

°0

ြင်

60

60

60

**République Algérienne Démocratique et Populaire** 



80

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Université des Sciences et de la Technologie Oran Mohammed Boudiaf -USTO-MB-

> Faculté de Génie Electrique Département de l'Electrotechnique

> > **POST- GRADUATION**

**Option : Intégration pour l'Electronique de Puissance et Matériaux** IEPM

# **MEMOIRE DE MAGISTER**

Présenté par : Mme Bouabdelli Aicha

Modélisation des décharges haute pression

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_\_

00

00

# Devant le jury composé de :

Mr FLAZI SAMIR Mme FLITTI AICHA Mr MAHI DJILLALI Mr BELARBI AHMED WAHID

00

00

00

MAITRE DE CONFERENCES A PROFESSEUR PROFESSEUR

PROFESSEUR

00\_

\_ ° ° –

PRESIDENT DU JURYUSTO-MBENCADREURUSTO-MBEXAMINATEURUAT- LAGHOUA'EXAMINATEURUSTO-MB

A mes parents

A mon mari

A mes filles (Racha et Ines)

A mes frères et sœurs

A tous ceux qui me sont chers

# <u>REMERCIEMENTS</u>

Je remercie le dieu, tout puissant, de m'avoir donné la force pour suivre, ainsi que l'audace pour dépasser toutes les difficultés.

Mes sincères remerciements sont adressés à Monsieur Azzeddine Hamid Professeur à l'USTO-MB, de m'avoir accueilli dans son groupe de recherche au niveau du laboratoire de recherche Intégration pour l'Electronique de Puissance et Matériaux (IEPM) de la Faculté de Génie Electrique à l'Université des Sciences et de la Technologie d'Oran. Je tiens également à lui exprimer ma profonde reconnaissance de m'avoir accordé sa confiance dans mes capacités en me encadré avec patience et sagesse durant toute la période de la préparation de ce mémoire. J'ai largement profité de son immense savoir scientifique et de sa capacité à transformer un problème apparemment compliqué en solution en outre, il a contribué à l'ambiance sympathique et agréable dans la quelle j'ai eu la chance d'accomplir ce travail merci pour la disponibilité, la gentillesse et tes conseils toujours précieux

Je remercie également Madame Aicha Hamid née Flitti, maitre de conférence A chargée de cours à l'USTO-MB, pour son encadrement, son aide et ses lumineux conseils, notamment dans les moments difficiles.

J'adresse mes remerciements à Messieurs les membres de Jury pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail et en particulier **Monsieur Flazi Samir**. Professeur à l'USTO-MB et Président du jury, **Monsieur Mahi Djillali**, Professeur à l'UAT-LAGHOUAT et **Monsieur Belarbi Ahmed Wahid** Professeur à l'USO-MB. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma sincère reconnaissance et mes respectueuses salutations pour le temps consacré à la lecture de ce document et l'amélioration suggérées.

Je ne pourrais oublier mon mari Mlata Yassine et mes chère filles Racha Sarah, Ines Nesrine qui Mon accompagné pendant cette aventure et leur soutien qui n'a j'aimais failli. Bien que nuls remerciements ne puissent exprimer les sentiments d'amour de reconnaissance et de gratitude que j'ai prouvé à leur égard.

J'adresse ensuite mes plus chaleureux remerciement et toute mon affection et mon amour A mes très chère parents **Bouabdelli Attia** et **Rabhi** mes frère **Dahmen, Bel khair** et mes sœur **Fatima** (Bent-Saim), **Nora** (Nadjet), **Nadia**, **Malika** et à toute la famille **BOUABDELLI** de Djelfa.

Mes respectueuses salutations à toute la famille Mlata pour leur soutient et Je les remercié pour leur temps consacré à mes enfants Pendant ma thèse.

J'aimerais remercier mes copains sur des périodes différentes et mes amies pour leur disponibilité et leur amitié. Je tiens à remercier tout particulièrement, Salima Djerroud, Nadia Benattou, Halima Loukil qui ont été mes compagnons sur différentes périodes d'accepté de consacrer une partie de leur temps pour me recevoir et à tous ceux qui m'ont aidé à la réalisation de ce modeste travail c'essentiellement grâce a leur aide que j'ai pu réaliser cette étude.

Je veux associer à ces remerciements l'ensemble des membres du laboratoire qui par leur sympathie, ont rendu cette période agréable et en particulier.

Merci à tous.....

#### **BOUABDELLI AICHA : Modélisation des décharges haute pression**

Thèse de magister de l'Université des Sciences et de la Technologie d'Oran

#### Spécialité : Intégration pour l'Electronique de Puissance et Matériaux

#### RESUME

Ces travaux de recherche sont consacrés à la modélisation numérique en 1.5D du transport des particules chargées dans les décharges hors-équilibre de type filamentaire. La configuration choisie est de type pointe plan dans le milieu gazeux azote à la pression atmosphérique. On a opté pour un modèle hydrodynamique (modèle de dérive-diffusion) issu du couplage auto-cohérent des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann à l'équation de Poisson.

On a résolu les équations de conservation des particules chargées soumises à des forts gradients de densité et à de fortes variations du champ électrique à l'aide du schéma numérique Scharfetter et Gummel d'ordre zéro établi par Kulikovsky. La résolution de l'équation de Poisson est effectuée en 2D par la méthode des disques afin de tenir compte de l'expansion radiale de la décharge (présence de charge d'espace très importante).

On a obtenu la densité électronique, la densité ionique, le champ électrique suivant l'axe de propagation et la densité de charge d'espace. On a aussi fait une étude paramétrique en faisant varier une seule condition initiale à la fois (pression, tension, hauteur de la gaussienne, valeur du font de préionisation, valeur du coefficient êta) pour voir l'effet de ce changement sur la vitesse de l'onde d'ionisation et les formes des profils des différentes caractéristiques.

#### **MOTS CLES**

Equation de Boltzmann ; Equation de dérive-diffusion en 1D ; Schéma de Scharfetter et Gummel d'ordre zéro ; Champ de charge d'espace ; Equation de Poisson; Méthode des disques (2D) ; Paramètres et coefficients de transport ; Décharges filamentaires.

الخلاصة:

خصصت هذه المذكرة لوضع نموذجية رقمية ذات البعد 1.5 لتنقل الجسيمات المشحونة في الإنفراغات الغير متجانس من نوع خيطية . التكوين المحدد هو من نوع نقط خط في وسط غاز النتروجين في الضغط الجوي.

اختزنا نموذج الأيروديناميك ( نموذج مشتق-النشر ) الناتج عن ترابط العزمين الأولين لمعادلة بولتزمان ومعادلة بواسون . حللنا المعادلات تنقل الجزيئات المشحونة تحت تأثير التغيرات القوية للكثافة و الحقل الكهربائي باستخدام الطريقة

الرقمية ألا وهي شاغفتي وقامل من الدرجة الصفر التي وضعها كيلكوفزكي .

يتم حل معادلة بواسن على بعدين بواسطة طريقة الاقراص ، ليتم الأخذ بعين الاعتبار التوسع الشعاعي لتفريغ ( بسبب تواجد الشحنة الموقعية المهمة كثيرا) تم الحصول على كثافة الالكترونات ، كثافة الأيونات، الحقل الكهربائي على طول محور من انتشار وكثافة الشحنة الموقعية و كذلك سمحت لنا الدراسة ألعددية بواسطة متغير شرط اولى واحد في وقت واحد ( ألضغط ، الجهد ، ارتفاع قوسيان، معامل إيتا ، ....) لمعرفة تأثير هذا التغير على سرعة موجة التأين و أشكال من الخصائص المختلف.

#### الكلمات المفتاحية

معادلة بولتزمان معادلة مشتق الانتشار ذات البعد الواحد رسم شاغفتي و قامل من الدرجة صفر حقل الشحنات الموقعية معادلة بواسون طريقة الاقراص(على بعدين) عوامل و معاملات النقل التفريغات الخيطية

# **INTRODUCTION GENERALE**

Le travail de recherche du présent mémoire a été effectué au sein du laboratoire de recherche Intégration pour l'Electronique de Puissance et Matériaux (IEPM) de la Faculté de Génie Electrique à l'Université des Sciences et de la Technologie d'Oran.

Cette étude est effectuée dans le cadre d'un travail de recherche général concernant la modélisation et la simulation numérique des plasmas froids hors-équilibre ou non thermiques.

Dans ce travail, on s'intéresse au transport des particules chargées dans les décharges horséquilibre créant des plasmas non thermiques où la température des électrons est beaucoup plus grande que celles des particules lourdes.

On s'intéresse plus particulièrement aux décharges à la pression atmosphérique telles que les décharges streamer ou filamentaires. Cette étude est motivée par l'intérêt que suscite ce type de décharge dans de nombreuses applications industrielles (stérilisation médicale, traitement des polluants gazeux, traitement de surface, génération d'ozone).

