

II.1. Introduction

La résolution du système d'équations qui gouverne la décharge couronne n'est pas une simple procédure mathématique. En effet, la recherche et la détermination des paramètres du champ électrique et de la charge d'espace sont en réalité des problèmes d'une grande complexité, à cause de la non-linéarité et de la réversibilité de ces équations. Le calcul du champ électrique nécessite la connaissance de la distribution de la densité de la charge d'espace et inversement [3]

Dans ce chapitre on décrit l'équation de Boltzmann et les équations qui caractérisent l'évolution d'une décharge électrique et on parle sur les différentes approches existant dans la décharge électrique et sur les différentes approximations.

II.2 Définitions

II.2.1 Fonction de distribution F_s

Les particules ne sont jamais statiques contrairement à ce qu'il pourrait paraître au niveau macroscopique. Les chocs entre particules leurs permettent d'avoir des vitesses isotropes extrêmement variées en module et en direction. A un instant donné une particule peut être ralentie, proche du repos, tandis qu'à un autre instant, par le fait d'un enchainement de collisions adaptées, la particule peut être animée d'une vitesse très élevée comparée à la moyenne des autres particules. Une succession d'un tel processus à chaque instant dans tout l'espace laisse suggérer que toutes les vitesses imaginables (en module et en direction) sont possibles. La seule différence réside dans la probabilité qu'une particule possède une quelconque vitesse. D'une autre manière, les vitesses des différentes particules vont se répartir autour de la vitesse la plus probable avec des probabilités plus au moins importantes. Une question qui s'impose, qu'elle est la fonction mathématique qui régit cette répartition (distribution) des vitesses autour de leur moyenne ?

$$dn(\vec{r}, \vec{v}, t) = d\vec{r} d\vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (\text{II.1})$$

Où :

$f(\vec{r}, \vec{v}, t)$:est la fonction de distribution spatiale de densité des particules, elle dépend de sept variables, trois variables correspondant à la position \vec{r} , trois variables correspondant la vitesse \vec{v} et une variable correspondant au temps t . La fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ obéit à une équation de transport appelée équation de Boltzmann et $d\vec{v} d\vec{r}$ représente l'élément de volume de l'espace des phases centrés sur \vec{r} et \vec{v} . [21]

II.2.2 Equation de Boltzmann

II.2.2.1 Histoire

Cette équation a été initialement formulée par Ludwig Boltzmann entre 1872 et 1875, mais elle a par la suite été reprise par Max Planck dans sa forme actuelle vers 1900. Pour citer Planck, "le lien logarithmique entre entropie et probabilité a été exposé pour la première fois par Boltzmann dans sa théorie cinétique des gaz".

La valeur de W était initialement destinée à être proportionnelle à la Wahrscheinlichkeit (le mot allemand pour probabilité) d'un état macroscopique pour une distribution de probabilité de micro-états possibles - la collection de "voies" (non observables) l'état thermodynamique (observable) d'un système peut être réalisé en assignant différentes positions (x) et impulsions (p) aux différentes molécules. Ainsi interprétée, la formule de Boltzmann est la formule la plus générale pour l'entropie thermodynamique. Cependant, le paradigme de Boltzmann était un gaz idéal de N identique particules, dont N_i sont en i état microscopique (page) de position et la vitesse de. Dans ce cas, la probabilité de chaque micro-état du système est égale, de sorte que Boltzmann était dans l'équivalent pour calculer le nombre de micro-états associés à un macro-état. W a été historiquement interprété à tort comme signifiant littéralement le nombre de micro-états, et c'est ce que cela signifie habituellement aujourd'hui. W peut être compté en utilisant la formule pour les permutations

$$W = \frac{N!}{\pi_i N_i!} \quad (\text{II.2})$$

Où i s'étend sur toutes les conditions moléculaires possibles et dénote factorielle. La "correction" du dénominateur est due au fait que des particules identiques dans le même état sont indiscernables. W est parfois appelée "probabilité thermodynamique" car il s'agit d'un entier supérieur à un, alors que les probabilités mathématiques sont toujours des nombres compris entre zéro et un.

II.2.2.2 Formule de l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + v \frac{\partial f_s}{\partial t} + a \frac{\partial f_s}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial f_s}{\partial t} \right\}_{\text{coll}} \quad (\text{II.3})$$

$\frac{\partial f_s}{\partial t}$: Représente le taux local de la variation de f au point (r, v) en fonction de temps.

$v \frac{\partial f_s}{\partial t}$: C'est le temps de la variation de f par suite de la diffusion des ions ou des électrons, c'est-à-dire la tendance du gaz à sa relation vers un état d'équilibre.

