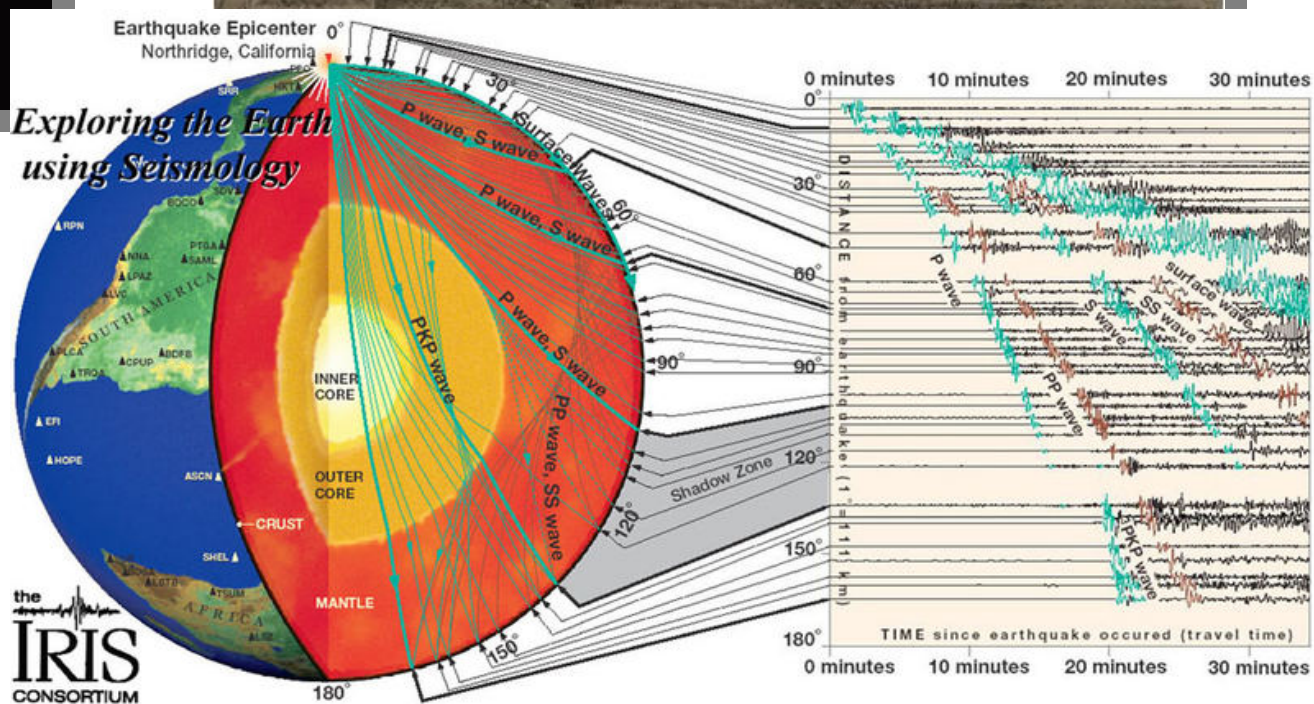
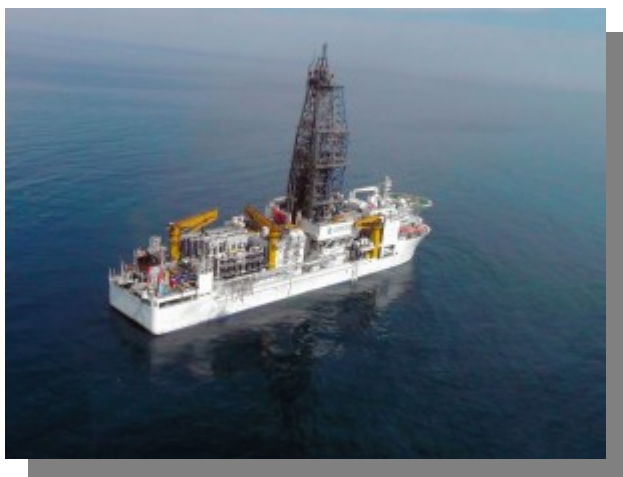


Les simulations numériques en astrophysique : les exemples des intérieurs planétaires et de la formation d'étoiles

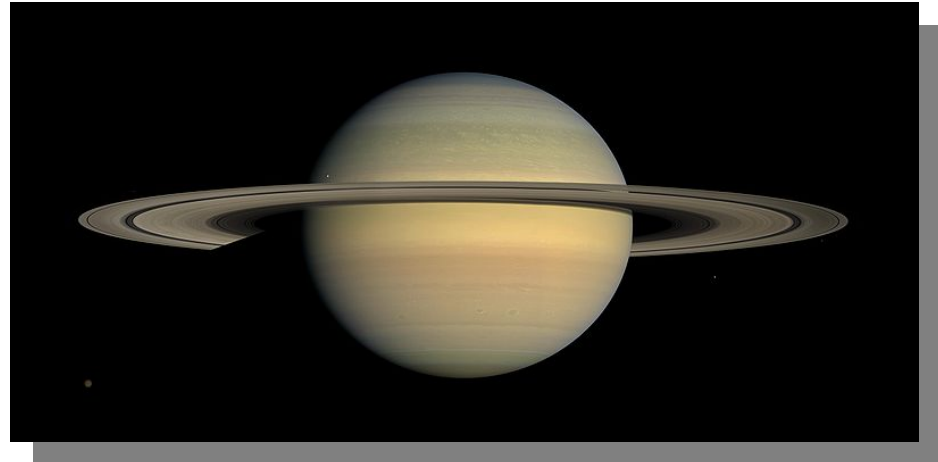
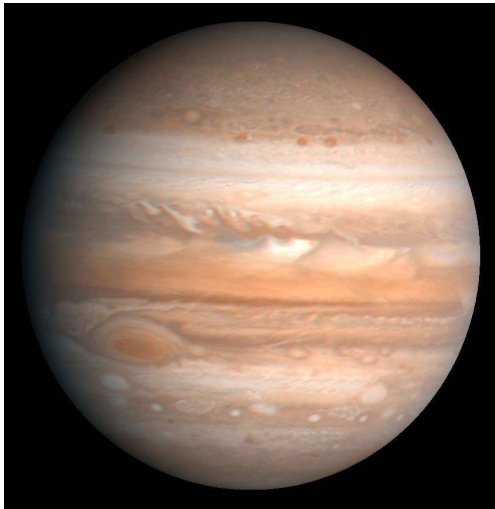
François Soubiran, Jacques Masson, Neil Vaytet
Centre de Recherche Astrophysique de Lyon, ENS de Lyon

3 juillet 2013

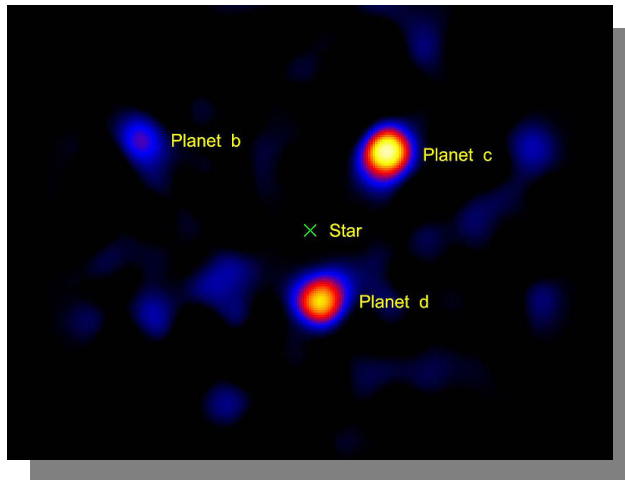
Pourquoi des simulations numériques en astrophysique ?