Les technologies plasma sont des procédés propres avec des enjeux stratégiques majeurs. Elles prennent une part de plus en plus importante dans les industries dites de haute technologie, soit en raison des avantages qu'elles procurent dans le cadre d'une production industrielle exigeante, soit pour leur réputation de technologie propre vis-à-vis de l'environnement.

Ces procédés interviennent ainsi dans des secteurs stratégiques de l'industrie et de la recherche scientifique où les enjeux industriels et les retombées socio-économiques sont considérables. En recherche fondamentale et appliquée, les décharges électriques se révèlent indispensables à la mise en œuvre de projets innovants.

Les besoins industriels grandissants n'auraient pu entrainer à eux seuls la croissance de la modélisation, s'ils n'avaient pas été accompagnés d'une formidable augmentation de la puissance de l'outil informatique. En effet, il y a quelques décennies, le traitement des problèmes multidimensionnels par l'approche numérique était quasi impossible.

La modélisation et la simulation numérique tiennent une part importante dans l'étude des décharges électriques. Elles permettent, en tant que compléments indispensables à l'analyse expérimentale, d'approcher le problème posé par une étude paramétrique.

Le but est d'explorer les phénomènes physiques liés aux décharges électriques dans différentes conditions de fonctionnement. Ces expériences numériques sur des calculateurs nous permettent de déduire les conditions optimales de fonctionnement des réacteurs à plasma.

Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse de prés aux décharges filamentaires haute pression. Notre tâche est de réaliser un code numérique capable de reproduire le comportement physique et électrique du streamer dans une configuration 1.5D.

La réalisation de ce mémoire fait appel à plusieurs compétences maitrisant en même temps les aspects physique et numérique de la décharge électrique haute pression. Le manuscrit de ce mémoire se divise en quatre chapitres :

Dans le chapitre I, nous avons procédé à un état de l'art : définition du plasma thermique et hors équilibre, rappel des grandeurs caractéristiques des plasmas hors-équilibre, énumération des applications industrielles des décharges haute pression (stérilisation médicale, traitement des polluants gazeux, traitement de surface, génération d'ozone), explication des différences physiques qui existent entre le claquage de type Townsend et le claquage de type streamer.

Dans le chapitre II, on a mis en évidence deux approches pour l'étude théorique des plasmas: une approche microscopique ou particulaire et une approche macroscopique ou hydrodynamique.

Au niveau microscopique, les phénomènes sont analysés à l'échelle du libre parcours moyen ou du temps de vol libre des différentes particules. Il est alors nécessaire de résoudre directement l'équation de Boltzmann, relative à chaque espèce présente dans la décharge.

Le formalisme macroscopique est basé sur la résolution de l'équation de continuité, l'équation de transfert de la quantité de mouvement, l'équation de l'énergie,... pour les espèces ionisées ou excitées présentes dans le plasma. Ces équations de conservation classiques de la densité sont en fait les premiers moments de l'équation de Boltzmann.

Cette seconde approche nécessite la connaissance des coefficients de transport et de réaction (c'est à dire de production et/ou de disparition des espèces présentes dans le plasma). Dans notre cas, on a utilisé les deux premiers moments ; pour le deuxième moment, l'équation de conservation de la quantité de mouvement est simplifiée et le modèle est dit modèle de dérive-diffusion.

Pour résoudre l'équation de continuité en une dimension, on a fait appel à plusieurs schémas numériques (Upwind, Lax-Wendroff, Quickest et le schéma de Scharfetter et Gummel d'ordre zéro). Ce dernier schéma développé par Kulikovsky utilise la notion de nœuds virtuels et l'interpolation exponentielle sur les densités de charge. Pour le choix du schéma numérique SG0, on a effectué des tests numériques.

Ces tests sont réalisés en comparant les performances numériques du schéma SG0 avec les schémas classiques tels que les schémas Upwind et Lax-Wendroff et le schéma Quickest.

Dans le chapitre III, on a résolu l'équation de Poisson par la méthode des disques. En effet, le choix d'un modèle unidimensionnel pour simuler une décharge pose tout particulièrement le problème de la représentativité du champ électrique de charge d'espace. On a donc utilisé la méthode développée par Davies : méthode des disques. La décharge est confinée dans un cylindre de rayon r fini et constitué par un ensemble de disques. La répartition des charges à l'intérieur de chaque disque est considérée comme uniforme. Le champ électrique total ne dépend pas uniquement de la contribution de chaque disque chargé de l'espace inter-électrodes mais également de la double infinité de disques images de part et d'autre des électrodes métalliques. On a considéré l'influence sur deux ou trois longueurs d (d distance inter-électrodes) de part et d'autre de chacune des électrodes.

Dans le chapitre IV, on a couplé de manière auto-cohérente entre l'équation de continuité en 1D et l'équation de Poisson en 2D pour obtenir le modèle 1.5D pour la simulation de la décharge streamer positive dans l'azote moléculaire dans une configuration pointe-plan et comparé nos résultats avec ceux de Delphine Bessieres qui a fait sa thèse de doctorat à l'Université De Pau et des Pays de l'Adour. Les paramètres de transport qu'on a utilisé sont ceux de Dhali et Williams. On a aussi effectué une étude paramétrique en changeant une seule condition initiale à la fois (pression, voltage,...) pour voir l'effet de ce changement sur la propagation du streamer positif.

# **CHAPITRE I : ETAT DE L'ART**

# Sommaire chapitre I :

1.1	Introduction	9
1.2	Définition d'un plasma	10
1.2.1	Plasmas thermiques	10
1.2.2	Plasmas hors équilibre	11
1.3	Grandeurs caractéristiques des plasmas hors équilibre	12
1.3.1	Collisions	12
1.3.1.1	Collisions élastiques	13
1.3.1.2	Collisions inélastiques	13
1.3.2	Section efficace de libre parcours moyen	13
1.3.3	Coefficients caractéristiques	14
1.3.3.1	Mobilité	14
1.3.3.2	Coefficients de diffusion	14
1.4	Principaux processus collisionnels	15
1.4.1	Ionisation thermique	15
1.4.2	Ionisation par collisions	16
1.4.3	Ionisation par photon ou photo-ionisation	16
1.5	Applications industrielles des plasmas froids	17
1.5.1	Stérilisation médicale	17
1.5.2	Traitement des polluants gazeux	19
1.5.2.1	Ajout de fragrances dans l'air	19
1.5.2.2	Traitement chimique de l'air	19
1.5.3	Applications en traitement de surface	20
1.5.3.1	Nettoyage de surface par voie chimique	20
1.5.3.2	Revêtement de surface	21
1.5.3.3	Traitement de surface par plasma	21
1.5.4	Génération d'ozone	22
1.6	Phénomènes disruptifs	23
1.6.1	Décharges dans les gaz	24
1.6.2	Claquage de type Townsend et décharge de Townsend	25
1.6.3	Claquage de type streamer et décharge filamentaire	28
1.6.3.1	Streamer positif	29
1.6.3.2	Streamer négatif	31
	Bibliographie chapitre I	32

# **1.1 Introduction**

Dans le domaine des plasmas, la pression atmosphérique est considérée comme une pression élevée pour laquelle le comportement d'une décharge électrique est très différent de celui observé pour des pressions de l'ordre du torr [Ma-1].

En fait, plus que la pression, c'est le produit de la pression par la distance inter électrodes qui définit le mode de fonctionnement du plasma.

Pour des valeurs supérieures à 200 Torr.cm, le libre parcours moyen des électrons devient très faible comparé à la distance inter électrodes, ce qui :

- Rend négligeable la contribution des surfaces au développement de la décharge ;
- Permet une forte ionisation dans des petits volumes ;
- Favorise une thermalisation très rapide des électrons.

Ainsi, la décharge apparaît sous forme de canaux de décharge de faible diamètre, appelés micro décharges, qui conduisent très rapidement au développement d'un arc électrique.

Pour obtenir des décharges hors équilibre thermique dans lesquelles la température des électrons est de quelques dizaines de milliers de degrés Kelvin et celle du gaz proche de la température ambiante, il faut donc limiter la puissance dissipée dans le gaz.

De façon générale, le plasma ne peut rester hors équilibre que si la décharge est transitoire, c'est-à-dire interrompue avant que les électrons ne soient thermalisés. L'objectif de ce premier chapitre est la présentation d'une synthèse bibliographique sur les plasmas et les décharges électriques dans les gaz en général. Ce chapitre est partagé en deux parties :

- Dans la première partie, nous présenterons quelques généralités sur les plasmas, nous rappellerons les différents paramètres mis en jeu dans les plasmas permettant leur classification, les différentes grandeurs les caractérisant et leurs différentes applications;
- Dans la deuxième partie, nous présentons la décharge de Townsend et la décharge de type streamer à laquelle on s intéresse.

