithms, and Applications, edited by C. Bischof, M. Brückner, P. Gibbon, G. R. Joubert, T. Lippert, B. Mohr, and F. Peters, IOP Press (2008).
- Parallel Programming, B. Wilkinson and M. Allen, Prentice-Hall, Inc. (1999).
- Handbook of Parallel Computing: Models, Algorithms, and Applications, edited by S. Rajasekaran and J. Reif, Taylor & Francis Group, LLC (2008).
- Advanced Computational Infrastructures for Parallel and Distributed Adaptive Applications, edited by M. Parashar and X. Li, Wiley & Sons (2010).

# Dérives en champs E et B croisés

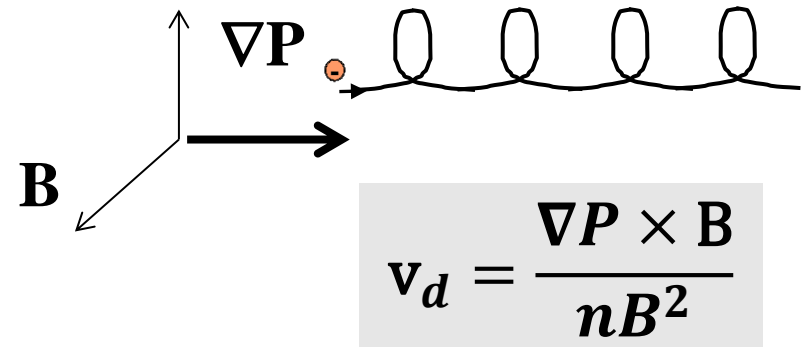


$$R_{L,s} = \frac{v_{\perp s}}{\omega_{c,s}} ; \omega_{c,s} = \frac{q_s B}{m_s}$$

$$R_{L,i} \gg L \gg R_{L,e}$$

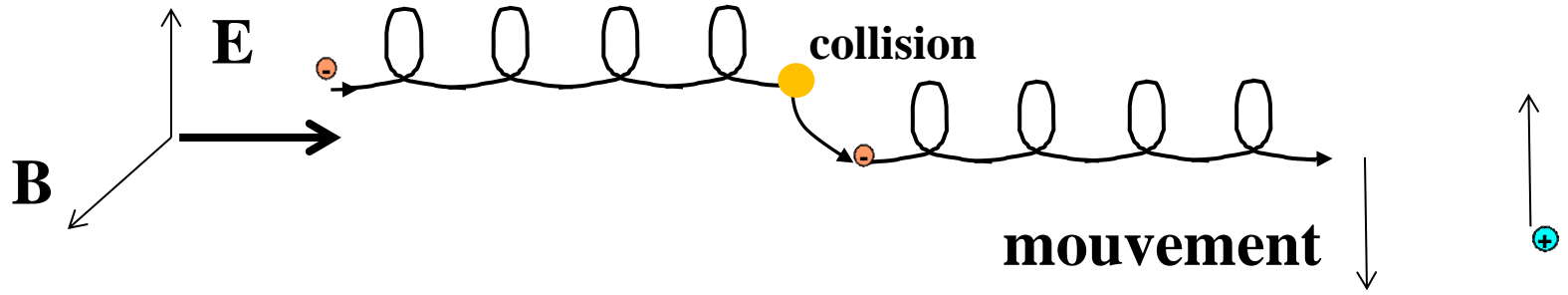
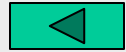


$$v_d = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}$$



$$v_d = \frac{\nabla P \times \mathbf{B}}{nB^2}$$

# Paramètre de Hall



paramètre de Hall

pulsation cyclotronique

$$h = \frac{\omega_c}{\nu} \gg 1$$

fréquence de collision

mobilité sans champ magnétique

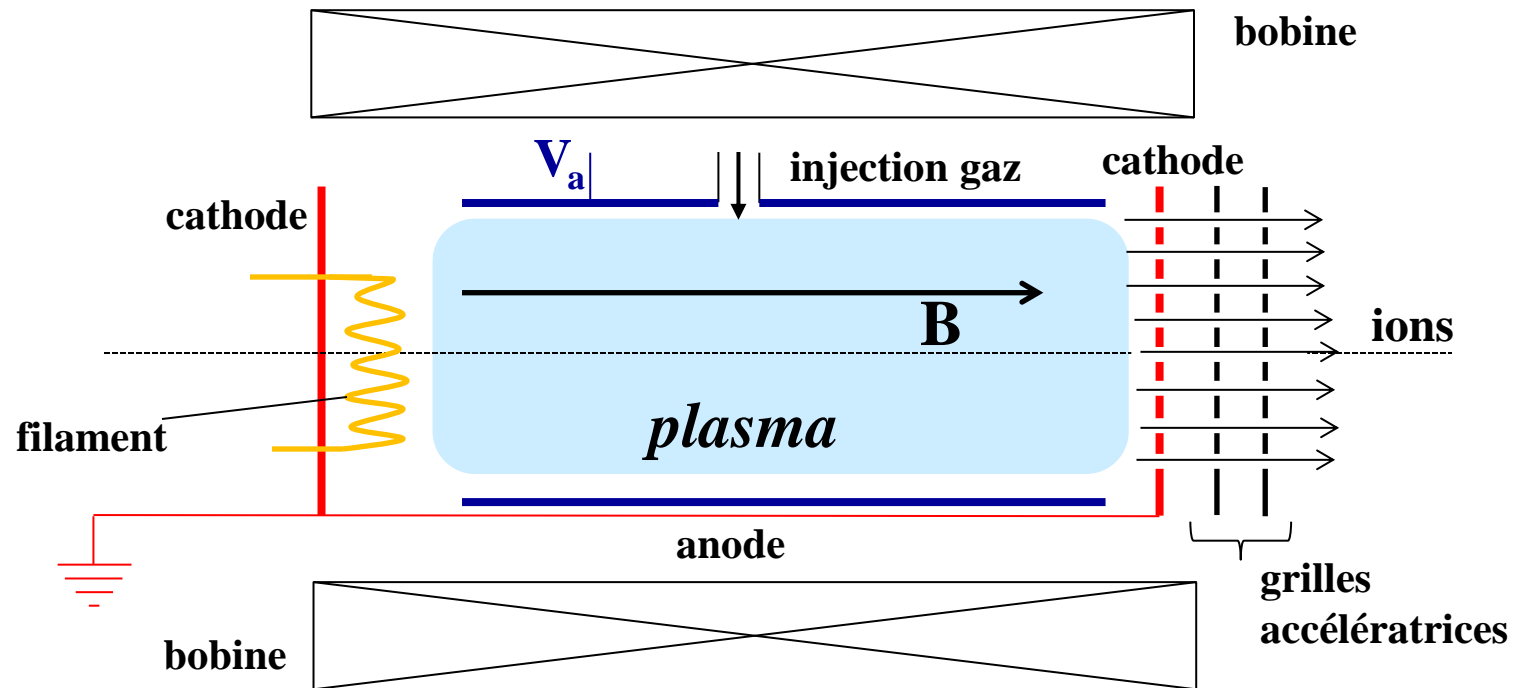
$$\mu_{e,\perp B} = \frac{e}{m_e \nu} \frac{1}{1 + h^2}$$