Pourquoi des simulations numériques en astrophysique ?



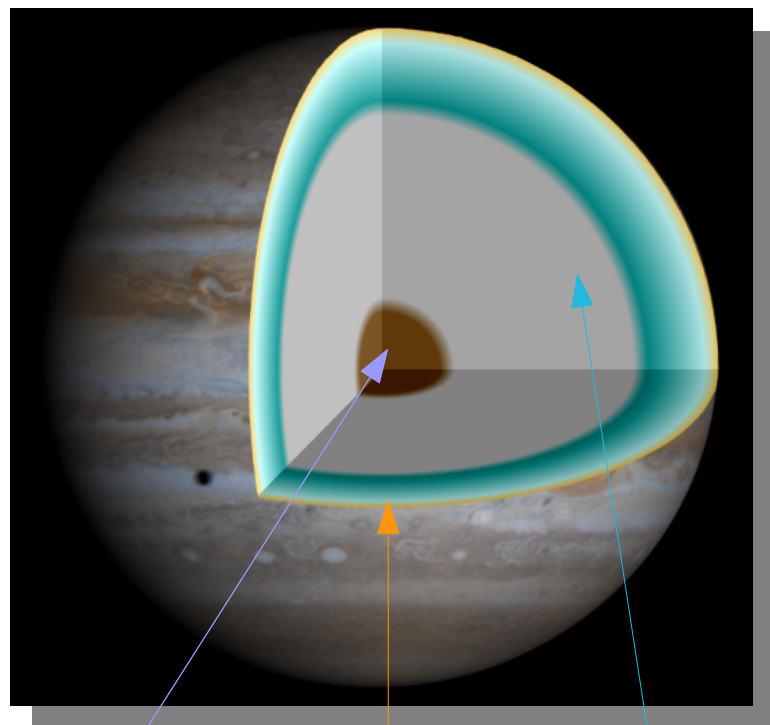
Pourquoi des simulations numériques en astrophysique ?



Exoplanètes autour de
HR 8799

- Moyens d'investigations directes limités.
- Comment déterminer la **structure interne** de ces objets ?
- Quelles informations sur l'**évolution** ?
- ***Simulations numériques outils de choix.***