Ce chapitre n'a pas l'intention d'être exhaustif, il se veut une aide pour aborder le domaine de la génération des plasmas hors équilibre. La question de la cinétique chimique n'est pas abordée. Une attention particulière est portée à ces décharges homogènes et à leur physique.

#### 1.2 Définition d'un plasma

Le terme plasma introduit en physique en 1928 par le physicien Langmuir, désigne un gaz ionisé électriquement neutre. Un plasma est donc un milieu constitué d'un ensemble de particules neutres (atomes, molécules, radicaux), d'ions, d'électrons, de photons émis et absorbés. En réalité, plus de 99% de l'univers est sous forme de plasma. Chaque particule chargée dans un plasma interagit avec les autres grâce au long rayon d'action de la force électrique entre particules chargées (force coulombienne). Ces interactions créent un comportement collectif qui n'existe pas dans les gaz neutres et procurent au plasma des propriétés uniques [De-1], [Fa], [He], [Ra-1], [Fl-1].



*Figure 1.1: Schéma de la différence entre gaz neutre et plasma* 

Ce quatrième état de la matière, se trouve dans les nébuleuses, dans le nuage d'hydrogène composant le milieu interstellaire, dans les étoiles (cœur de l'étoile siège de réactions de fusion nucléaires), et dans l'environnement terrestre (ionosphère, magnétosphère, foudre). Les plasmas sont aussi créés de façon artificielle, en laboratoire (décharges électriques qu'on traitera par la suite, tokamaks).

Les décharges électriques dans les tubes fluorescents et les plasmas de fusion dans les tokamaks en constituent deux exemples. Il existe de nombreux types de plasmas que l'on différencie selon certains critères.

Parmi ces critères, on peut utiliser l'état thermodynamique: on distingue les plasmas à l'équilibre thermodynamique local (plasmas thermiques ou plasmas chauds) des plasmas hors équilibre (plasmas non thermiques ou plasmas froids).

#### **1.2.1** Plasmas thermiques

Les plasmas thermiques sont caractérisés par une densité d'énergie élevée et une température égale pour toutes les espèces (ions, électrons, neutres). Les plasmas naturels

comme les étoiles, les aurores boréales, les flammes, les éclairs, sont en équilibre thermodynamique local ce qui n'est pas le cas pour la plupart des plasmas créés en laboratoire. On doit travailler à des pressions au dessus de 10 Torrs comme l'indique la figure (1.2).

Les plasmas thermiques sont générés par des torches à plasmas ou des arcs. Si le gaz est à haute pression (voisine ou supérieure à la pression atmosphérique), il est assez fortement ionisé, bien qu'il subsiste des atomes et des molécules neutres, les collisions entre toutes les particules qui le composent sont nombreuses, ce qui tend à homogénéiser la température à un niveau de l'ordre de 5  $10^3$  à 5  $10^4$  degrés Kelvin.

Les plasmas thermiques dont la puissance varie de quelques kilowatts à quelques mégawatts, nécessitent la mise en jeu de courants importants [Ai], [Sa].

#### 1.2.2 Plasmas hors équilibre

Les plasmas hors équilibre sont généralement produits par décharge luminescente, décharge filamentaire ou courant inductif (capacitif). Leur température électronique (10<sup>3</sup> à 10<sup>4</sup> degrés Kelvin) est très supérieure à la température ambiante du gaz (inférieure ou égale à 500 degrés Kelvin) [Ai], [Fa], [Sa].

Aucun équilibre thermique n'est réalisable et le milieu est faiblement ionisé. Le degré d'ionisation est défini par:

$$\alpha_{\text{ionisation}} = \frac{n}{N+n} \tag{1.1}$$

Où  $n_e = n_i = n = densité$  (nombre de particules par unité de volume) des électrons égale à celle des ions, et N est la densité des neutres (l'indice "e" est utilisé pour les électrons et "i" pour les ions).

Le degré d'ionisation est inférieur  $a 10^{-4}$ . La distance parcourue entre deux collisions est suffisamment importante pour que l'ionisation puisse se faire par collision directe.

Dans ce type de plasma, la majeure partie de l'énergie n'est pas convertie en chauffage du gaz mais en réactivité chimique pour produire des espèces métastables, dissociées et ionisées.

Les puissances typiquement mises en jeu pour obtenir un plasma hors équilibre vont de quelques watts à quelques kilowatts.



Figure 1.2: Température électronique du gaz en fonction de la pression (Te = électronique, Tg = gaz)

Avant de discuter des différents types de décharges électriques (plasmas artificiels créés par l'homme), on va passer en revue les grandeurs caractéristiques des plasmas hors-équilibre (collisions, section efficace et libre parcours moyen, coefficients caractéristiques).

#### 1.3 Grandeurs caractéristiques des plasmas hors équilibre

#### **1.3.1 Collisions**

A l'équilibre, et en l'absence de forces extérieures, un gaz est constitué d'un ensemble de particules de différents types, atomes, molécules, ions, électrons uniformément répartis, dont les vitesses n'ont aucune direction privilégiée (distribution isotrope) [Le].

En l'absence de champ électrique, les particules de gaz sont soumises à l'agitation thermique, et subissent une multitude de chocs. Ces chocs ont pour cause des agents extérieurs tels que la radioactivité terrestre et atmosphérique ainsi que les différents rayonnements cosmiques [Le], [Bo], [Fl-1].

Lorsque les particules initialement séparées par une distance d s'approchent les unes des autres, elles commencent à interagir et si après cette interaction, quelque changement mesurable se produit, on dit qu'une collision a eu lieu. L'interaction entre les particules neutres est du à la déformation de leur nuage électronique, ce qui entraîne d'abord une force attractive, puis fortement répulsive du fait des noyaux positifs. Du fait de cette interaction, les particules sont déviées de leurs trajectoires initiales [Fa].

Pour les particules neutres, avec des forces d'interaction en  $d^{-n}$  avec  $7 \le n \le 13$ , la déviation se produit pendant un temps très court et la collision est pratiquement celle de deux boules de billard.

Par contre, pour les particules chargées, l'interaction est en d<sup>-2</sup>, les particules se voient de très loin, la déviation de trajectoire dure un temps non négligeable par rapport à celui existant

entre deux collisions. Lors de la collision, les particules échangent de l'énergie cinétique et/ou potentielle. On classe les collisions en deux types:

# **1.3.1.1** Collisions élastiques

Lors de ces collisions, l'énergie cinétique de translation et la quantité de mouvement sont conservées. C'est le cas de presque tous les atomes dans un gaz pris dans des conditions de pression et température normales.

Il faut aussi remarquer que les particules lourdes échangent très facilement leur énergie par collision élastique alors que, lors de la collision d'un électron et d'une particule lourde, la fraction d'énergie est très faible. Un électron devra subir des milliers de collisions élastiques pour perdre son énergie.

Ces collisions ne modifient pas l'énergie interne des particules en question, mais sont responsables des phénomènes thermiques (conduction et diffusion de chaleur au sein du gaz) [Fl-1], [Ra-1].

# **1.3.1.2** Collisions inélastiques

Ce sont des collisions où une partie de l'énergie cinétique est transformée en énergie interne. Les collisions inélastiques sont responsables de la fragmentation des molécules impactées ou de la modification de la distribution de l'énergie (modification de l'état vibrationnel, translationnel ou électronique).

Si son énergie cinétique est suffisante, un électron peut, lors d'une collision inélastique, ioniser ou exciter la molécule neutre rencontrée.

En présence d'un champ électrique, les molécules de gaz se mettent en mouvement dans la direction du champ. Leur vitesse varie en fonction de la distribution et l'intensité du champ, ainsi que d'autres paramètres tels que la pression, la température et l'humidité du gaz [Fl-1].

# 1.3.2 Section efficace et libre parcours moyen

Si l'on admet que l'électron se déplace à une vitesse moyenne v pendant le temps  $\delta t$ , alors il parcourt alors la distance v  $\delta t$  et balaie un domaine d'espace de volume  $\sigma v \delta t$  où  $\sigma$  possède les dimensions d'une surface et représente la section efficace microscopique de collision entre l'électron et une molécule [Ar], [Se], [Me-1], [Fl-1]. Le nombre de collisions est donc égal à N $\sigma v \delta t$ .

Avec N = densité d'atomes ou molécules neutres par unité de volume. Le nombre de collisions  $n_c$  par unité de temps est donné par:

$$n_{c} = N\sigma v \tag{1.2}$$

La théorie concernant la section efficace microscopique de collision ne s'applique qu'aux particules neutres pour lesquelles les champs d'interaction n'interviennent qu'à de très faibles distances.

La notion de section efficace est plus difficile à appréhender pour des collisions entre particules chargées dont les interactions, de type coulombien ont des rayons d'interaction plus grands.