# Décharge Penning ?



F. M. Penning  
1894-1953

F. M. Penning, *Physica* 3, 873 (1936)



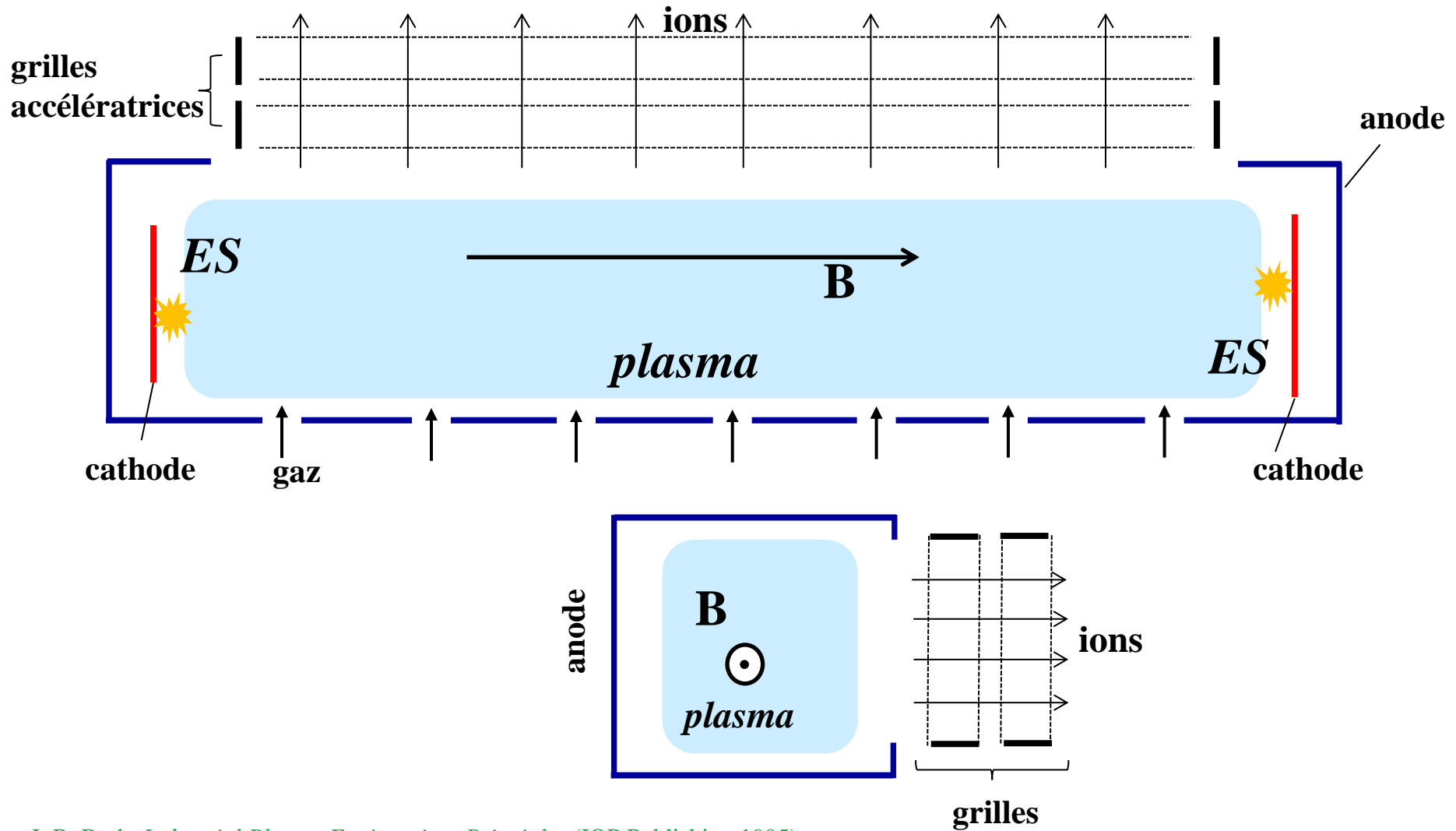
## ■ Caractéristiques

- $B$  : [0.01 – 0.1] T
- Pression : [ $10^{-4}$  -  $10^{-6}$ ] Pa
- Tension : [0.1 – 1] kV

## ■ Applications

- Faisceau d'ions
- Jauge de pression

# Décharge Penning - Culatron

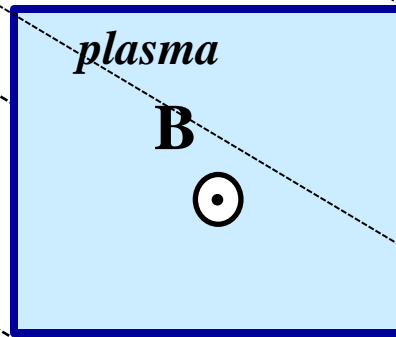
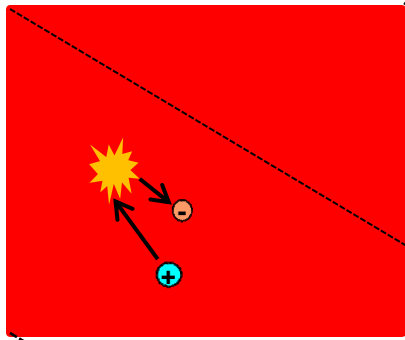


J. R. Roth, *Industrial Plasma Engineering, Principles* (IOP Publishing 1995)

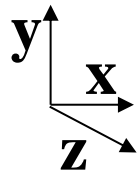


# Modélisation “2.5” D

$V_c < 0$



$V_a = 0 \text{ V}$

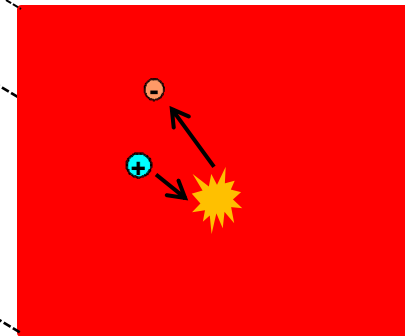


## Conditions

- Gaz : argon
- Pression = 0.1 Pa
- $B = 0.06 \text{ T}$
- $V_c = -100 \text{ V}$
- $\Gamma_{es} = 0.1$
- $h = 10^4$

## Dimensions source

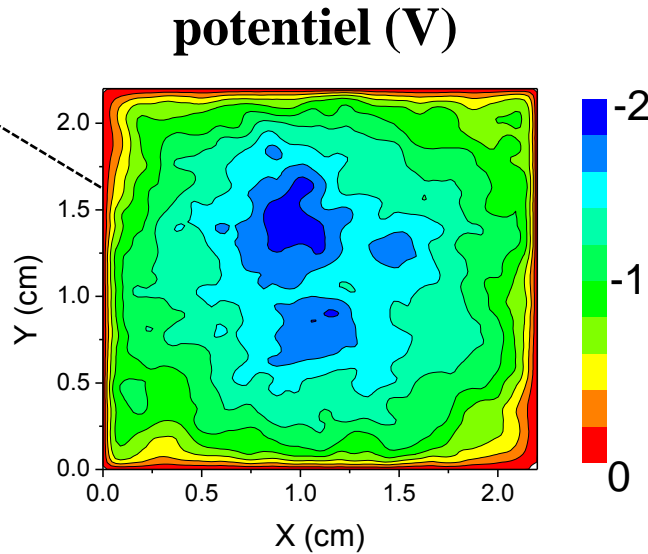
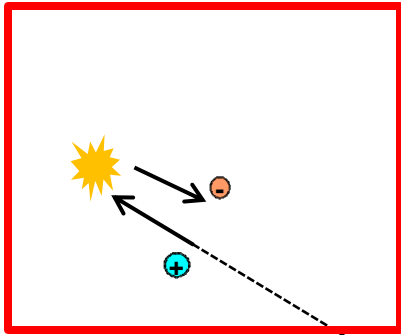
- $L = 10 \text{ cm}$
- $S = 2.2 \times 2.2 \text{ cm}$