Structure des planètes géantes gazeuses



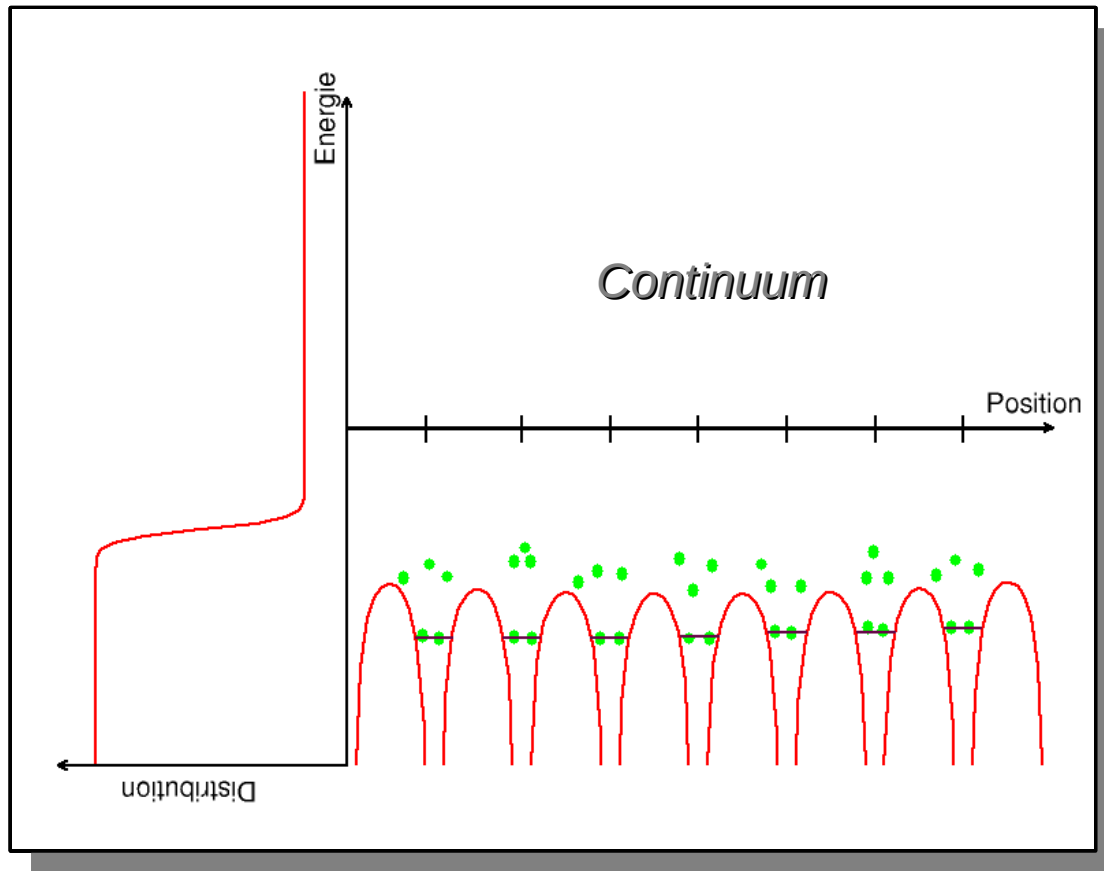
Cœur dense solide

Enveloppe fluide convective

Atmosphère observable

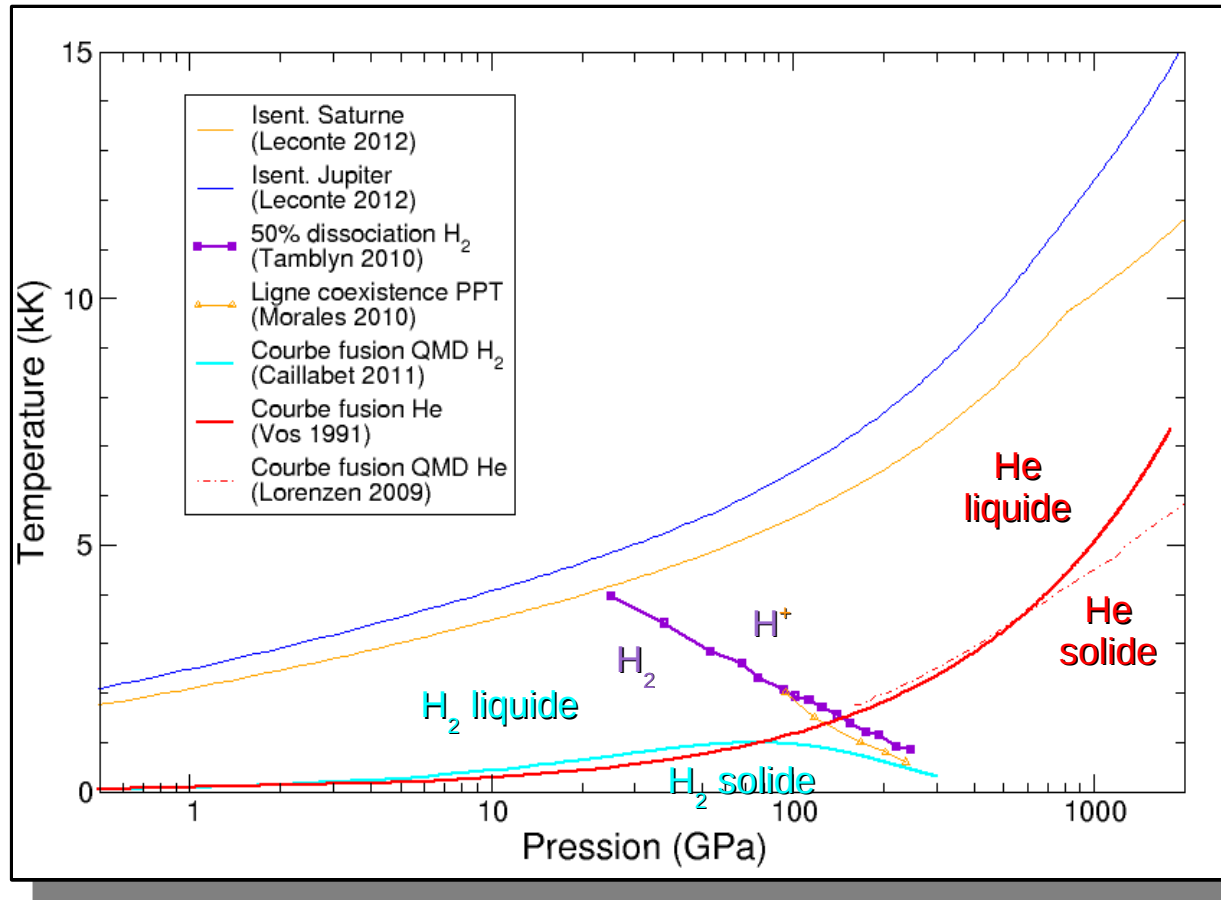
- Structure en trois zones principales :
 - **Cœur** dense **solide** de « roche » et de « glace »
 - **Enveloppe** fluide convective partiellement ionisée : phase **plasma dense**
 - **Atmosphère** essentiellement **moléculaire**
- Une grande inconnue est l'**influence** de la phase **plasma dense** sur la **structure** et l'**évolution** de la planète

Les plasmas denses



- **Plasma** : mélange ions/électrons
→ Processus d'**ionisation**
- **Plasma thermique** : ionisation par excitation thermique
- **Plasma dense** : ionisation par **compression**
→ Disparition des états liés
- Plasma fortement couplé aux propriétés spécifiques

Les phases des espèces pures



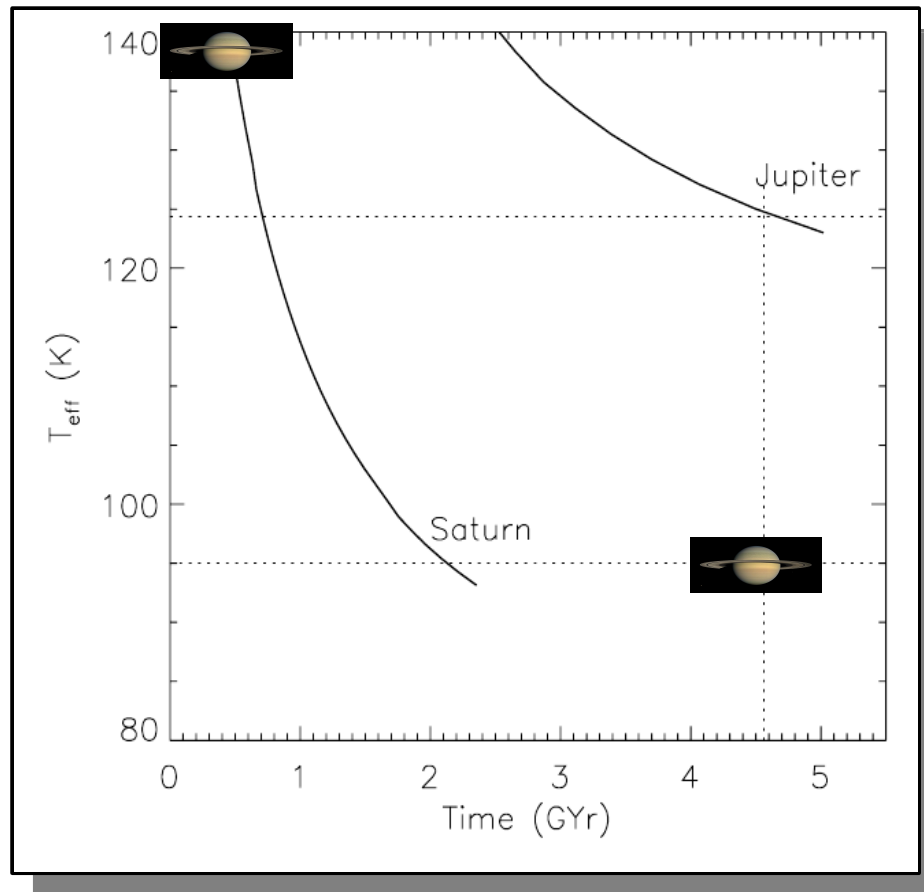
Profil P-T de Jupiter et Saturne et principales transitions de phase des espèces pures H et He.

- Dans les planètes : plasma composé de **H** (90%) et **He** (10%)

- Diverses transitions de phase :

- Fusion He
Vos, *JPCM* 3, 1613 (1991)
Lorenzen, *PRL* 102, 115701 (2009)
- Fusion H₂
Caillabet, *PRB* 83, 94101 (2011)
- Dissociation H₂...
Tamblyn, *PRL* 104, 65702 (2010)
- ... et ionisation
Morales, *PNAS* 107, 12799 (2010)

La surluminosité de Saturne...