Il faut aussi noter que  $N\sigma$  appelée section efficace macroscopique de collision est homogène à l'inverse d'une longueur. Cette longueur est dite libre parcours moyen ou distance moyenne parcourue par l'atome ou molécule entre deux chocs successifs [Dh]:

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma}$$
(1.3)

Cette notion est intéressante car si l'électron accéléré par le champ électrique acquiert une énergie cinétique suffisante, il pourra alors ioniser ou exciter l'atome ou la molécule neutre rencontré.

### 1.3.3 Coefficients caractéristiques

#### 1.3.3.1 Mobilité

En l'absence de forces extérieures, aucune direction n'est privilégiée et les particules ionisées ou neutres d'un gaz sont animées d'une vitesse moyenne qui est donnée par l'agitation thermique.

Si nous appliquons un champ électrique constant à cet ensemble de particules, celles-ci vont alors se déplacer collectivement dans la direction de la force induite par le champ électrique.

Ce déplacement collectif provient de ce que, bien que l'ion soit émis dans une direction quelconque après chaque collision, cet ion tend à être ramené par le champ électrique toujours dans la même direction.

La vitesse moyenne avec laquelle le centre de masse de cet ensemble de particules se déplace dans la direction du champ électrique E est appelée vitesse de dérive (notée w). La mobilité  $\mu$  des particules se déduit de la vitesse de dérive au moyen de la relation:

 $w = \mu E$ 

(1.4)

Pour les champs électriques élevés (cas de la décharge que nous allons étudier), la faible masse des électrons les empêche de transmettre par collision l'énergie acquise sous l'effet du champ électrique. Il en résulte une mobilité beaucoup plus grande pour les électrons que pour les ions [Fl-1].

## 1.3.3.2 Coefficients de diffusion

A l'intérieur d'un gaz, ionisé ou non, les différences de concentration des particules d'une région de l'espace à l'autre créent un déplacement de ces particules des régions de haute concentration vers les régions de basse concentration. Le flux de diffusion  $J_{diffusion}$  par unité de surface est proportionnel au gradient de densité suivant la relation:

$$\mathbf{J}_{\text{diffusion}} = -\mathbf{D}\nabla\mathbf{n} \tag{1.5}$$

La constante de proportionnalité est le coefficient de diffusion. Nous avons donc :

$$\frac{D}{\mu} = \frac{m}{3e} \langle v \rangle^2 \tag{1.6}$$

Où

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e}$$
(1.7)

La relation (1.7) est dite relation d'Einstein. m est la masse de l'électron, e sa charge, k est la constante de Boltzmann et T la température en degrés Kelvin.

La définition précédente du coefficient de diffusion D suppose que le milieu diffuseur est isotrope. Dans ce cas, D est une grandeur scalaire (ce sera le cas pour la modélisation 1.5 D que nous présenterons en chapitre IV).

Dans le cas d'un gaz contenant des particules chargées, le milieu est rarement isotrope et le coefficient de diffusion est un tenseur. Ce tenseur se simplifie et devient diagonal lorsque, les forces appliquées étant d'origine électrique, les électrodes sont planes et parallèles. Il existe alors un coefficient de diffusion longitudinal  $D_L$ , correspondant à la diffusion dans le sens du champ électrique, et un coefficient de diffusion transversal  $D_T$  correspondant à la diffusion dans les modélisations dans la direction perpendiculaire (ce cas est pris en considération dans les modélisations bidimensionnelles).

Etudiés depuis plus d'un siècle sans pour autant être totalement compris, les plasmas froids ou hors équilibre du fait de leur facilité de mise en œuvre (facilité de manipulation et absence du besoin d'équipements coûteux nécessaires pour obtenir un vide poussé comme ce serait le cas si on travaillait à basse pression) et de leur robustesse, ils ont conduit à de nombreuses applications. Les termes source du chapitre IV ne vont prendre en considération que les processus d'ionisation. On va donc définir ce qu'est l'ionisation et les principaux processus mis en jeu

#### **1.4 Principaux processus collisionnels**

L'ionisation est un processus primordial de création d'électrons et d'ions positifs [Du], [Fl-1]. Dans le gaz azote qu'on va considérer en chapitre IV, on a le processus d'ionisation.

Les processus d'ionisation dans les plasmas hors équilibre peuvent se diviser en trois groupes: l'ionisation thermique, l'ionisation par collision et la photo-ionisation.

#### **1.4.1 Ionisation thermique**

Un gaz très chaud peut donc s'auto-ioniser. Si B est un état excité métastable, ce processus est facilité suivant la réaction (R-1):

$$A + B \rightarrow A^+ + B + e^- \tag{R-1}$$

#### **1.4.2 Ionisation par collisions**

On a d'abord l'ionisation directe par impact électronique sur un atome ou une molécule à l'état fondamental ou excité (réactions (R-2) et (R-3)). Un électron peut ioniser une particule neutre à condition qu'il ait une énergie supérieure à l'énergie d'ionisation (seuil d'ionisation) de la particule neutre. Le seuil sera naturellement plus faible pour une ionisation par étape [Du].

$e^- + A \rightarrow A^+ + e^- + e^-$	Ionisation directe sur un atome	(R-2)
$e^- + AB \rightarrow AB^+ + e^- + e^-$	Ionisation directe ou par étape si AB est dans un état excité	(R-3)
$e^- + AB \rightarrow A^+ + B + e^- + e^-$	Ionisation dissociative	(R-4)

Nous avons aussi l'ionisation associative qui fait intervenir deux atomes ou molécules dont l'une est dans un état excité.

$$A_2^* + A_2 \rightarrow A_4^+ + e^-$$
 Ionisation associative (R-5)

L'ionisation peut être également produite par les ions positifs, mais ce processus exige que la particule incidente ait un haut niveau énergétique de l'ordre de 100 à 200 eV.

#### **1.4.3** Ionisation par photon ou photo-ionisation

La photo-ionisation correspond à l'absorption d'un photon UV. Un photon de fréquence  $\upsilon$  suffisamment énergétique peut exciter ou même ioniser une particule neutre suivant le principe:

$$A + h\upsilon \rightarrow A^+ + e^- \tag{R-6}$$

#### 1.5 Applications industrielles des plasmas froids

La technologie plasma connaît à l'heure actuelle un grand progrès. Cette technologie est basée sur la dissociation des gaz, à température ambiante, par des électrons énergétiques pour produire des espèces (radicaux) chimiques actives qui sont très réactives à la fois dans le gaz et avec les surfaces exposées au gaz.

Les plasmas froids sont impliqués dans des applications industrielles qui n'ont cessé de se multiplier et de se diversifier, touchant notamment la micro optoélectronique, la métallurgie, la sidérurgie, l'automobile, l'aéronautique, l'emballage, l'industrie textile.

Les procédés plasmas sont également promis à jouer un rôle dans le domaine médical, que ce soit pour le dépôt de couches biocompatibles (pour les prothèses notamment) ou pour la stérilisation du matériel médical (tels que les endoscopes). Ils apparaissent également comme des candidats prometteurs pour la dépollution d'effluents gazeux (traitement des fumées d'usine, gaz d'échappement des automobiles) et le traitement de surface.

#### 1.5.1 Stérilisation médicale

La stérilisation est l'opération qui consiste à éliminer ou tuer tous les micro-organismes portés par des milieux inertes contaminés. Elle est définie selon les normes européennes comme une probabilité théorique qu'un microorganisme viable soir présent sur l'objet stérilisé si la contamination initiale est de  $10^6$  microorganismes [La].

Le mode de stérilisation de référence actuel est la stérilisation par la chaleur (sèche ou humide). Le traitement par la chaleur humide (autoclave) est le plus couramment utilisé et est celui préconisé dans les normes pour les objets non thermosensibles. Il s'agit de traiter les objets à des températures comprises entre 121 et 138 degrés Celsius, en présence de vapeur d'eau pour une répartition homogène de la chaleur, à une pression supérieure à 2 bars pendant environ 1 heure. Cette technique très sûre pose cependant un problème majeur : elle ne permet pas de stériliser les objets thermosensibles.

Dans ce cas, une autre voie possible est la stérilisation chimique. On utilise principalement l'oxyde d'éthylène ( $C_2H_40$ , EtO) comme agent stérilisant. Les inconvénients majeurs sont la très grande toxicité de ce gaz (risque pour le personnel) et de ce fait, la nécessité de rincer sur des temps longs, après traitement. La procédure de stérilisation dure environ 2 heures et est suivie d'une phase d'aération de 8 à 10 heures. D'autres gaz sont également utilisés :

- ✤ Le formaldéhyde CH<sub>2</sub>0 (toxique et corrosif) ;
- Le dioxyde de chlore  $ClO_2$  (toxique et corrosif) ;
- ✤ L'ozone 0<sub>3</sub> (utilisé principalement pour la décontamination de l'eau) ;
- ✤ L'acide peracétique CH<sub>3</sub>C00H (difficile à éliminer, toxique et corrosif) ;
- Le peroxyde d'hydrogène  $H_2O_2$  (relativement peu toxique et corrosif, mais peu efficace).