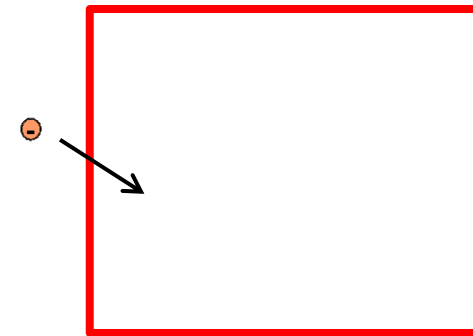
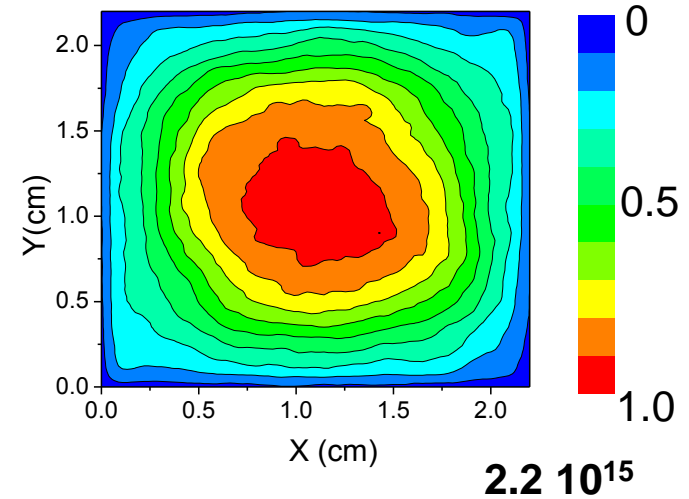
$V_c < 0$

# Résultats moyennés dans le temps

$V_c = -100$  V



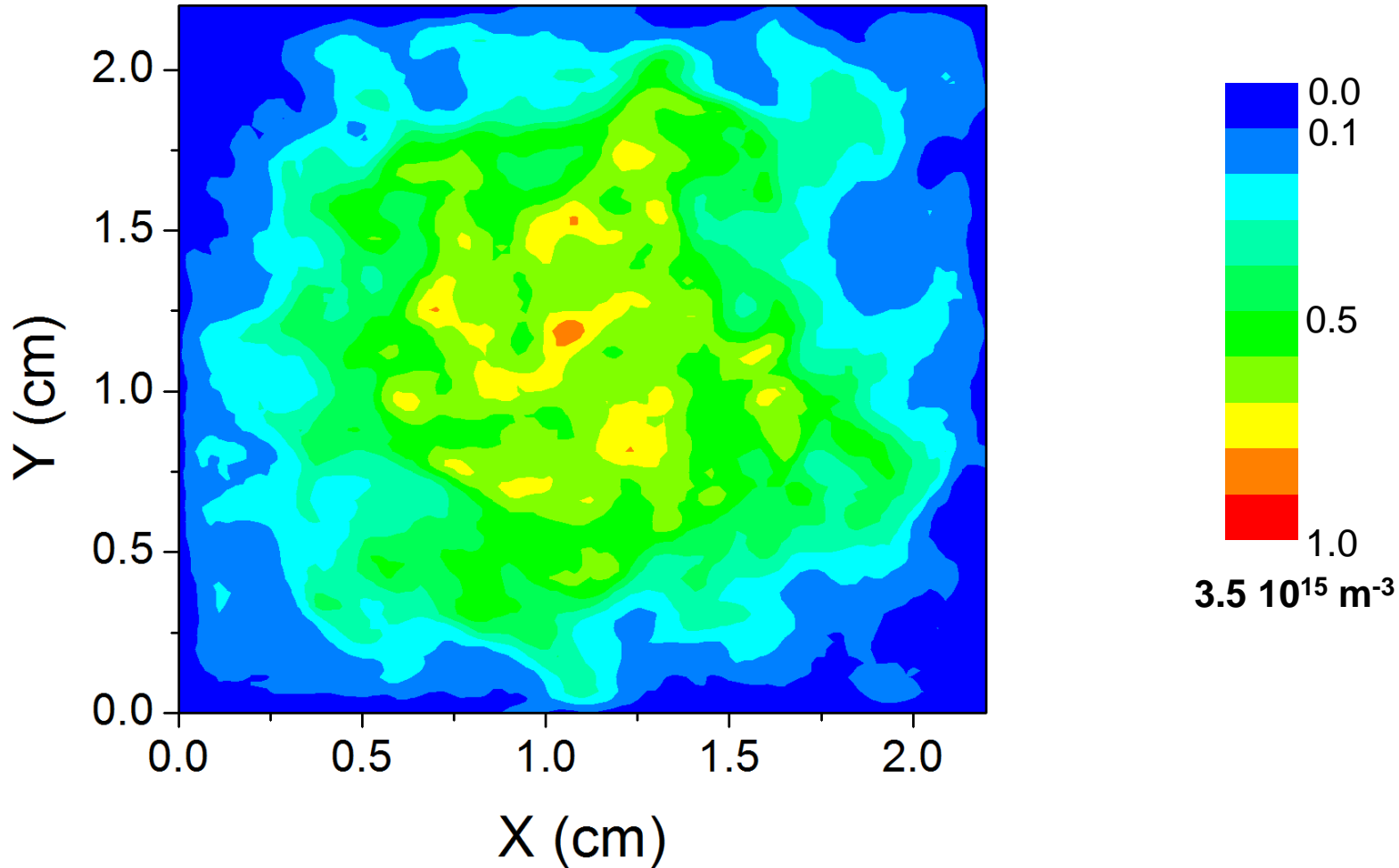
densité ionique ( $m^{-3}$ )



$V_c = -100$  V

# Densité ionique fonction du temps

$t = 5.0 \mu\text{s}$



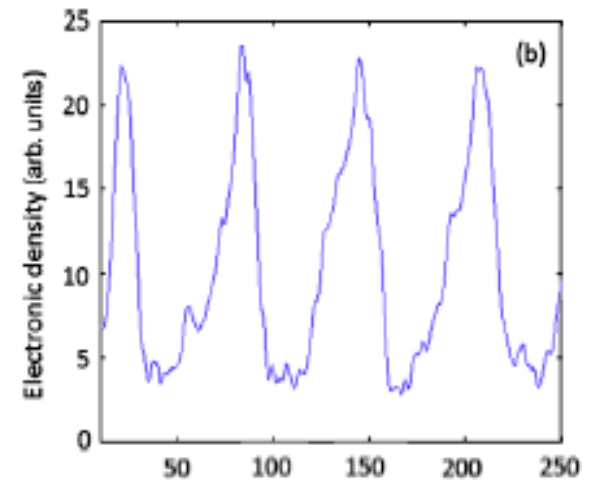
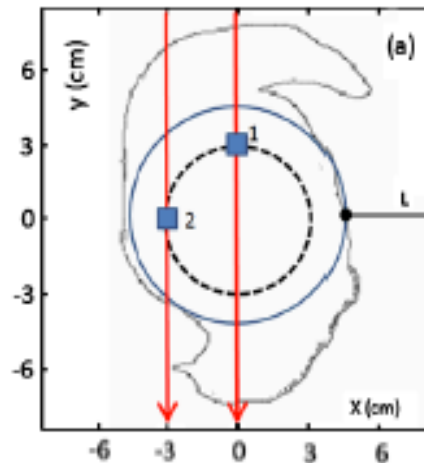
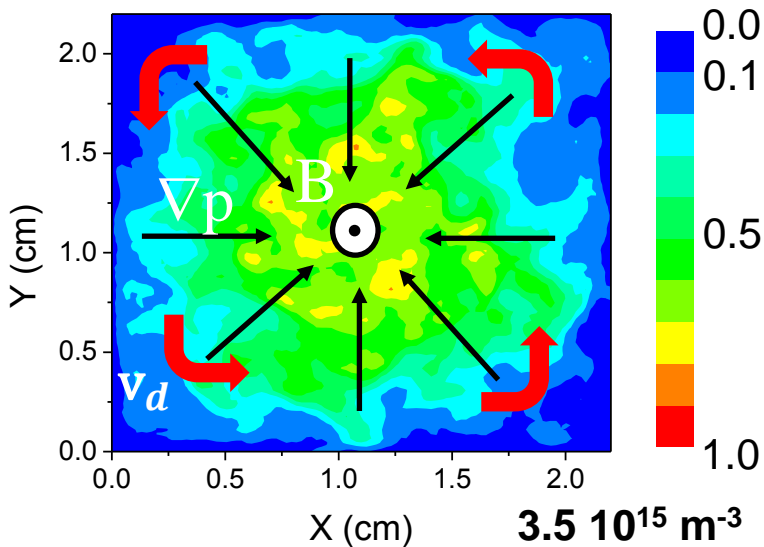
# Rotation du plasma