$\alpha \frac{\partial f_s}{\partial t}$: Ce temps traduit l'action des forces extérieures sur les particules, a été l'accélération de forces extérieures dues à l'action des champs électrique et magnétique.

$\left\{ \frac{\partial f_s}{\partial t} \right\}$: Est le terme de collision qui rend compte de la variation de la fonction de distribution. [22]

II.2.3 Equation de Poisson

L'équation de Poisson il s'écrit :

$$\nabla E = -\Delta V \quad (\text{II.4})$$

E : le champ électrique qui peut être obtenu par le gradient de potentiel électrique V .

Il est nécessaire de couple la résolution de l'équation de Boltzmann avec celle de L'équation de Poisson car cette équation donne les variations du champ électrique en fonction de la charge d'espace, l'équation de Poisson pour calcul du champ électrique s'écrit :

$$\Delta V = \frac{qe(ne-np)}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon} \sum e_i N_i \quad (\text{II.5})$$

Avec :

V : représente le potentiel

ε : La permittivité du milieu (gaz) $\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$

ε_0 : La permittivité de vide $= 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$

ε_r : La permittivité relative

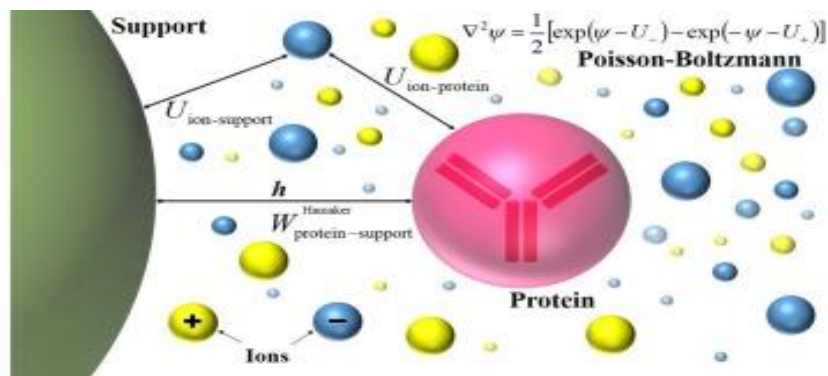
q_e : est la charge élémentaire

n_e : la densité des électrons

$e = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$: est la charge d'électron

N_i et e_i représentent la densité et la charge électrique de la i ème espèce.

L'équation de Boltzmann couplée à celle de Poisson forme un modèle électrique auto cohérent de la décharge. Les seules données nécessaires sont les sections efficaces pour chaque type de collisions. La figure (II.1) représente une description complète des phénomènes de transport (Boltzmann-Poisson). [13]



La figure II.1 : Boltzmann-Poisson. [22]

II.3 Modèle physique

II.3.1 Modèle électrique auto cohérent

Le modèle électrique d'une décharge et du plasma associe décrit le couplage entre phénomènes de transport des particules chargées et champ électrique. Dans un plasma. Les phénomènes de transport des particules chargées sont parfaitement décrits par l'équation Boltzmann.

Cette équation établit le bilan des variations de la fonction de distribution des particules chargées sous l'effet, d'une part des forces extérieures (champ électrique) et d'autre part, des collisions électron- neutre ou ion-neutre. De cette distribution peuvent être déduire les variations spatial à chaque instant de grandeurs moyennes telles que la densité (\vec{r}, t), la vitesse moyenne dirigée $v(\vec{r}, t)$, l'énergie moyenne $E(\vec{r}, t)$ ou les fréquences moyennes des différents processus de collision. Dans une décharge, les équations de transport de la particule chargée doivent être couplées à l'équation de Poisson déterminant le champ électrique (modèle auto cohérent).

La résolution numérique de l'équation de Boltzmann est délicate, son couplage à l'équation de Poisson rendant le problème encore plus difficile. C'est pourquoi il existe une hiérarchie de modèle physique correspondant à différents degrés d'approximation des phénomènes. [8]

II.3.2 Théorie cinétique des gaz ou des plasmas

Le traitement de la théorie cinétique des gaz ou des plasmas sous un aspect plus approfondi est basé sur la connaissance de la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ relative à chaque variété d'espèce présente dans le milieu étudié. Déterminer cette fonction n'est pas une tâche facile, dans un gaz non uniforme en composition, en vitesse, en énergie (température), ou dans un plasma fortement collisionnel, ou bien hors équilibre, cette fonction de distribution devient très compliquée à établir.