Évolution de la température effective de Jupiter et Saturne.

Fortney, ApJ 608, 1039 (2004)

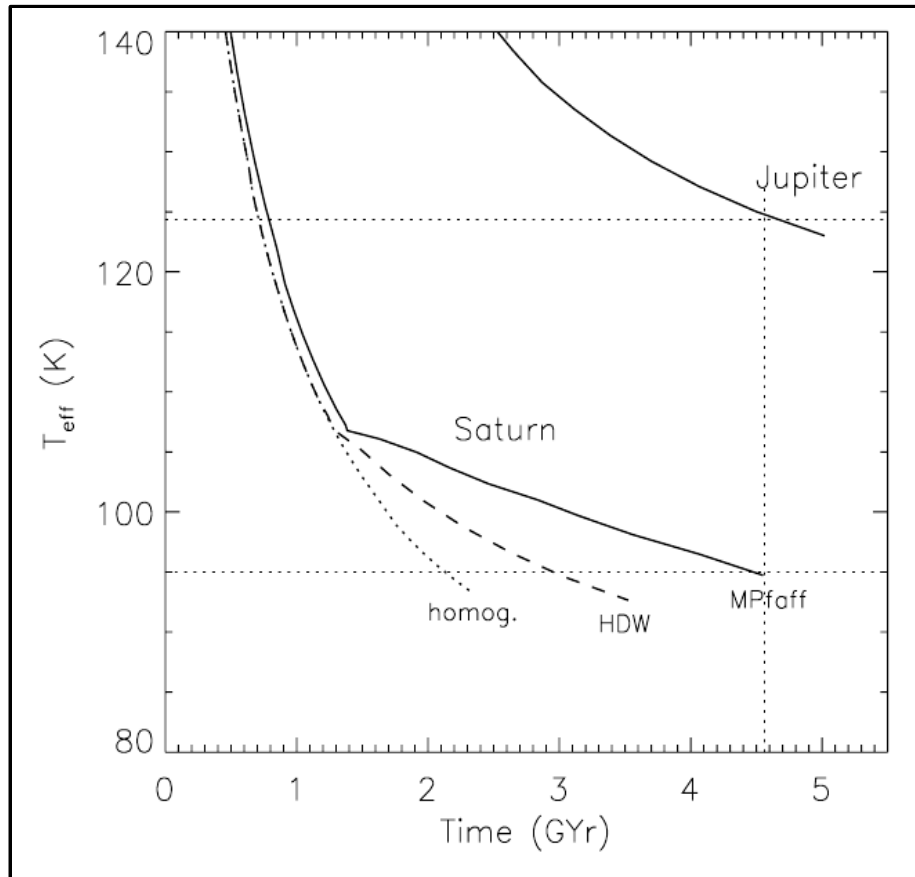
- Modèles d'évolution totalement homogène

- Compatibles pour Jupiter

- Problème pour Saturne :
 - ➔ Luminosité observée trop élevée pour son âge estimé

- Origine de cette surluminosité ?

... et la *démixtion*



Évolution de la température effective de Jupiter et Saturne avec une transition de *démixtion*.

Fortney, ApJ 608, 1039 (2004)

- **Idée : *démixtion*** → l'hélium neutre tend à se séparer de l'hydrogène métallique
- **Chaleur latente** → excès d'énergie à évacuer
- **Sédimentation** des phases riches en hélium : libération d'énergie gravitationnelle
- A priori satisfaisant...
- ... mais cette *démixtion* doit être confirmée !

Les méthodes d'investigation

- Système au nombre macroscopique de particules
+ effets quantiques ⇒ **Problème à N-corps quantique**

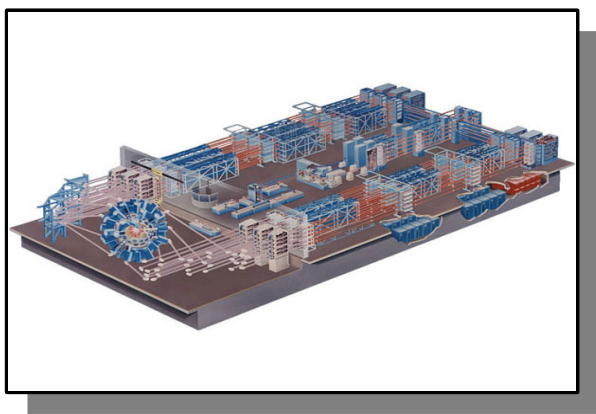
➤ Résolution du Hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha}^{N_n} \frac{\mathbf{P}_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} + \sum_i^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2} + \sum_{\alpha < \beta}^{N_n} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}|} + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{\alpha, i}^{N_n, N_e} \frac{Z_{\alpha}}{|\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{r}_i|}$$

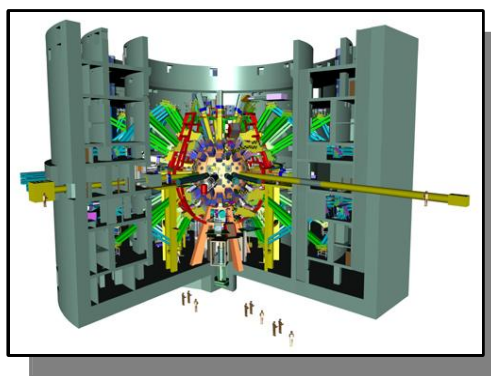
+ moyennes statistiques dans l'espace des phases

➔ Méthodes **numériques ab initio**

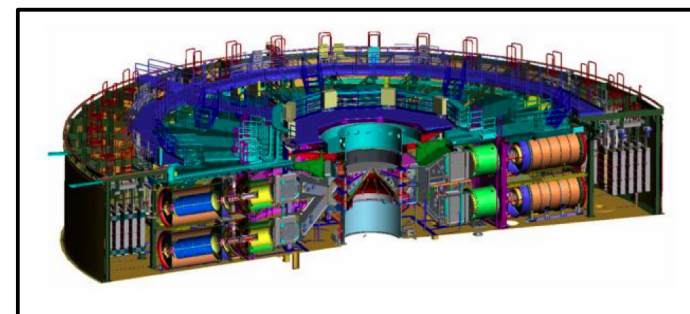
... et confrontation aux **expériences** de chocs