- Instabilités de Simon-Hoh

*Y. Sakawa et al., Phys. Rev. Lett. 69, 85 (1992)*

- Mises en évidence expérimentalement colonne plasma magnétisée - sondes de Langmuir

densité ionique ( $\text{m}^{-3}$ )



densité électronique

*C. Rebont et al., Phys. Rev. Lett. 106, 225006 (2011)*

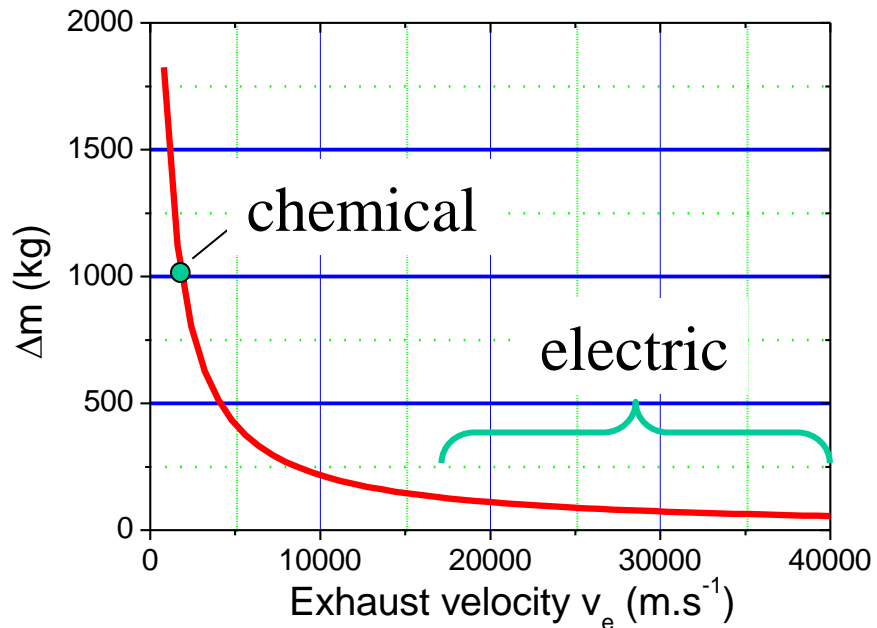
# Bibliographie



- J. R. Roth, *Industrial Plasma Engineering, Principles* (IOP Publishing 1995).
- F. M. Penning, “Glow Discharge at Low Pressure Between Coaxial Cylinders in an Axial Magnetic Field”, *Physica* **3**, 873 (1936).
- F. M. Penning, “A New Manometer for Low Gas Pressures Between  $10^{-3}$  and  $10^{-5}$  Torr”, *Physica* **4**, 71 (1937).
- J. P. Boeuf and B. Chaudhury, “Rotating Instability in Low-Temperature Magnetized Plasmas”, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 155005 (2013).
- C. Rebont, N. Claire, Th. Pierre, and F. Doveil, “Ion Velocity Distribution Function Investigated Inside an Unstable Magnetized Plasma Exhibiting a Rotating Nonlinear Structure”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 225006 (2011).
- Y. Sakawa, C. Joshi, P. K. Kaw, V. K. Jain, T. W. Johnston, F. F. Chen, and J. M. Dawson, “Nonlinear Evolution of the Modified Simon-Hoh Instability via a Cascade of Sideband Instabilities in a Weak Beam Plasma System”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 85 (1992).
- N. Brenning, D. Lundin, T. Minea, C. Costin and C. Vitelaru, “Spokes and Charged Particle Transport in HiPIMS Magnetrons”, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46**, 084005 (2013).
- C. L. Ellison, Y. Raitses, and N. J. Fisch, “Cross-Field Electron Transport Induced by a Rotating Spoke in a Cylindrical Hall Thruster”, *Phys. Plasmas* **19**, 013503 (2012).

# Propulseur de Hall ?

- Maintenir un satellite sur une orbite géostationnaire



- **Propulseur chimique**

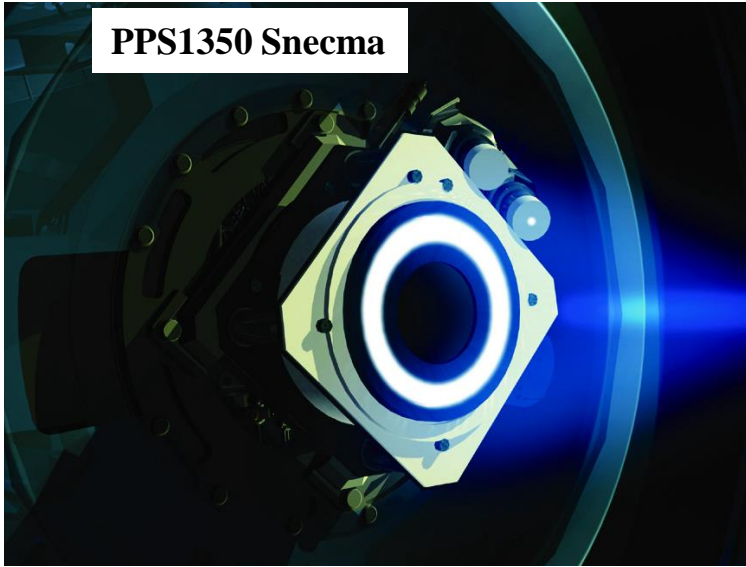
Brule de l'Hydrazine ( $N_2-H_4$ )  
vitesse d'éjection thermique

- **Propulseur de Hall**

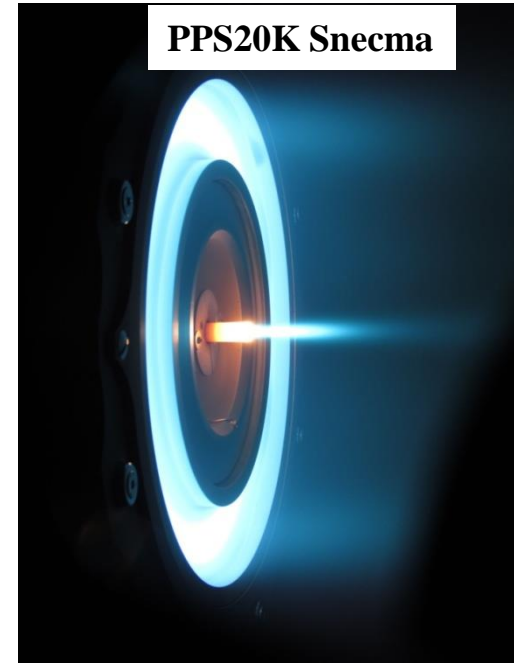
accélérer des ions en appliquant  
une tension de 100s de Volts