L'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ obéit à une équation type intégro-différentielle, dite 'équation de Boltzmann.

II.3.3 Approche microscopique

L'approche qui consiste à résoudre les équations de Boltzmann électronique et ionique couplées à l'équation de Poisson permet une description fine du problème car elle donne accès aux fonctions de distribution des vitesses des particules chargées. Cette approche, que nous qualifierons d'approche microscopique est plutôt utilisée dans des conditions relativement peu collisionnelles (c'est à dire où les libres parcours des particules chargées ne sont pas très petits par rapport aux dimensions caractéristiques macroscopiques du problème).

Dans le cas des décharges électriques dans un gaz à haute pression (de l'ordre de la pression atmosphérique) les méthodes microscopiques sont moins justifiées et plus difficiles à mettre en œuvre en raison des temps de calcul très élevés qu'elles impliquent. On a donc recours à une approche plus macroscopique des phénomènes dans laquelle les propriétés des particules chargées ne sont pas représentées par des fonctions de distribution des vitesses,

Mais par des grandeurs macroscopiques qui sont des moments dans l'espace des vitesses, de ces fonctions de distribution (densités, vitesses moyennes, énergie moyenne). [23]

II.4 Modèle fluide

Les équations cinétiques sont très complexes, la description de la cinétique électronique et ionique dans un gaz faiblement ionisé à l'aide de l'équation de Boltzmann nécessite des simplifications. Néanmoins une solution approchée dans laquelle nous pouvons supposer que les caractéristiques principales d'une décharge électrique sont bien déterminées par les termes moyens de certains paramètres tels que la densité, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne, etc. De cette façon, les équations de Boltzmann pour la description des décharges électriques peuvent être remplacées par quelques caractéristiques moyennes appelées les moments de l'équation de Boltzmann qui correspondent à une série infinie d'équations hydrodynamiques. Ces paramètres moyens constituent les équations du modèle fluide ou macroscopique. [24]

II.4.1 Equation de continuité

La forme générale de l'équation de continuité est la suivante :

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + \nabla(J_i) = S_i \quad (\text{II.6})$$

Où :

N_i et J_i représentent la densité et le flux de la $i^{\text{ème}}$ espèce. Le terme source est noté par S_i , il est calculé comme étant le produit des taux de réaction avec les densités des espèces réactants. La résolution de l'équation (II.6) donne les distributions spatio-temporelles des espèces générées par la décharge électrique. Pour résoudre cette équation, il est nécessaire de connaître le flux J_i et S_i . [8]

II.4.2 Equations de transfert de quantité de mouvement

Nous supposons, pour l'équation de transfert de quantité de mouvement, l'approximation de dérive-diffusion. Les équations de transfert de quantité de mouvement pour les particules chargées et les particules neutres s'écrivent respectivement :

$$J_i = N_i V_z - D_i \nabla N_i + q_i \mu_i N_i E \quad (\text{II.7})$$

$$J_i = N_i V_z - D_i \nabla N_i \quad (\text{II.8})$$

Où :

V_z : la vitesse d'écoulement gaz.

$q_i \mu_i$ et D_i sont la charge, la mobilité et le coefficient de diffusion de l'espace chargé i respectivement

Le flux des particules neutres s'écrit comme la somme d'un terme de diffusion $- D_i \nabla N_i$ et d'un terme de convection du gaz $N_i V_z$. Le flux des particules chargées contient un terme supplémentaire de dérive $q_i \mu_i N_i E$. [8]

II.4.3 Equation de densité de courant :

Il s'écrit comme suit :

$$\vec{J} = \mu \bar{\rho} \vec{E} + D \nabla \rho \quad (\text{II.9})$$

Où μ la mobilité moyenne des ions, ρ la densité volumique de la charge d'espace et D le coefficient de diffusion ionique. Ces équations seront utilisées dans la formulation du système d'équations que l'on va résoudre. [3]

II.4.4 Équation d'énergie

L'équation de continuité de quantité de mouvement, et d'énergie sous les formes ci-dessus, complète l'équation de Poisson (II.5). On peut ajouter un troisième moment pour les particules au système pour améliorer la représentation des processus d'ionisation.

On peut considérer que le terme source d'ionisation dans ce modèle dépend de l'énergie et non plus du champ local. La nouvelle équation est obtenue en multipliant par $1/2mv^2$ l'équation de Boltzmann et en l'intégrant dans l'espace des vitesses.

$$\frac{\partial w_e}{\partial t} + \nabla(v_e \cdot w_e) + \nabla(P_e v_e) + \nabla Q_e = -qEN_e v_e - N_e \sum_k \varepsilon_k \nu_k \quad (\text{II.11})$$

Où

$$w_e = N_e \left(\frac{1}{2} m v_e^2 + \frac{2}{3} K T_e \right) \quad (\text{II.12})$$

P_e : la pression électrique

Avec :

v_e : la vitesse moyenne des électrons.