Les études sur la stérilisation par plasma ont débuté au cours des années 90. La recherche porte sur l'application des plasmas pour la stérilisation d'objets médicaux mais également pour la décontamination des produits alimentaires [De-2], [Do], [Mo], [Od], [Ri], [Tr]. Bien que tous ces systèmes aient le même but, ils présentent des modes de fonctionnement très variés. On peut les classer par exemple selon ce qui suit :

- La pression à laquelle le traitement s'effectue : basse pression ou pression atmosphérique ;
- Le positionnement des surfaces traitées par rapport à la décharge produite ;
- ✤ Le gaz utilisé ou encore le type de décharge.

Le choix de la pression entraîne une cinétique spécifique des espèces actives responsables de l'effet biocide ; leur durée de vie est à priori plus longue à basse pression qu'à pression atmosphérique. Un tel choix conditionne également le dispositif expérimental, avec la nécessité éventuelle d'un système de pompage. Ceci est en général un handicap pour l'intégration du procédé dans l'industrie (traitements de surface en ligne par exemple). Dans ce cas, seul le travail à pression atmosphérique est envisageable.

Le positionnement des surfaces à traiter par rapport au plasma signifie que le milieu actif est constitué soit par la décharge, soit par la post-décharge.

Si on utilise le plasma lui-même, c'est la zone dite de décharge. Si on utilise le flux gazeux émanant du plasma, c'est la zone de post décharge qui ne contient pas de particules chargées ; elle est essentiellement composée d'atomes, de molécules et de radicaux dont certains sont dans un état excité. Les espèces actives ont des durées de vie comprises entre  $10^{-3}$  et  $10^{-1}$  secondes.

Lorsque les objets à décontaminer sont placés au sein même de la décharge, on obtient généralement de très bons résultats en peu de temps. L'inconvénient est qu'il est possible d'avoir une forte dégradation du matériau que l'on veut traiter compte tenu de la présence des ions et des électrons très énergétiques.

Il faut également surveiller l'éventuel échauffement des échantillons lorsqu'ils sont déposés à proximité de la cathode.

L'avantage du traitement en post-décharge est d'éviter ces effets (au niveau de cette zone, la température est inférieure à 50 degrés Celsius) et notamment d'être applicable à des matériaux thermosensibles.

La zone de post décharge utilise des gaz non toxiques comme l'azote et l'oxygène. Son principe d'action et en particulier dans la phase gravure, laisse supposer une efficacité sur les agents transmissibles non conventionnels (prions). Cette dernière remarque justifie à elle seule l'intérêt porté à la stérilisation portée par plasma froid.

#### 1.5.2 Traitement des polluants gazeux

Il existe de nombreuses techniques de désodorisation qui ne seront pas décrites ici. Celles-ci permettent de détruire les composés organiques volatiles (COV), odorants ou non, et/ou les microorganismes mais elles ne sont pas applicables dans l'automobile pour des raisons de taille ou de coût énergétique. On peut citer par exemple l'oxydation thermique ou la biofiltration. Pour traiter l'air, on a plusieurs méthodes [La] :

### 1.5.2.1 Ajout de fragrances dans l'air

La manière la plus simple d'éliminer une odeur désagréable est de la masquer par une autre. Ces fragrances libérées le plus souvent sous forme de spray sont très répandues dans l'habitat ; récemment, des constructeurs automobiles ou des équipementiers ont proposé la mise en place de systèmes similaires dans la voiture. La C3 de Citroën est équipée d'une cartouche placée dans les aérateurs et dont le parfum est véhiculé par la ventilation.

Bien que cette solution apporte un certain confort et laisse le choix au passager de choisir son parfum, on ne peut pas résoudre le problème de la cause de ces odeurs.

#### 1.5.2.2 Traitement chimique de l'air

Traiter l'air entrant dans l'habitacle serait une solution pour en faire un lieu sans odeur et en même temps sain, exempt de toute pollution. Les COV à éliminer peuvent soit provenir de l'extérieur soit être produits par les microorganismes. Le problème qui se pose rejoint celui de la dépollution atmosphérique, sujet d'étude actuel et fécond, proposant des procédés difficiles à appliquer à l'automobile en raison de leur encombrement ou de leur coût énergétique. On peut citer :

#### A- La photocatalyse

Elle fait partie des procédés de destruction chimique. Son fonctionnement nécessite une source de lumière UV (lampe spécifique ou rayons du soleil) et un support contenant un composé photocatalytique. Le matériau le plus couramment utilisé est le dioxyde de titane (TiO<sub>2</sub>). Ce matériau possède une transition entre la bande de valence et la bande de conduction de 3.2 électronvolts : cette énergie, nécessaire au changement de bande d'un électron, est fournie par les rayonnements UV.

L'électron ainsi déplacé sur la bande de conduction va pouvoir être utilisé pour catalyser des réactions à la surface du matériau photocatalytique. Les réactions engendrées sont de type oxydo-réduction et permettent soit d'attaquer directement les COV ou les microorganismes adsorbés à la surface, soit de créer des molécules actives à partir des molécules du gaz vecteur utilisé.

La photocatalyse ne permet généralement pas une minéralisation complète des composés que l'on souhaite détruire (transformation en  $CO_2$  et  $H_2O$ ). Il faut alors envisager de la coupler un autre système complémentaire ou de procéder à plusieurs passages du gaz à traiter dans une

zone photocatalytique. A l'heure actuelle, la photocatalyse permet de traiter des gaz à faible débit et à faible concentration en polluants (temps de résidence très longs) au risque sinon de voir apparaître des produits de dégradation secondaires que l'on ne maîtrise pas.

## **B-** Le traitement plasma

Les milieux scientifiques d'abord industriels, s'intéressent depuis une dizaine d'années à la possibilité d'utiliser les plasmas froids pour la dépollution des effluents gazeux. L'idée de base est d'exploiter la réactivité chimique des radicaux et espèces engendrés au sein du plasma pour transformer les molécules polluantes en molécules inoffensives, la réaction se déroulant dans l'air à la pression ordinaire et sans pertes thermiques.

Les résidus obtenus peuvent en outre être parfois valorisables. Les polluants visés dans les développements actuels sont essentiellement les oxydes de soufre et d'azote (les COV ou composés organiques volatils) et les molécules malodorantes. La production de radicaux réactifs pour dépolluer des effluents gazeux est également possible avec la technologie des faisceaux d'électrons, qui connaît déjà de nombreuses applications industrielles dans le monde.

Il semble assez difficile aujourd'hui d'établir une comparaison entre les deux procédés. Le plasma froid est certainement sensiblement plus onéreux à mettre en œuvre, mais son développement beaucoup plus récent laisse encore de la place à des optimisations technicoéconomiques. En revanche, il bénéficie d'une grande souplesse d'utilisation et peut s'adapter à des débits de gaz très variable, puisqu'on envisage de l'utiliser aussi bien sur des cheminées de centrales que sur des pots d'échappement d'automobiles [Du], [Co-1], [Co-2], [Ma-2].

# **1.5.3 Application en traitement de surface**

Il existe de nombreux procédés de traitement de surface. On peut citer :

# **1.5.3.1** Nettoyage de surface par voie chimique

Compte-tenu de l'ancienneté du problème des odeurs de climatisation, il existe à l'heure actuelle sur le marché un grand nombre de produits de nettoyage de la climatisation. Ces produits sont en vente libre et à utiliser par le conducteur lui-même ou sont présents au sein des garages et utilisés par des professionnels. Il existe deux grandes classes de produits utilisables par l'usager :

- Des bombes à placer au niveau du pédalier qui diffusent au travers des gaines d'aération (le passager devant sortir et fermer ses portières);
- Des bombes moussantes à insérer au niveau du carter d'évacuation des condensats. La mousse s'expand une fois pulvérisée dans la climatisation.

Ces produits d'après-vente présentent de bonnes efficacités de décontamination au départ puisqu'ils doivent répondre à des normes de décroissance microbienne. Par contre, ils ont des durées d'activité très variables et souvent peu connues (de 6 mois à 2 ans selon les fabricants) ; l'opération est donc à renouveler régulièrement. Quant aux produits utilisés par les professionnels, ce sont des sprays ou des mousses à pulvériser au niveau de l'évaporateur en passant soit par la trappe d'entrée du filtre, soit par la durite d'évacuation des condensats. Ils nécessitent une immobilisation du véhicule.

#### 1.5.3.2 Revêtements de surface

Afin de ne pas avoir à nettoyer une surface, une des solutions est de la rendre autonettoyante. A cet effet, l'accent est mis chez de nombreux équipementiers et constructeurs sur l'élaboration d'évaporateurs dont la surface traitée permet de diminuer sa contamination initiale.