# En fonctionnement

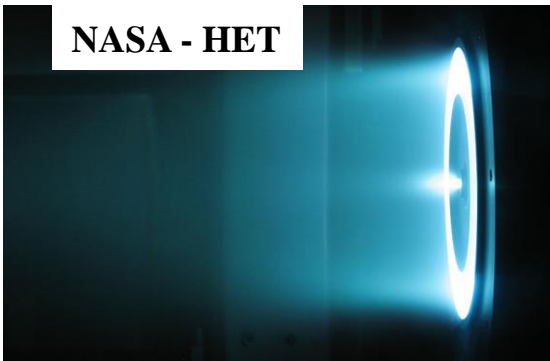
PPS1350 Snecma



PPS20K Snecma



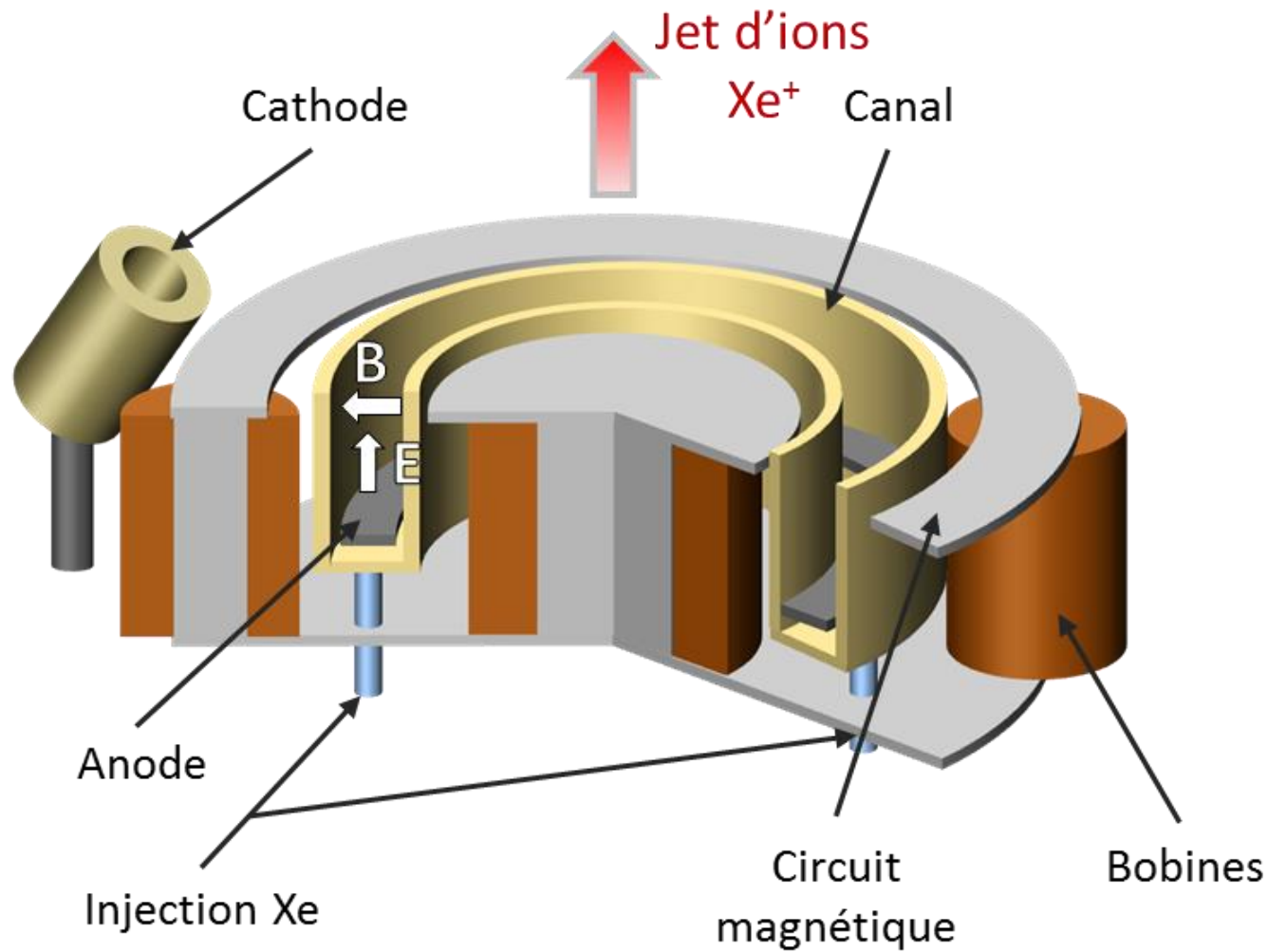
NASA - HET



Russian - SPT

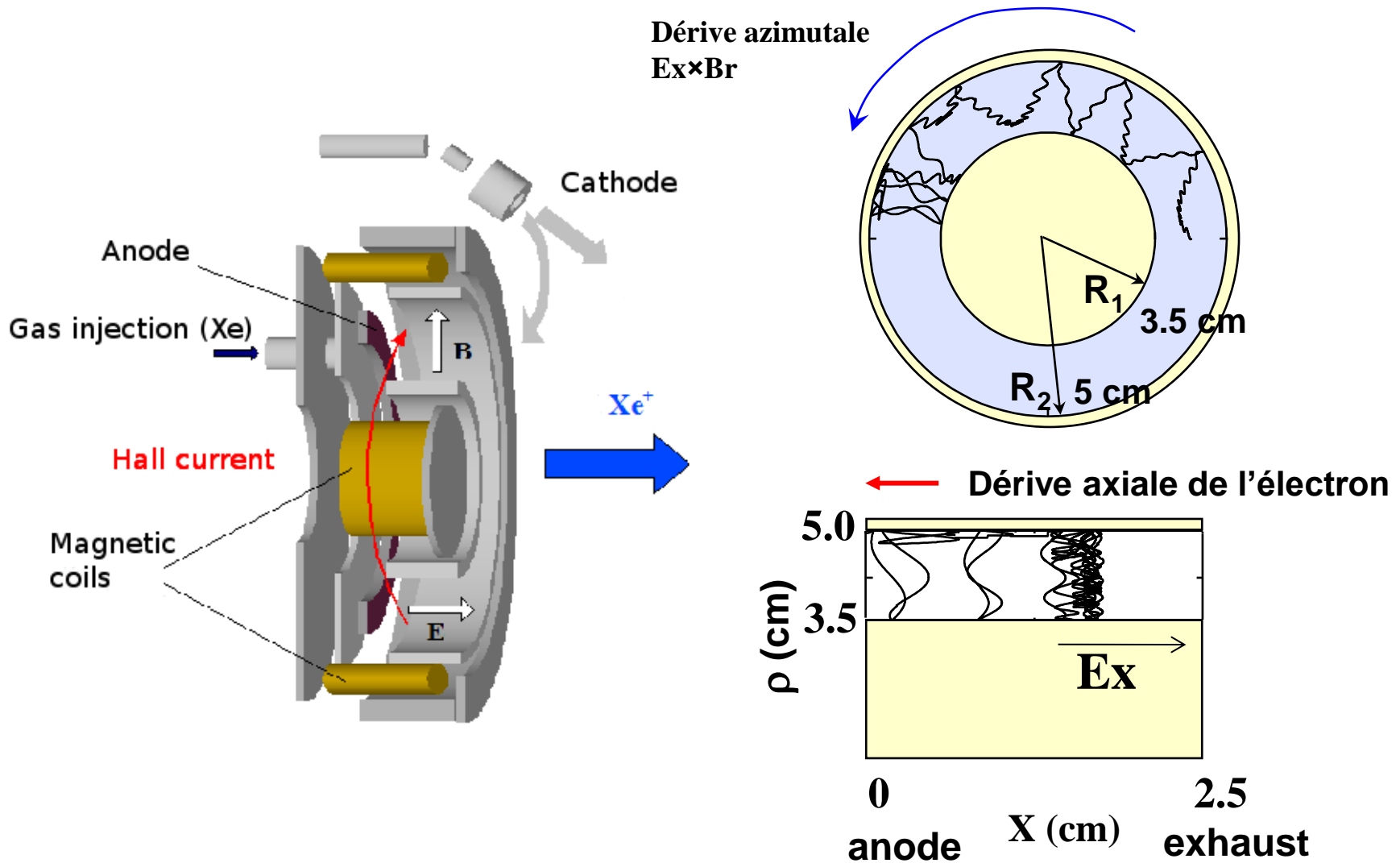


# Comment ça marche ?

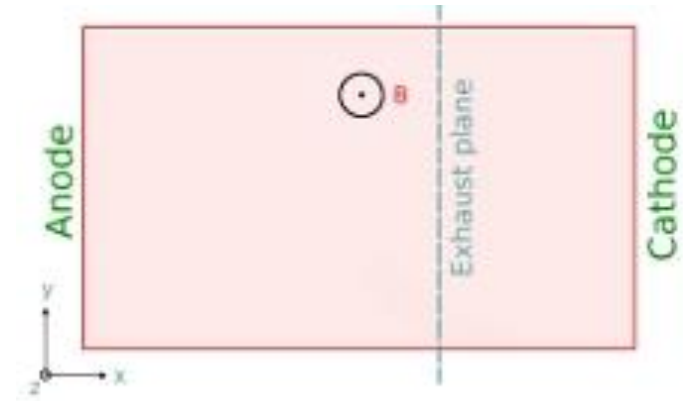
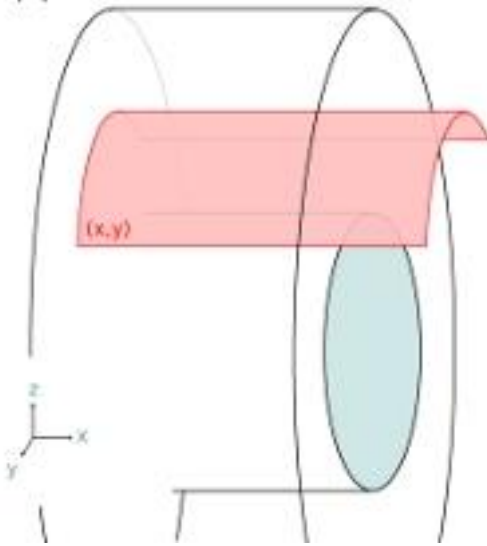




# Trajectoires électroniques



# Modèle 2D - scaling



- Domaine cartésien :  $x = 4 \text{ cm}$ ,  $y = 2.1 \text{ cm}$

- scaling

$$\gamma = 1$$

$$\Delta t = 3.5 \times 10^{-12} \text{ s}$$