Q_e : le flux de chaleur.

ε_k : L'énergie de collision entre un électron et une particule K .

ν_k : La fréquence moyenne des différents processus de collision inélastiques.

La résolution de cette dernière équation pour les électrodes est plutôt coûteuse en temps de calcul et peut être avantageusement remplacée par l'approximation dite du champ local. Dans cette hypothèse le gain d'énergie des électrons est contre balancé localement exactement par les pertes par collisions avec les neutres. Le corollaire de l'approximation du champ local est que tous les coefficients de transport, les mobilités, les coefficients de réactions à un point donné et à un instant donné ne sont fonction que du champ électrique. De plus les valeurs de ces coefficients sont les mêmes que celles obtenues en résolvant l'équation de Boltzmann pour les éléments en régime permanent sans gradient spatiaux et sous champ uniforme [8]

II.4.5 Approximation de champ local

Dans l'approximation du champ électrique local, il est supposé qu'il n'y a aucun transport d'énergie dans le système autre que les processus collisionnels. Cette hypothèse est la conséquence de la fait que nous avons négligé les termes du flux d'énergie dans l'équation d'énergie électronique. En particulier, cette approximation implique que l'énergie électronique est

directement liée, spatialement et temporellement au champ électrique, et que leur chauffage est exactement équilibré par la perte d'énergie dans les collisions.

Ce modèle utilise comme relation de fermeture l'hypothèse de l'approximation du champ électrique local qui suppose que les deux paramètres du transport électronique et les coefficients de réaction calculés à une position r et à un temps t données, sont une fonction exclusive du champ électrique réduit local $\vec{E}(\vec{r}, t)/N$ où E est l'amplitude du champ électrique et N est la densité du gaz. En d'autres termes, la fonction de distribution électronique en un point de l'espace des phases (\vec{r}, t) est supposée être la même que celle existant dans un champ électrique uniforme réduit égal à $\vec{E}(\vec{r}, t)/N$. Cet équilibre avec le champ électrique local implique que l'énergie gagnée par les électrons soumis au champ électrique est compensée par les pertes d'énergie dues aux collisions localement. L'idée originale derrière cette approximation était d'utiliser les données expérimentales des paramètres de transports électroniques d'une décharge à courant continu de Townsend avec les coefficients de réaction électroniques calculées pour différentes valeurs de $\vec{E}(\vec{r}, t)/N$. Les coefficients de réaction électroniques ont été obtenus par intégration de l'échantillon d'électron correspondant à une fonction de distribution électronique locale, calculée à partir de la solution (indépendante de l'espace et du temps) à l'aide de l'équation de Boltzmann homogène d'électron.

Généralement, les modèles des décharges électriques qui utilisent cette approximation pour assurer la fermeture du système d'équations. Cependant, la supposition est normalement insuffisante dans les régions de la gaine (où les électrons ne sont plus en équilibre avec le champ électrique) ce qui conduit à une surévaluation des paramètres de transports électroniques au niveau des limites du domaine de calcul. En général, Ce problème est évité en imposant comme solution pratique des de transports électroniques dans la région des gaines. En effet, ils peuvent gagner de l'énergie dans le champ intense. [24]

II.5 Modèle Hybride

Le terme « hybride » est utilisé pour désigner soit des simulations qui tiennent compte de deux groupes d'électrons, ou des codes complexes pour la modélisation des décharges plasmas.

Le modèle hybride est utilisé pour désigner une simulation en considérant deux ensembles d'électrons. Ces deux groupes de populations électroniques sont relativement indépendants. Le premier inclut la majorité des électrons à faible énergie. Le deuxième groupe est composé par les électrons énergétiques accélérés en présence du champ électrique. Afin d'optimiser le temps de calcul les électrons du premier groupe sont traités à l'aide du modèle fluide. Par contre, les électrons rapides sont traités en adoptant une méthode de type Monte Carlo (MC). Le but du

modèle hybride est de combiner les avantages des modèles microscopique et fluide en traitant par exemple certaines régions de la décharge (chute cathodique) par un modèles particulaire et d'autres régions (lueur négative ou il y a beaucoup plus de collisions) par un modèle fluide. Les modèles hybrides les plus répandus sont ceux où l'on associe un code Monte Carlo à un modèle de type fluide. Il est également possible de développer des codes numériques hybrides en combinant différents modules de calcul décrivant les différents processus survenus dans la phase gazeuse ou des interactions gaz-surface.