Laser OMEGA Rochester



Laser Mégajoule
Bordeaux



Z-machine
SANDIA

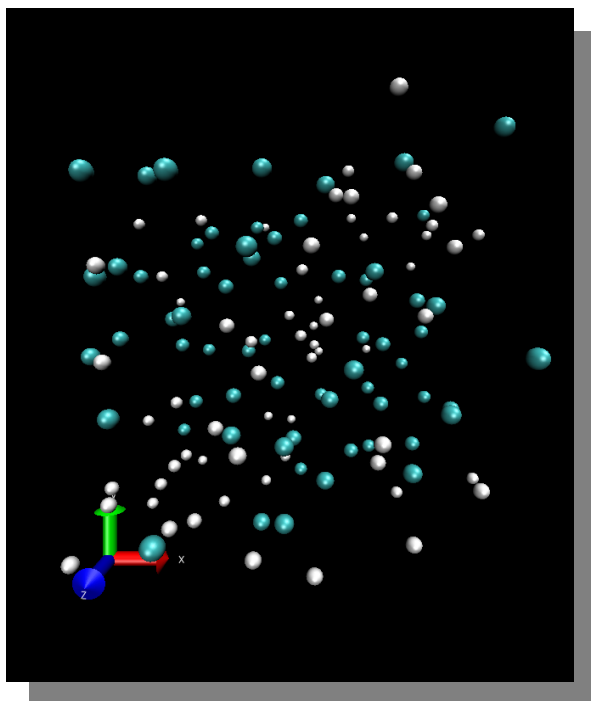
Les simulations de dynamique moléculaire quantique

- Représentent sur deux observations :
 - Approximation de **Born – Oppenheimer** : résolution électronique à configuration des noyaux fixée → **DFT**
 - Comportement **classique** des **noyaux** : dynamique calculée par la mécanique classique avec la densité électronique
- Utilisation du code **ABINIT**
 - Code matière condensée
 - **Massivement parallèle** (jusqu'à 1000 processeurs sans problème)
 - Des optimisations basées sur l'utilisation GPU (non utilisées ici)
 - Temps de calcul long (10000 à 100000 h) : **immense avantage du PSMN** avec des queues de **7 jours**