$$\Delta x = 2.5 \times 10^{-5} \text{ m}$$

$$\gamma = 80$$

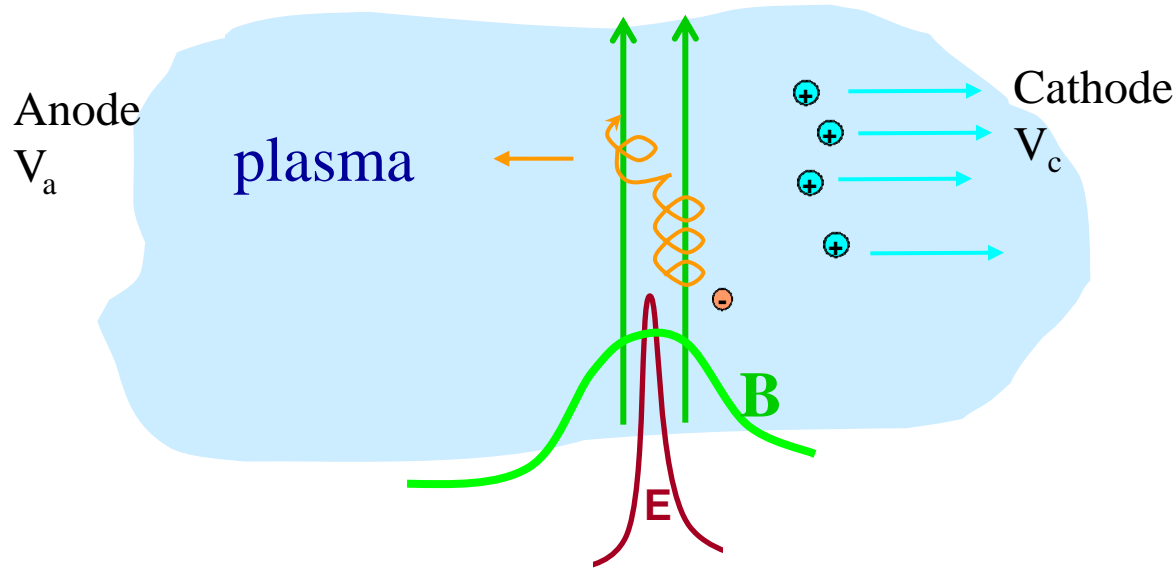
$$\Delta t = 3 \times 10^{-11} \text{ s (qlq jours 16 proc/mill. Part)}$$

$$\Delta x = 2 \times 10^{-4} \text{ m (200 x 100 cellules)}$$

- Transport des atomes : équation fluide 1D
- Conditions aux limites pour le potentiel :

Tension appliquée  $x$ , conditions périodiques en  $y$

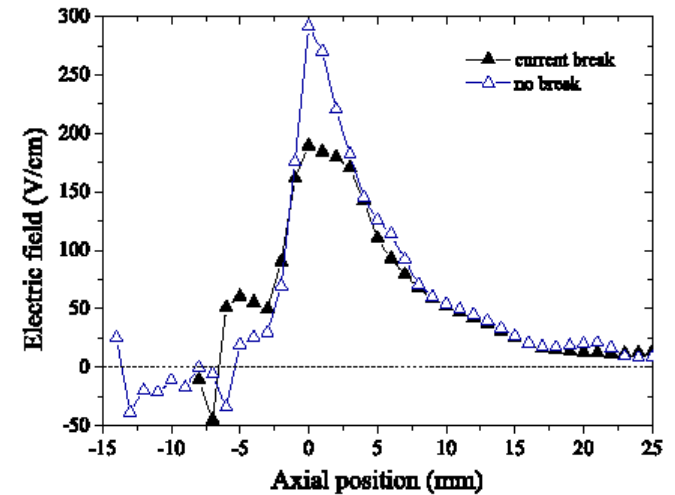
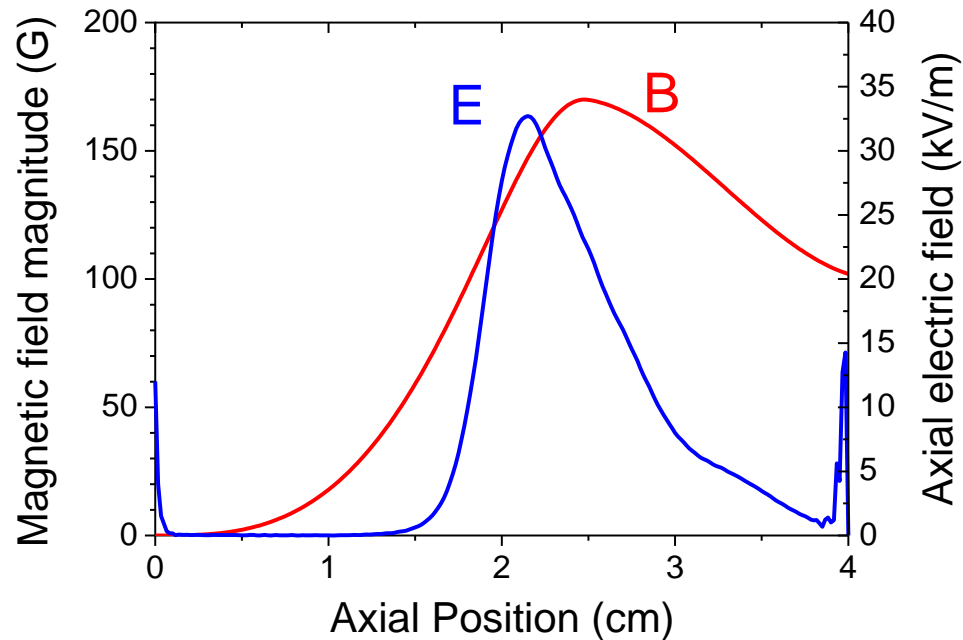
# Champ magnétique localisé