La figure (II.2) représente le schéma bloc d'un modèle hybride

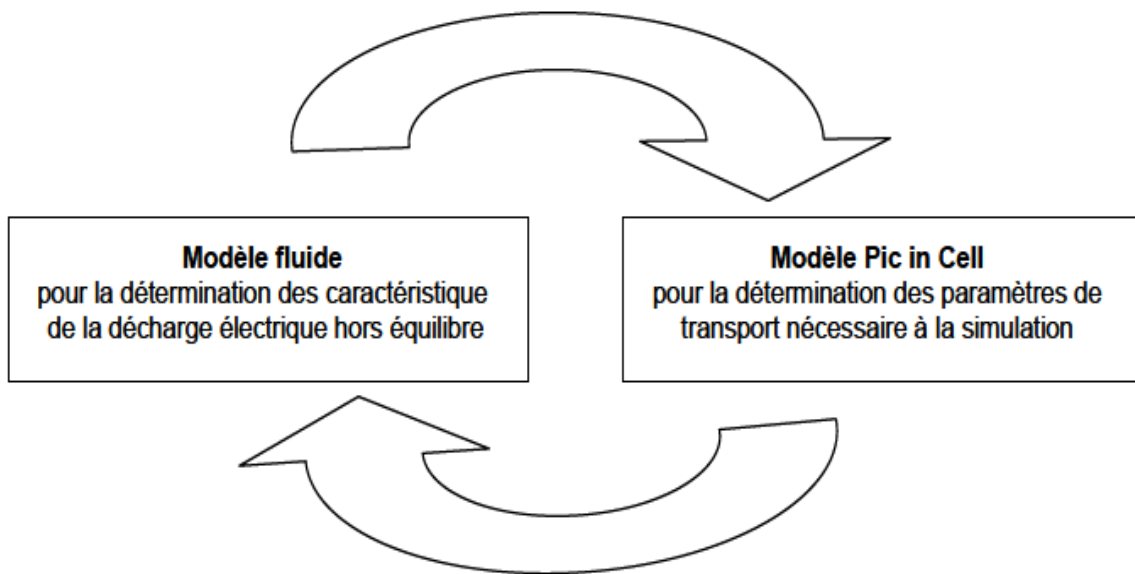


Figure II.2: Schéma bloc d'un modèle hybride. [5]

II.6 Modèles à deux groupes d'électrons :

On suppose que la fonction de distribution électronique est composée de deux parties. Une partie représente les électrons rapides qui forment un faisceau mono énergétique traité dans l'approche de l'énergie moyenne locale (décrit par l'équation de continuité et l'équation d'énergie) tandis que les électrons moins énergétiques du plasma, formant le corps de la fonction de distribution, sont traités par l'approximation du champ électrique local ou de l'énergie moyenne locale (décrit par l'équation de continuité et l'équation de transfert de quantité de mouvement). Ce modèle surestime la densité des électrons rapides ainsi que leur ionisation dans la lueur négative (ils forment le faisceau mono énergétique) mais donne des résultats physiquement raisonnables. Le modèle à plusieurs groupes d'électrons apporte une amélioration qui permet de tenir compte de la distribution énergétique des électrons rapides. [24]

II.7 Conclusion :

La modélisation des plasmas est basée sur les équations de conservation des différentes particules ou bien sur les équations de Boltzmann. Pour une meilleure compréhension des processus plasmas et de la décharge, en particulier, nous avons élaboré un modèle fluide auto-cohérent, basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Ces deux moments sont les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement qui sont couplées à l'équation de Poisson, en utilisant l'approximation du champ local.

On a ensuite défini les quatre modèles mathématiques utilisés pour simuler une décharge, à savoir les modèles cinétiques basés sur la résolution de l'équation de Boltzmann, les modèles fluides basés sur la résolution de l'équation de continuité, l'équation de transfert de la quantité de mouvement et l'équation de l'énergie pour les espèces ionisées présentes dans le plasma.

Le quatrième modèle qu'on a utilisé est dit modèle de dérive-diffusion. On fait appel uniquement aux deux premiers moments, pour le deuxième moment, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est simplifiée. Le concept physique étant défini, il reste à trouver les outils numériques nécessaires pour résoudre les équations du modèle.

Dans le chapitre qui suit, nous donnerons les différents résultats obtenus.