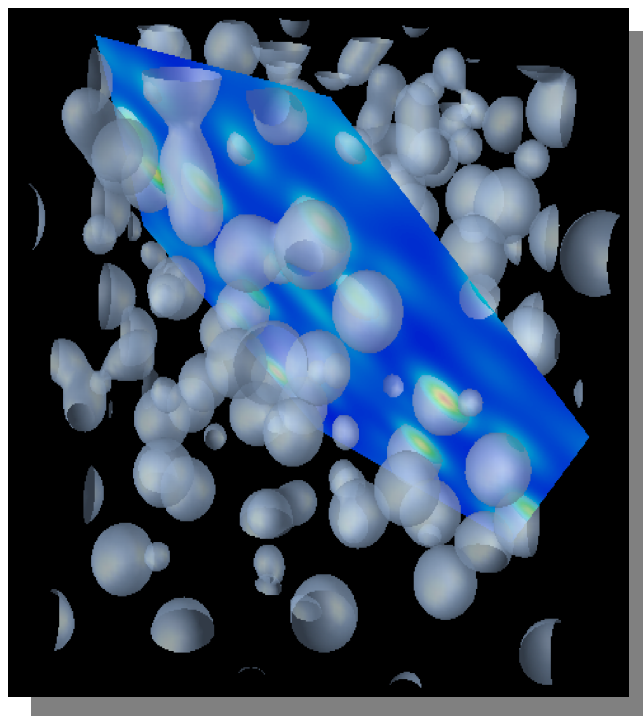
La dynamique moléculaire quantique

- Dynamique en deux étapes

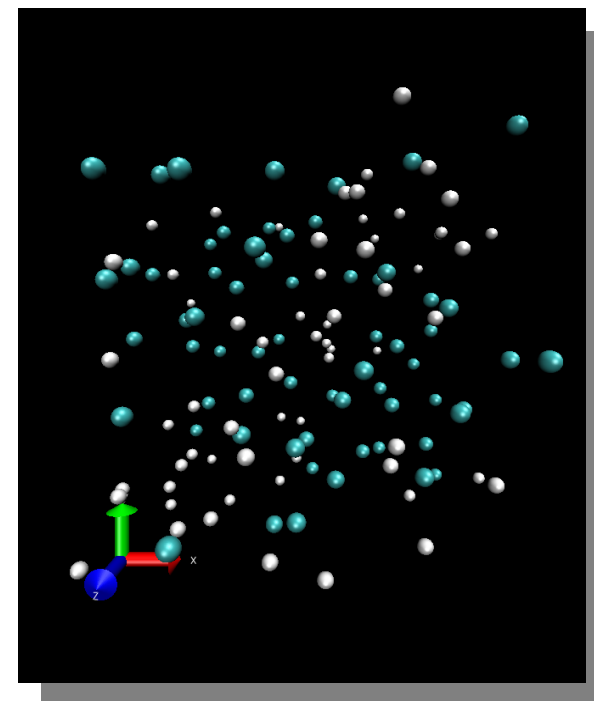
t



DFT



$t+\Delta t$



Position initiale des noyaux

On réitère et on moyenne dans le temps

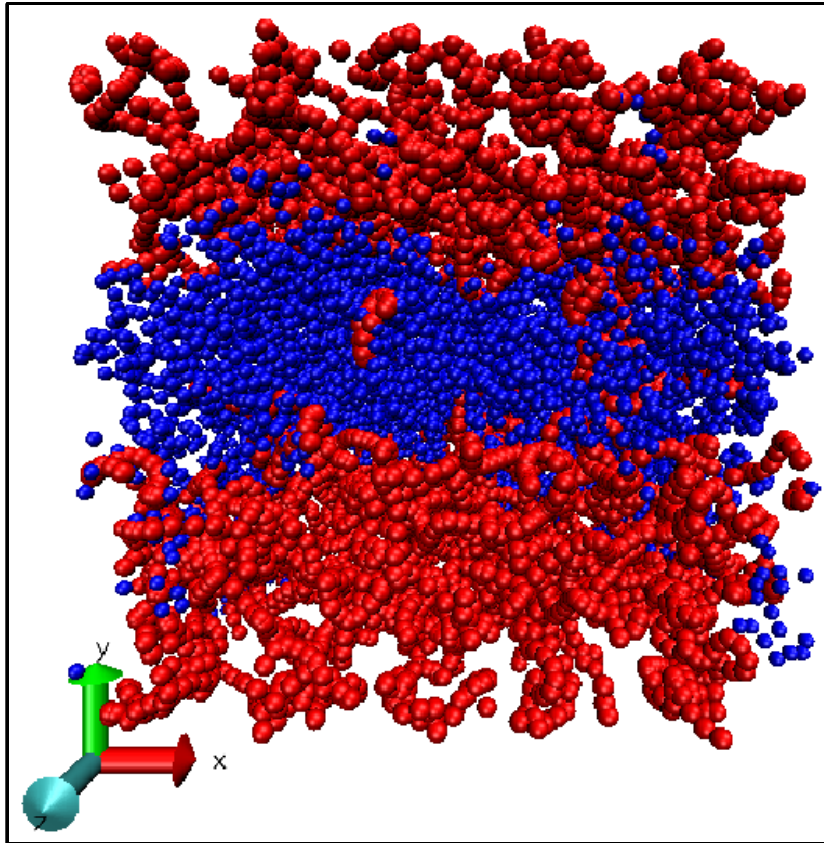
Calcul de la densité électronique

Évolution par l'algorithme de Verlet des positions des noyaux

Les caractéristiques des simulations

- Mélange **équimolaire** H-He
- 64 H – 64 He mais vérification jusqu'à 256/256
- Boîte de simulation cubique avec **CL périodiques**
- **Conditions initiales homogènes** : cristal type NaCl
- Pas de temps de **0,48 fs** pour environ 2000 pas de temps
- Utilisation d'un **thermostat** pour garder T constante
- **DFT à température finie**
- Densité de **0,2 à 3,6 g/cm³** et température de **1000 à 20000 K**
 - *Permet l'étude des propriétés du mélange dans la phase plasma dense*

Les trajectoires persistantes



Trajectoires persistantes des noyaux H (bleu) et He (rouge) à $2,80 \text{ g/cm}^3$ – 4005 K .

- Étude des **trajectoires persistantes**
 - Suivre les noyaux au cours du temps
- Majoritairement **homogène**
 - Trajectoires occupent tout l'espace
- Dans certaines conditions : **localisation** forte des **trajectoires**
 - Système **inhomogène**
 - **Démixtion...**
- Peu sensible aux conditions initiales et aussi vu avec 384 noyaux

La démixtion du mélange H-He

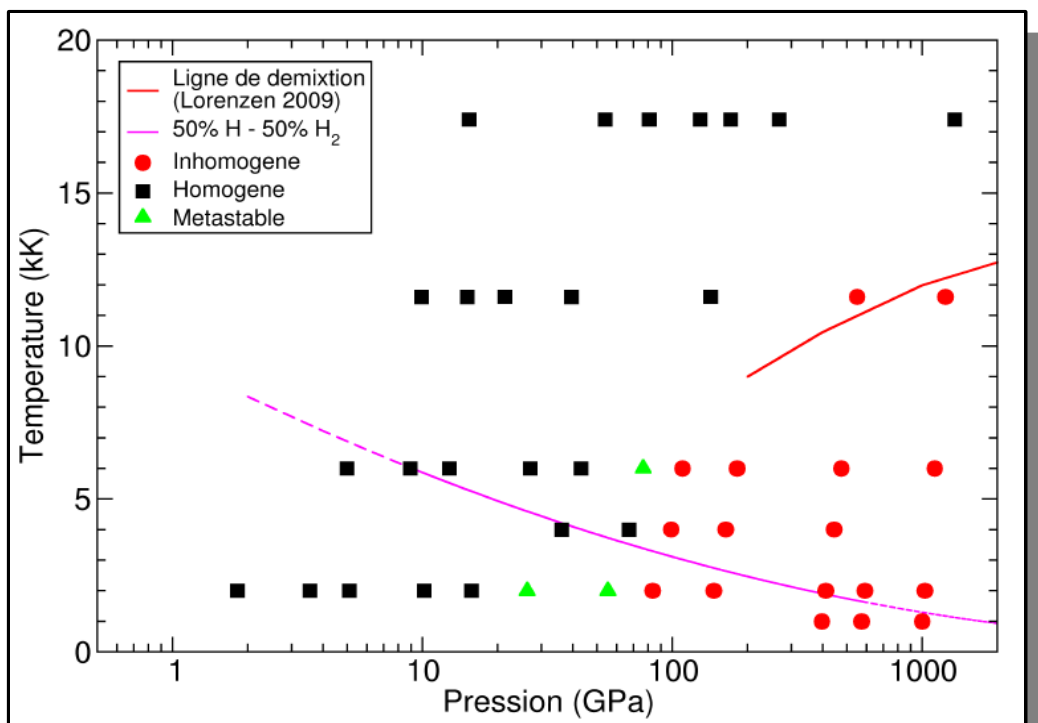
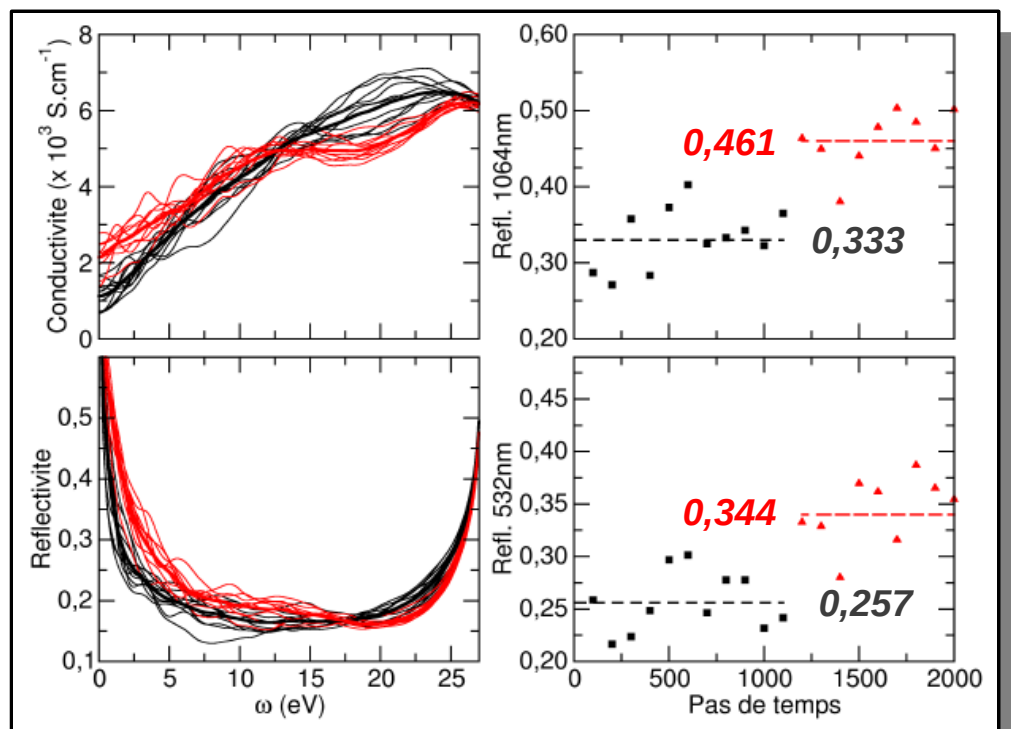


Diagramme P-T de la démixtion du mélange H-He et comparaison aux résultats de Lorenzen *et al* (2009) ainsi qu'à la ligne de dissociation/ionisation de H.