- En présence d'un champ magnétique localisé (barrière)
  - Décroissance de la conductivité électronique localement  $\sigma$
  - Génération un champ électrique à l'intérieur du plasma -  $E = j/\sigma$
  - Champ électrique : chauffer les électrons et accélérer les ions
  - « moteur » sans grille accélératrice

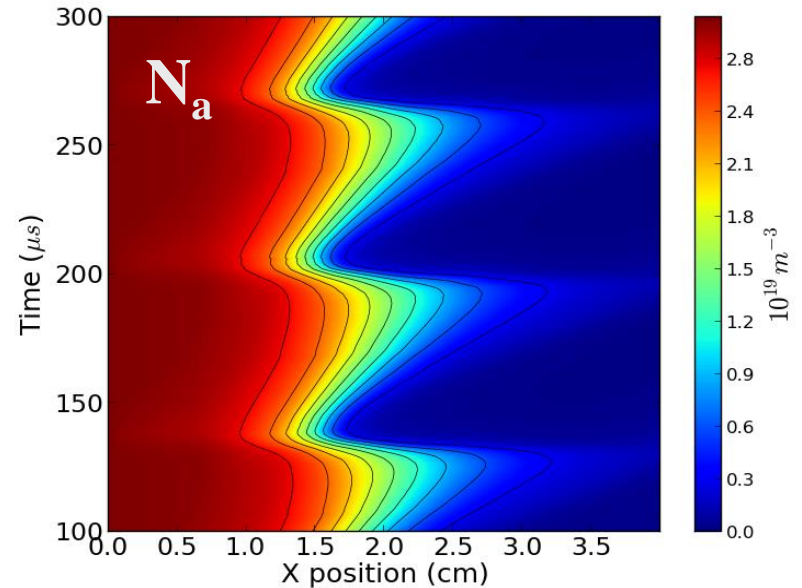
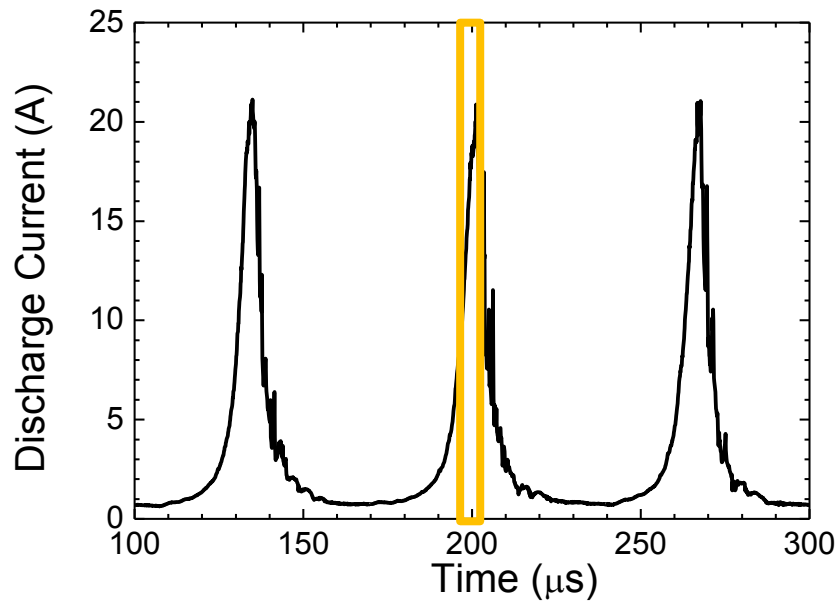
# champ électrique calculé vs mesuré