Il s'agit dans la plupart des cas d'ajouter une couche de revêtement supplémentaire contenant des agents antimicrobiens. Pour l'instant, les revêtements sont essentiellement à base de polymère contenant soit des molécules d'antibiotiques soit des ions argent. La législation est cependant très dure concernant la présence d'antibiotique afin de limiter les risques d'apparition de résistance de certains microorganismes.

L'arrivée récente de ces produits sur le marché ne permet pas d'avoir un recul suffisamment important sur la durée de l'efficacité d'un tel revêtement. Il semble malgré tout qu'elle soit assez courte (de l'ordre de deux ans maximum) du fait des flux importants d'eau qui balayent la surface lorsque la climatisation est en route mais aussi de par la diminution de l'efficacité de l'antimicrobien au cours du temps.

En effet, la couche de revêtement semble s'éroder au fil des lavages exercés par l'eau condensée sur l'évaporateur.

#### 1.5.3.3 Traitement de surface par plasma

La préparation des surfaces est une phase essentielle dans l'assemblage par collage. Elle a pour premier objectif d'éliminer les contaminants et les couches superficielles de faible cohésion (agents de démoulage des matières plastiques, composés de faible masse moléculaire ayant migré à la surface des polymères, oxydes fragiles, résidus de corrosion).

Des traitements plus poussés peuvent permettre de modifier la chimie de surface afin d'augmenter la tension superficielle ou de favoriser la création de liaisons chimiques avec l'adhésif. Diverses méthodes de traitement sont utilisées. Les traitements de surface du fait qu'ils sont respectueux de l'environnement, constituent une application importante des plasmas froids [Ma-3, 4, 5, 6, 7], [Po], [Si].

Au cours des vingt dernières années, les difficultés rencontrées pour contrôler le plasma et donc le traitement de surface à la pression atmosphérique ont amené les chercheurs à développer des procédés fonctionnant à basse pression.

En effet, lorsque la pression diminue, le libre parcours moyen des électrons augmente et des plasmas homogènes sont facilement réalisés. Ainsi, aujourd'hui, l'industrie de la micro-électronique utilise des procédés plasmas basse pression à toutes les étapes de fabrication des circuits intégrés.

Néanmoins, même s'il existe des solutions plasmas pour la plupart des besoins concernant les modifications de surface ou la réalisation des couches minces, leur transfert vers l'industrie en dehors de la micro-électronique est très limité.

Cette situation s'explique par un coût d'installation mais surtout de fonctionnement élevé et d'autant plus inacceptable que la production est réalisée en continu à des cadences rapides.

En effet, un traitement à basse pression ne peut s'effectuer que lot par lot. L'inconvénient provient donc du traitement discontinu des pièces qui doivent être mises sous vide ainsi que de la taille des réacteurs qui limite la dimension des objets traités.

Même si des volumes de plusieurs mètres cubes sont envisageables avec des temps de chargement et de pompage de l'ordre de dizaines de minutes, le coût global de fonctionnement est souvent trop important pour que le processus soit rentable.

Néanmoins, l'étude des procédés plasmas se poursuit car ils sont une alternative possible aux traitements chimiques dont les effluents sont de plus en plus difficiles à recycler.

Parmi les évolutions notables, figurent les procédés de traitement de surface par plasmas à pression atmosphérique.

### 1.5.4 Génération d'ozone

A cause de sa relativement courte durée de vie, l'ozone est toujours généré sur site grâce à un générateur d'ozone.

A l'échelle industrielle, l'ozone est produit en utilisant des radiations ultraviolettes de courtes longueurs d'ondes émises par une lampe à vapeur de mercure, ou par le procédé de décharge à froid ou décharge couronne qui utilise un champ électrique élevé. La génération d'ozone par décharge corona est plus courante de nos jours et a plus d'avantages.

Les avantages de la méthode de décharge corona sont une plus grande durabilité de l'unité, une meilleure production d'ozone et un meilleur rapport coût/efficacité.

L'ozone bénéfique peut être produit artificiellement à travers l'emploi de trois types de générateurs [Br], [Fl-1], [Ma-8], [1]:

- Générateur à rayons ultraviolets qui réplique le soleil: le générateur à rayons ultraviolets produit l'ozone à travers l'exposition d'un flux d'air à la lumière engendrée par les lampes à ultraviolet;
- Générateur avec décharge couronne à oxygène (CDOX) qui réplique les phénomènes électriques orageux: Ce générateur produit l'ozone à travers le passage d'oxygène déshumidifié et propre par l'intermédiaire d'un champ électrique très intense. Le point de rosée doit se situer à - 60 degrés Celsius pour éviter tout problème de corrosion à l'intérieur de l'ozoneur.

Lorsqu'une augmentation des quantités de vapeur d'eau est présente, de plus grandes quantités d'oxyde d'azote sont formées lorsque les déchargent se produisent. L'oxyde d'azote peut former l'acide nitrique (provoque la corrosion).

De plus, les radicaux hydroxydes sont formés et se combinent avec les radicaux d'oxygène et avec l'ozone. L'oxygène pur est fourni par un générateur d'oxygène ou

parfois par des bouteilles d'oxygène. Les ozoneurs produisent de très grandes quantités d'ozone, mais ils nécessitent toujours et seulement de l'oxygène à l'état sec. L'ozone est produit à partir de l'oxygène en tant que résultat direct de la décharge électrique.

La décharge couronne (corona discharge) rompt la molécule stable d'oxygène et forme deux radicaux d'oxygène. Ces radicaux peuvent se combiner avec les molécules d'oxygène pour former l'ozone. L'emploi de l'oxygène seulement n'engendre pas de sous produits dangereux. Pour éliminer l'ozone restant après utilisation, des destructeurs d'ozone sont utilisés.

Le mécanisme du destructeur d'ozone peut être basé sur différents principes. Généralement, un catalyseur est utilisé, qui accélère la décomposition de l'ozone en oxygène (par exemple l'oxyde de magnésium).

Le générateur CDOX est jusqu'à dix fois plus puissant que le générateur UV mais il produit une quantité considérable de chaleur qui doit être dissipée. Il n'est employé que dans le domaine des traitements industriels de haut niveau et dans les villes pour rendre potable des millions de mètres cube à l'heure.

Les facteurs importants qui influencent la génération d'ozone sont: la concentration d'oxygène du gaz d'entrée, l'humidité et la pureté du gaz d'entrée, la température de l'eau de refroidissement et les paramètres électriques. Pour minimiser l'énergie qui est utilisée à un haut rendement d'ozone, il est important que ces facteurs soient optimaux ;

Générateur avec décharge couronne à coefficient réduit (RCCD) qui réplique les phénomènes électriques orageux aussi: ce générateur produit l'ozone à travers le passage de l'air (ambiant fourni par un compresseur) par l'intermédiaire d'un champ électrique très intense.
Lorsqu'on utilise de l'air, celui-ci doit au préalable subir un refroidissement dans un échangeur de température et une dessiccation poussée sur gel de silice ou d'alumine

échangeur de température et une dessiccation poussée sur gel de silice ou d'alumine activée de façon à obtenir un point de rosée ne dépassant pas - 60 degrés Celsius. Cet appareil est immunisé contre toute sous production de gaz nitrogènes dangereux.

Cette première partie est un bref rappel des notions de base de physique des plasmas et de leurs différentes applications. La deuxième partie du chapitre I traite les mécanismes de claquage du gaz et la théorie du streamer.

## **1.6 Phénomènes disruptifs**

La disruption est caractérisée par la valeur de la tension appliquée aux électrodes à partir de laquelle le gaz isolant devient fortement conducteur [Bo], [Se].

On sait que, par suite de la présence en permanence d'un petit nombre de particules chargées, un gaz possède toujours une certaine conductivité, même si l'intensité de celle-ci est très faible.

Toutefois, tant que la tension appliquée est faible, le courant obtenu est quasi négligeable et l'on ne peut, dans ce cas, parler de disruption. En fait, il n'y a vraiment disruption que si un grand nombre de particules chargées est créé dans le gaz par suite de l'ionisation et que si l'intensité du courant traversant l'espace inter-électrodes n'est alors limitée que par la seule impédance du générateur de courant.

Dans ces conditions, la décharge devient autonome et se maintient même en l'absence d'agents ionisants extérieurs.

On conçoit qu'il existe une grande variété de phénomènes disruptifs, caractérisés par la nature et la pression du gaz, la géométrie des électrodes, les différentes variations spatiales ou temporelles de la tension appliquée, etc....

Nous allons présenter quelques uns des différents types de claquage qui nous intéressent en nous efforçant de mettre en évidence leurs caractéristiques les plus marquantes.