Soubiran et al. PRB (2013)

- Étude systématique « à l'œil » :
 - ➔ Diagramme P-T de la démixtion
 - ➔ Démixtion à basse température – haute pression
 - ➔ Résultats compatibles avec Lorenzen *et al.*
Lorenzen, PRL 102, 115701 (2009)
 - ➔ Compatible avec mécanisme de séparation de He neutre et H métallique
- Mais sujet à caution :
 - ➔ Des états métastables
 - ➔ Méthodes de discrimination non quantitative

La réflectivité lors de la démixtion



Conductivité électrique et réflectivité à différents instants et moyennes. Évolution temporelle de la réflectivité à 532 nm et 1064 nm. Simulation à $2,40 \text{ g/cm}^3 - 4000 \text{ K}$.

Soubiran et al. PRB (2013)

- Conductivité électrique et réflectivité : changement de comportement à la démixtion
 - Deux **formes différentes** avant/après la démixtion pour la conductivité et la réflectivité
 - Réflectivité à 532 nm et 1064 nm évolue nettement
 - Différence supérieure à 15%
 - **Décelable expérimentalement**
 - Échelle de temps numérique ~ **1 ps**
 - Échelle de temps expérimentale ~ qq ps
 - **Nucléation** dans les expériences mais pas de « grosses » bulles
- Une signature expérimentale sur la réflectivité devrait être observée

Un autre exemple : la formation des étoiles



Nébuleuse NGC 3584

Un autre exemple : la formation des étoiles



Nébuleuse NGC 3584

- Quels mécanismes en jeu lors de l'effondrement ?
- Quels processus physiques ? Quelles échelles ?
 - Dissociation des molécules
 - Champ magnétique
 - Processus de dissipations
 - Processus chimiques
 - Interactions rayonnement-matière
 - ...
- Quelles échelles de temps ?

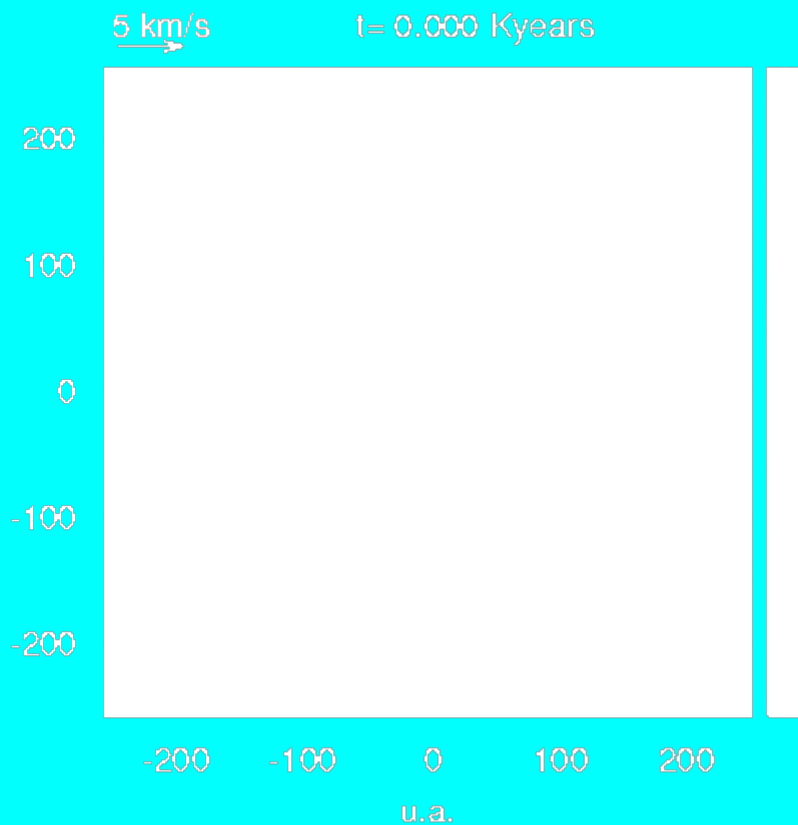
Les simulations de RMHD

- Résolution simultanée (ou presque) des équations de la magnétohydrodynamique radiative.
- Équivalent des simulations premiers principes mais à l'échelle mésoscopique : véritable **expérience numérique**.
- Utilisation du code **RAMSES**
 - Code cosmologique (à la base)
 - **Massivement parallèle** mais moins bon scaling dans le cas étudié (objets isolés)
 - **Mailles adaptatives** : fort gain de temps sans perte de résolution
 - Solveur de type Godunov (assure conservation du flux magnétique)
 - Temps de calcul long (10000 h) : **immense avantage du PSMN** avec des queues de **7 jours**

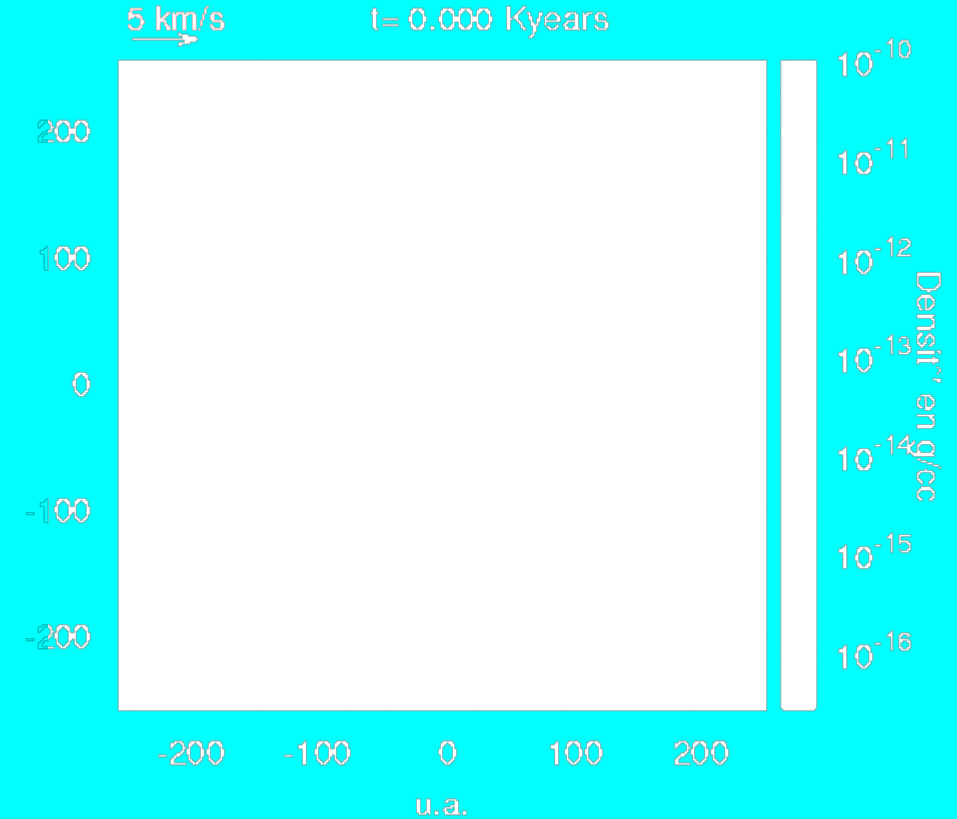
Les simulations de RMHD

- Conditions initiales : un cœur dense dans une boîte cubique
- Conditions aux limites réflexives (sans influence sur la dynamique au niveau du cœur).
- Masse de l'ordre de la masse solaire (paramètre déterminant les processus prépondérants)
- Ingrédients physiques :
 - Champ magnétique (MHD idéale ou non)
 - Transfert radiatif (gris ou multi-groupe)
 - Microphysique pour déterminer les abondances relatives
- Pas de temps adaptatif : condition de Courant