300 V, 5 mg/s de xénon



S. Mazouffre and G. Bourgeois, Plasma Sources Sci. Technol. **19**, 065018 (2010)

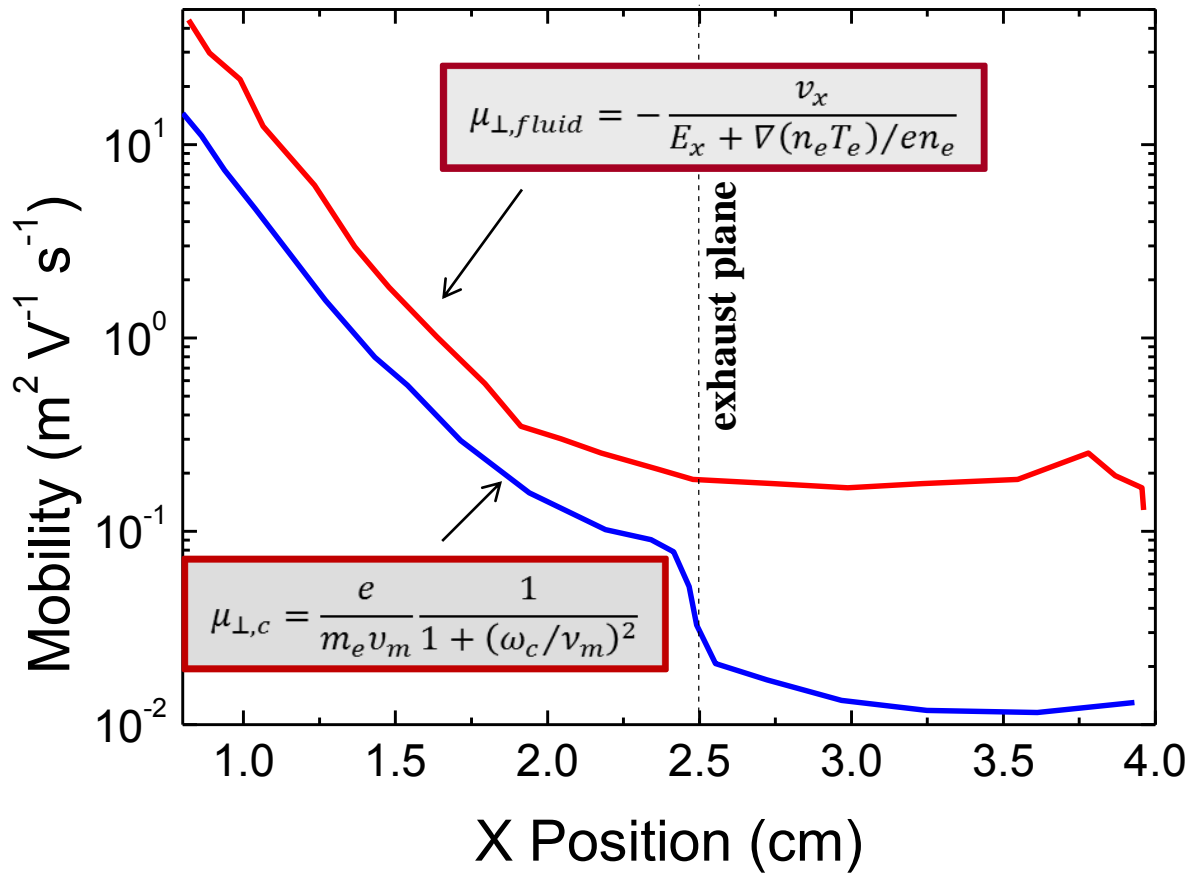
# Variation temporelle du courant



- Mode de respiration des atomes
- Observé expérimentalement

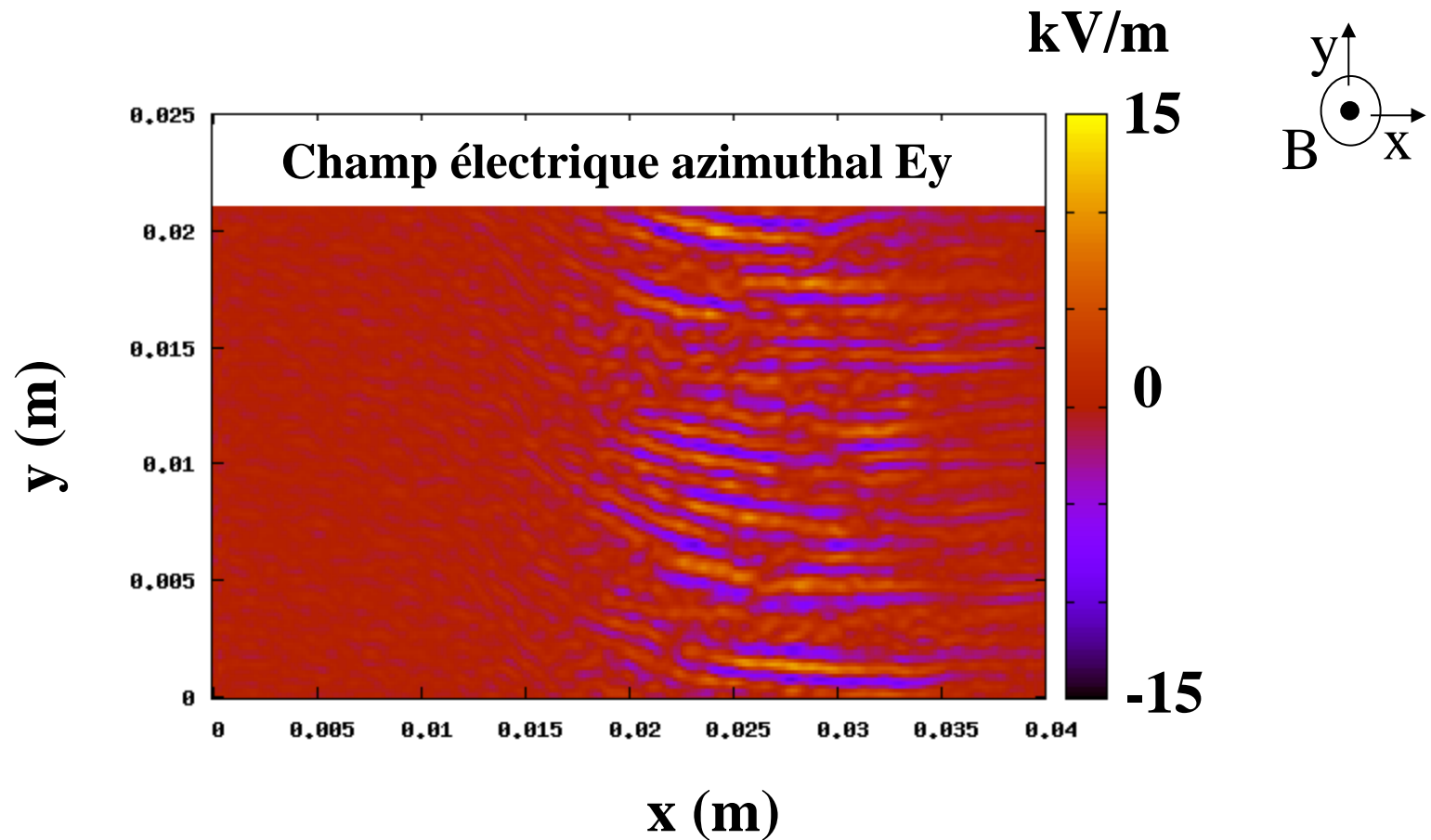
# Mobilité

$t = [-5:0] \mu\text{s}$



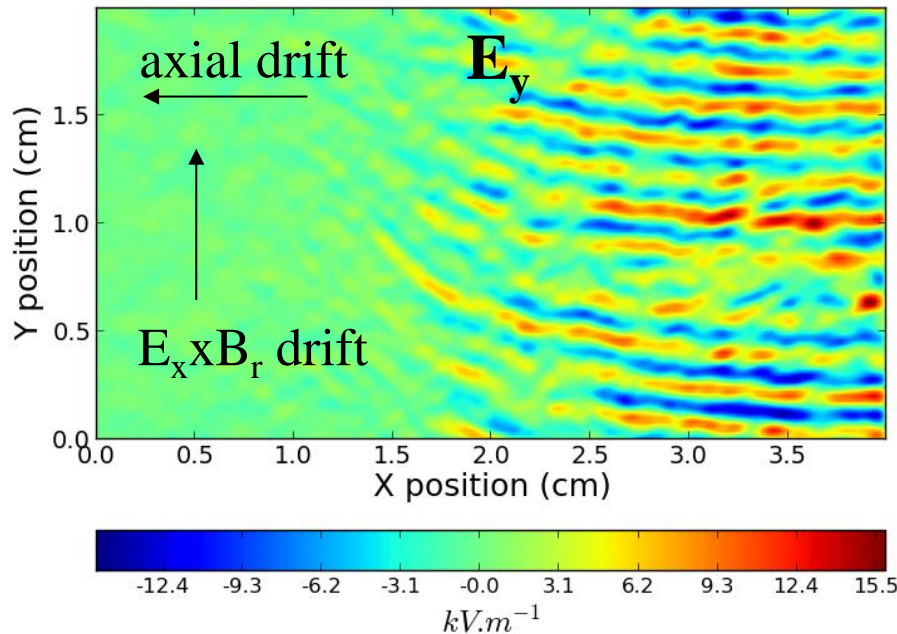
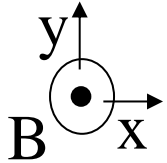
- Phénomène responsable du transport ?

# Onde de dérive suivant y (1/2)



# Onde de dérive suivant y (2/2)

$t = -3 \mu\text{s}$



- Instabilité en y : courte longueur d'onde ( $\sim$  mm)
- Mode dominant  $m = 13$  ( $k_y = 4000 \text{ rad.s}^{-1}$ ),  $f \sim$  MHz
- Observée expérimentalement (diffusion collective)

*S. Tsikata et al., Phys. Plasmas* **16**, 033506 (2009)

- Description théorique - S. P. Gary and J. J. Sanderson, *Plasma Phys.* **4**, 739 (1970).



# Bibliographie



- J. C. Adam, J. P. Boeuf, N. Dubuit, M. Dudeck, L. Garrigues, D. Gresillon, A. Heron, G. J. M. Hagelaar, V. Kulaev, N. Lemoine, S. Mazouffre, J. Perez-Luna, V. Pisarev, and S. Tsikata, “Physics, simulation and diagnostics of Hall effect thrusters”, *Plasma Phys. Control. Fusion* **50**, 124041 (2008).
- J. P. Boeuf and L. Garrigues, “Low frequency oscillations in a stationary plasma thruster”, *J. Appl. Phys.* **84**, 3541 (1998).
- L. Garrigues and P. Coche, “Electric Propulsion: Comparisons between different concepts”, *Plasma Phys. Control. Fusion* **53**, 124011 (2011).
- S. Mazouffre and G. Bourgeois, “Spatio-temporal characteristics of ion velocity in a Hall thruster discharge”, *Plasma Sources Sci. Technol.* **19**, 065018 (2010).
- S. Tsikata, C. Honore, V. Pisarev, and D. Gresillon, “Dispersion relations of electron density fluctuations in a Hall thruster plasma, observed by collective light scattering”, *Phys. Plasmas* **16**, 033506 (2009).
- S. P. Gary and J. J. Sanderson, “Longitudinal waves in a perpendicular collisionless plasma shock”, *Plasma Phys.* **4**, 739 (1970).
- P. Coche and L. Garrigues, “A Two-dimensional (azimuthal-axial) Particle-In-Cell model of a Hall Thruster”, *Physics of Plasmas* **21**, 023503 (2014).



- Utilisation des modèles PIC + parallélisation permet de mettre en évidence des phénomènes complexes tels que les instabilités dans les plasmas – dérive ExB ou  $\nabla P \times B$  fermée
  
- Sources à dérive ExB bloquée par les parois (PEGASES, injecteur de neutres pour ITER)
  
- Remerciements
  - Groupement d'Intérêt Scientifique Propulsion par Plasma
  - Centre de calcul HPC CALMIP de l'Université Paul Sabatier - Programme 2013-P1125