#### 1.6.1 Décharges dans les gaz

Cette section décrit les principales caractéristiques d'une décharge dans un gaz, objet de nombreuses études et publications [Me-1], [Me-2], [Lo]. Elle va traiter plus particulièrement de la décharge filamentaire.



Figure 1.3: Caractéristiques courant-tension de différents types de décharges dans les gaz (a), (b) zoom sur la caractéristique de la décharge non-entretenue

En fonction de la pression, de la distance inter électrodes et du matériau des électrodes, différents types de décharges peuvent être distingués. Celles-ci sont classifiées par rapport à leurs caractéristiques courant-tension, comme présenté dans la figure (1.3 .a)

La courbe supérieure correspond aux décharges observées à haute pression (autour de la pression atmosphérique) et la courbe inférieure aux décharges basse pression (< 1mbar). A haute pression, la décharge est donc de type filamentaire.

On distingue quatre catégories de décharges stables ou quasi-stables (figure (1.3. a)):

- ★ La décharge sombre de Townsend, caractérisée par un courant très faible ( $\approx 10^{-8}$  A);
- ★ La décharge luminescente (Glow), largement utilisée dans les procédés industriels, principalement à basse pression (⟨mbar ) à faible courant (≈10<sup>-2</sup>A) et moyenne tension (≈1 kV). C'est un plasma faiblement ionisé et hors équilibre. Comme pour la décharge de Townsend, les électrons sont émis par impacts ioniques à la cathode ;
- ✤ La décharge corona ou filamentaire que l'on rencontre généralement à la pression atmosphérique. Courant faible (≈10<sup>-6</sup>A), elle se développe localement sous un champ électrique non uniforme ;
- ✤ La décharge d'arc, caractérisée par un fort courant(>100 A), une faible tension (<100 V) et une émission lumineuse très intense. A la différence de la décharge luminescente, les électrons sont émis par un procédé thermoïonique dû au chauffage de la cathode. Le plasma d'arc haut pression peut être considéré comme étant à l'équilibre thermodynamique.

A l'enclenchement de ces décharges on distingue deux, voire trois types de claquage (figure (1.3. a)) : le claquage de type Townsend, le claquage de type streamer et le claquage de type spark (étincelle).

Quel que soit le type de claquage, l'origine - processus primaire - du procédé de claquage est une avalanche électronique. Elle se développe dans le gaz lorsqu'un champ électrique suffisamment intense est appliqué. La distinction entre le claquage de type Townsend et le claquage de type streamer vient des différents processus secondaires, issus de l'avalanche primaire, qui vont gouverner la décharge. On définit le claquage comme le seuil de tension au delà duquel la décharge est autoentretenue par les processus secondaires. Dans notre mémoire, on n'abordera pas le claquage de type étincelle (spark).

## 1.6.2 Claquage de type Townsend et décharge de Townsend

Le processus de claquage à basse pression ou pour des faibles valeurs du produit pressiondistance inter-électrodes (quelques torrs. cm) est de type Townsend [Me-1], [Me-2], [Ra-2]. La courbe de la figure (1.1.b) présente une vue détaillée, avant le claquage, de la caractéristique courant-tension.



Figure 1.4 : Configuration initiale du circuit électrique utilisé pour la réalisation et l'étude des décharges électriques par Townsend. Le circuit est composé d'une source de tension (V), d'une résistance variable, R, qui permet de contrôler et de limiter le courant et de la chambre de décharge avec ses deux électrodes (Cathode- Anode)

Si l'on considère deux électrodes planes séparées par une distance d et que l'on applique une tension V à leurs bornes, il va se former un champ électrique considéré comme homogène de la forme E = V/d. Des électrons germes provenant de sources externes (rayons cosmiques, radioactivité naturelle ou source ionique artificielle) vont être accélérés et rejoignent l'anode si le champ est suffisamment intense et s'ils ne se sont pas attachés à une molécule électronégative.

En conséquence, le courant i généré dans le circuit, en fonction du nombre d'espèces chargées ayant rejoint les électrodes, va croître, dans un premier temps, avec la tension appliquée V (étape 1 sur la figure (1.1.b)). A partir d'une certaine tension, presque toutes les espèces chargées (ions et électrons) rejoignent les électrodes. Le courant sature ( $i_0$ , figure 1.1 (b)) et cesse de dépendre de la tension (étape 2, figure (1.1.b)).

Cette saturation est déterminée par le taux de charges créées par les sources externes. Si la tension augmente encore, le gaz s'ionise par impact électronique, amplifiant le courant dû aux sources externes. C'est l'avalanche électronique résultant de ces processus primaires.

Le courant est multiplié par un facteur  $e^{\alpha d}$ , qui correspond au nombre de paires d'ions produites par une avalanche électronique traversant l'espace inter-électrodes.  $\alpha$  est le premier coefficient de Townsend ou coefficient d'ionisation : il définit le nombre d'électrons produits sur le chemin d'un électron parcourant 1 cm dans le sens du champ électrique.

La courbe verticale de saturation du courant s'adoucit (étape 3 figure (1.1.b)), mais le courant n'est toujours pas auto-entretenu. Pour cela il faut augmenter encore la tension pour que les processus d'émission secondaire (photo-ionisation, bombardement ionique et métastables [Lo]) entrent en jeu : création d'électrons par les particules issues des processus primaires d'ionisation ou d'excitation par impact électronique.

Les processus d'émission secondaire sont d'autant plus efficaces, pour la multiplication des avalanches, s'ils se produisent à la cathode : les électrons sont ainsi accélérés sur tout l'espace inter électrodes jusqu'à l'anode, fournissant une ionisation plus importante qu'un électron provenant du milieu de l'espace inter-électrodes. En tenant compte de ce processus, l'amplification du courant peut s'écrire [To] :

$$i = i_0 \frac{e^{\alpha d}}{1 - \gamma \left(e^{\alpha d} - 1\right)} \tag{1.8}$$

où  $\gamma$  est le second coefficient de Townsend, qui dépend du matériau de la cathode, du gaz et qui tient compte de la contribution des ions positifs, des photons et des espèces métastables.

Le claquage a lieu quand la tension aux bornes des électrodes atteint un seuil  $V_t$  (seuil de claquage, étape 4, (figure 1.1.b)), tel que l'amplification du courant entre les électrodes tende vers l'infini :

$$\gamma \left( e^{\alpha d} - 1 \right) = \mu = 1 \tag{1.9}$$

Cette équation représente l'établissement d'un courant stable auto-entretenu sous un champ électrique homogène  $E_t = V_t/d$ . Le processus d'auto-entretien dans l'espace inter-électrodes peut être décrit de la manière suivante : un électron émis par la cathode produit  $e^{\alpha d} - 1$  ions qui, en interagissant avec la cathode, extraient  $\gamma$  électrons chacun (dans le cas d'une émission ion-électron). Un électron primaire est remplacé par un électron secondaire.

Cependant, le claquage ne peut être entretenu si la tension appliquée est exactement  $V_t$ , car cette tension permet uniquement d'entretenir la première reproduction d'électrons ( $\mu$ =1). Afin d'augmenter la quantité d'électrons germes à la cathode, il faut augmenter légèrement la tension appliquée ( $V \rangle V_t$ ) et ainsi accéder au régime d'auto-entretien. On introduit donc une légère surtension ( $\Delta V = V - V_t \rangle 0$ ) pour assurer un renouvellement étendu d'électrons ( $\mu$ >1) [Me-2].

Une fois la tension de claquage atteinte et la condition d'auto-entretien remplie, un premier type de décharge s'établit : la décharge sombre de Townsend. Pour l'établissement de ce type de décharge, la résistance du circuit doit être très grande afin de limiter le courant de décharge à une valeur suffisamment faible pour que la charge d'espace positive qui s'accumule entre les électrodes ne déforme pas le champ électrique appliqué.

Si le courant augmente, le champ devient spatialement inhomogène et la décharge de Townsend transite en décharge luminescente. Le champ de charges d'espace devenant plus important, la tension nécessaire pour maintenir la décharge diminue. Une chute cathodique se forme, caractérisée par une région de charges d'espace positive autour de la cathode avec des champs électriques élevés. Une colonne positive de plasma quasi-neutre se crée entre l'anode et la cathode. Durant le processus de claquage, chaque avalanche s'étend généralement transversalement à cause de la diffusion des électrons. D'autre part, un processus ne débute pas nécessairement avec un seul électron, plusieurs peuvent être émis simultanément à des endroits différents.

Ainsi, le claquage de Townsend occupe le plus souvent tout le volume inter électrodes par diffusion. Il en va de même pour les décharges, dites, de ce fait, homogènes résultantes : décharge de Townsend ou décharge luminescente. Ceci constitue une différence importante par rapport aux décharges filamentaires, issues d'un claquage de type streamer, qui est très localisé, comme nous allons le voir dans le paragraphe qui suit.