Comparaisons de simulations :

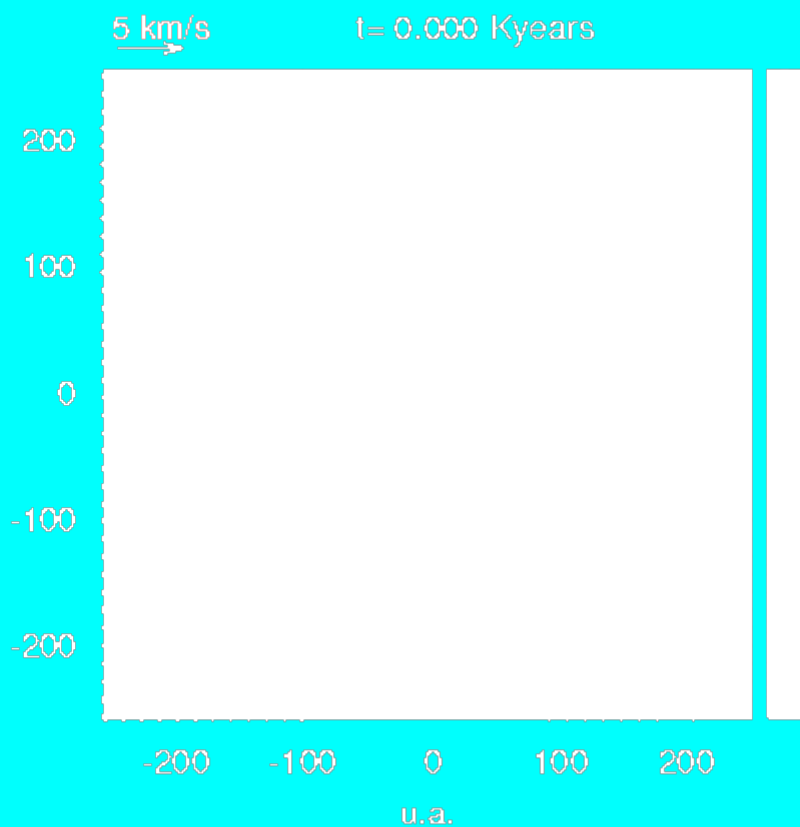


**Vue en coupe d'une
simulation MHD idéale**

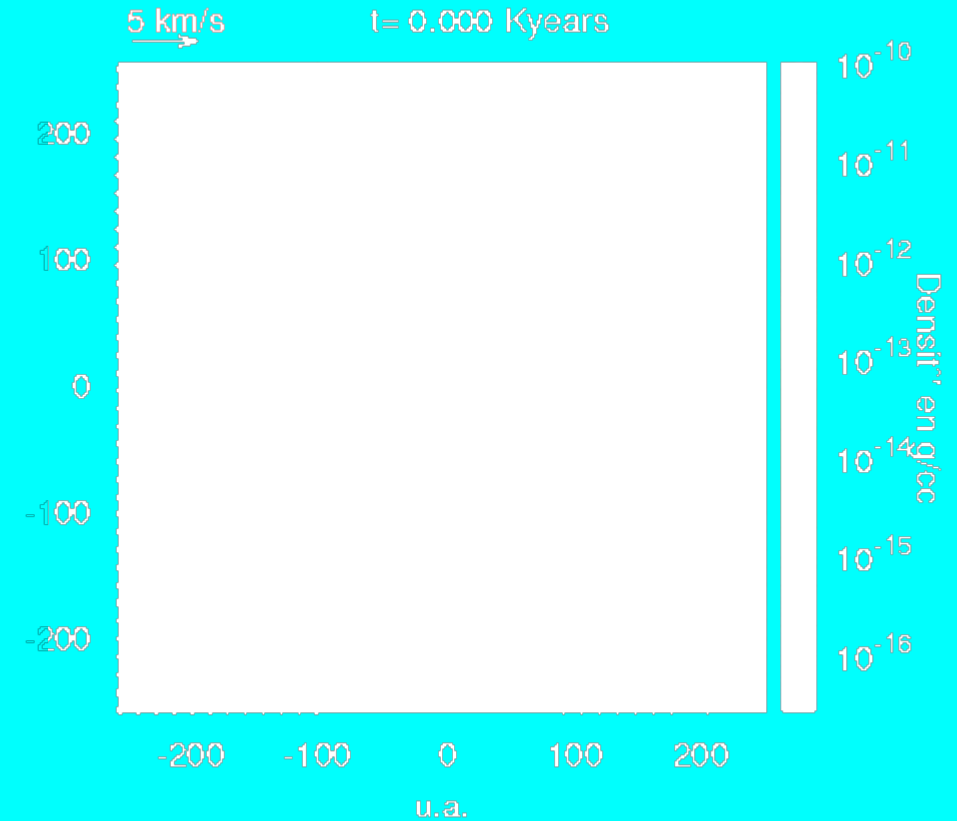


**Vue en coupe d'une simulation
MHD non idéale (diffusion
ambipolaire)**

Comparaisons de simulations :



Vue du dessus d'une simulation MHD idéale



Vue du dessus d'une simulation MHD non idéale (diffusion ambipolaire)

Conclusions

- La **microphysique** est déterminante dans les comportements à **grande échelle** des objets astrophysiques
- Les simulations sont un outil majeur pour **étudier les systèmes complexes**
- La dynamique moléculaire quantique : **approche premier principe**
 - Identification d'une démixtion
 - Caractérisation d'un diagnostic expérimental
- Simulations de magnétohydrodynamique radiative : véritable **expérience numérique**
- Identification des **processus clés** et des paramètres pertinents

Apports du PSMN

- Des **queues longues** de 7 jours
- Grande **stabilité** du système et grande **souplesse** grâce à différentes architectures.
- Permet des **calculs préliminaires** avant une bascule sur les grands centres mais aussi une **utilisation intensive** relativement automatisable.
- Avantage de la **proximité** : **interaction aisée** avec les techniciens
- Parfaite complémentarité avec les grands centres type CINES ou TGCC

MERCI !