#### 1.6.3 Claquage de type streamer et décharge filamentaire

La plupart des décharges que l'on rencontre à la pression atmosphérique (corona, arc) sont initiées par un claquage de type streamer.

Dans l'air, d'après le critère proposé en 1940 par Raether [Ra-2], lorsque le produit (pression\*distance inter-électrodes) devient supérieur à 1000 Torrs.cm, on peut s'attendre à un claquage de type streamer et à un claquage de type Townsend s'il est inférieur. Une surtension trop importante donne aussi un claquage de type streamer. La courbe de la figure (1.5) propose une limite entre ces deux types de claquage dans l'air en fonction de la surtension appliquée et du produit p\*d.



Figure 1.5: Courbe séparant les conditions en air résultant d'un claquage de Townsend (région inférieure) d'un claquage de type streamer (région supérieure)

Dans les conditions données plus haut, le processus de claquage observé est trop rapide pour être expliqué par un mécanisme d'avalanches électroniques successives assistées par l'émission d'électrons secondaires à la cathode [Ro]. Cette émission secondaire due à l'impact des ions à la cathode n'est tout simplement pas possible car le temps de propagation de l'avalanche primaire est beaucoup plus rapide que le temps de transit des ions à la cathode. D'autre part, une des caractéristiques essentielles du claquage de Townsend est que le champ de charges d'espace d'une seule avalanche électronique ne modifie pas le champ électrique appliqué dans l'espace inter-électrodes.

Cependant, quand le nombre d'électrons dans l'avalanche dépasse un seuil critique  $N_{cr}$  ( $\approx 10^8$ ) avant d'atteindre l'anode, l'accumulation de charges d'espaces locales engendre un mécanisme de claquage complètement différent. Le critère de Meek [Me-1] définit ce seuil :

$$e^{\alpha d} \le N_{cr} \tag{1.10}$$

On parle alors de claquage de type streamer [Me-3]; ce claquage est beaucoup plus rapide que le claquage de Townsend (durée  $10^{-9}$  s) et donne un fin canal de décharge constituant un filament.

#### 1.6.3.1 Streamer positif



(a) : Avalanche électronique (b) : Propagation du streamer primaire

(c) : Filament

Figure 1.6 : Mécanisme de claquage de type steamer positif (CDS)

Le mécanisme de claquage de type streamer positif se décompose en plusieurs phases (figure 1.6) :

✤ Avalanche primaire (figure 1.6 .a)

Une avalanche intense se forme et croit très rapidement de la cathode vers l'anode. Les charges d'espace forment une sorte de dipôle au sein même de l'avalanche : les électrons sont en tête d'avalanche alors que les ions positifs restent en queue.

Le champ de charges d'espace résultant va distordre localement le champ appliqué. Puis, la croissance rapide de l'avalanche et son amplification lui permettent d'atteindre une taille telle que le champ de ces charges d'espace va devenir aussi important que le champ appliqué. A ce moment, le nombre d'électrons atteint son seuil critique  $N_{cr} \approx 10^8$ .

Ce champ s'additionne au champ appliqué et une zone faiblement ionisée peut alors se créer. Lorsque l'avalanche atteint l'anode, il ne reste plus que les charges d'espace positives de la queue de l'avalanche dans l'espace inter-électrodes. Le champ est formé par ces charges ioniques et leur image à l'anode.

Pour que l'avalanche primaire se transforme en streamer, il faut qu'elle atteigne un niveau d'amplification très élevé. Le champ de charge d'espace doit atteindre la valeur du champ appliqué, sinon il n'y aurait aucune raison que l'évolution normale de l'avalanche soit perturbée.

C'est ce point particulier qui permet de distinguer la transition de l'avalanche primaire vers le streamer et le claquage de type streamer de la multiplication des avalanches et du claquage de type Townsend.

Transition avalanche streamer et propagation (figure 1.6.b)

Lorsque l'avalanche primaire rejoint l'anode, au moment où son amplification est maximum et où la zone faiblement ionisée se crée, le streamer va se former. Il va ensuite se propager et croître de l'anode vers la cathode. Cette croissance est causée par des avalanches secondaires qui se créent au voisinage de la tête du streamer.

Elles sont initiées par des électrons émis par photo-ionisation. Ces électrons sont rapidement attirés dans le streamer et se mélangent aux ions issus de l'avalanche primaire pour former un plasma quasi-neutre. Les ions de l'avalanche secondaire, se déplaçant bien plus lentement que les électrons, sont à leur tour intégrés à la tête du streamer.

Ils forment la nouvelle tête, chargée positivement du streamer qui s'étend de cette manière. Ces charges attirent à leur tour les électrons issus d'une deuxième génération d'avalanche secondaire et ainsi de suite jusqu'à rejoindre la cathode.

Cette description correspond à la propagation d'un streamer positif (Cathode Directed Streamer ou CDS), comme on peut l'observer avec une distance inter électrodes faible et une surtension peu élevée.

Etablissement d'un canal de décharge (figure 1.6.c)

Une fois que le streamer a rejoint la cathode, la phase de claquage est terminée et un filament, un mince canal de décharge partiellement ionisé, se forme.

Nous devons donc distinguer la formation du streamer positif (CDS) du streamer négatif (ADS ou Anode Directed Streamer).

Le streamer positif se forme entre l'avalanche initiale et la cathode ; la propagation se fait dans le sens contraire au mouvement des électrons et avec une vitesse très supérieure à la vitesse de dérive des ions positifs.

#### 1.6.3.2. Streamer négatif

Le streamer négatif (figure (1.7)) se forme entre l'avalanche initiale et l'anode; le mécanisme de propagation est le même que celui qui vient d'être énoncé à la différence près que cette fois les électrons se propagent naturellement dans le sens de propagation du streamer. Les avalanches secondaires peuvent être alors créées en avant du front d'ionisation, elles seront ensuite rejointes et continueront à former la queue du streamer. Il faut noter que dans ce cas, une propagation sans émission de photons est possible. Les électrons de la tête du streamer sont alors accélérés dans le très fort gradient de charge d'espace et vont ensuite être piégés électrostatiquement par les ions positifs formant ainsi, comme précédemment, un canal de plasma quasi neutre, le canal du streamer [Be].



Figure 1.7: Représentation schématique du développement d'un streamer négatif

# Bibliographie chapitre I

[Ai]	Aissaoui A., "Modélisation des décharges luminescentes radio fréquence", Thèse de Magister de la Faculté de Génie Electrique, Département d'Electrotechnique, Université des Sciences et de la Technologie Mohammed Boudiaf Oran, Juin 2000.	
[Ar]	Arianer J., "Les processus d'ionisation", cours, Université Paris Sud, 2004.	
[Be]	Bessières D., "Modélisation des décharges électriques filamentaires", Thèse de doctorat en électrotechnique, Université de Pau et des Pays de l'Adour, Décembre 2006.	
[Bo]	Bourak Y., "Détermination des conditions d'ionisation caractérisant le seuil de claquage de l'air par la logique floue", Thèse de magister en électrotechnique, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Département d'Electrotechnique, Université de Batna, Décembre 2005.	
[Br]	Bran A., "Optimisation of ozone production via corona discharge", CHEE 4006, Individual Inquiring, page 1-56, 2001.	
[Co-1]	Cormier J. M., "Traitement d'effluents gazeux par plasmas non thermiques", A la pointe de l'instrumentation et de la technologie, page 1-6, 2002.	
[Co-2]	Cormier J. M., "Dépollution d'effluents gazeux par plasma", http://www.lpgp.u- psud.fr/operations/effluent/index.htm lpgp, page 1-6, 2002.	
[De-1]	Delcroix J.L., Bers A., "Physique des plasmas", Inter éditions / CNRS, Editions Paris, 1994.	
[De-2]	Destrez P., "La stérilisation par plasmas froids", Revue Intermedica, Absys SA, 21-24, page 6-7, Mai 2002.	
[Dh]	Dhiu B., Guthmann C., Lederer D. et Roulet B., "Eléments de Physique statistique", Editions Hermann, Paris 1989.	
[Do]	Doumène S., " Désinfection et stérilisation des instruments médicaux", CRCI/ ARIST, Champagne Ardenne, page 1-2, 2004.	
[Du]	Ducasse O., " Modélisation électrodynamique d'un réacteur plasma hors équilibre de dépollution des gaz", thèse de doctorat de l'Université Paul Sabatier, 2006.	
[Fa]	Fauchais P., "Gaz ionisés et plasmas", Technique de l'ingénieur, AF3560, page 1-27.	
[Fl-1]	Flitti A, "Modélisation numérique 1.5D et 2D de la propagation d'une décharge filamentaire haute pression", Thèse de Doctorat en Sciences de Faculté de Génie Electrique, Département d'Electrotechnique, Université des Sciences et de la Technologie Mohammed Boudiaf Oran, Janvier 2008.	

[Fl-2]	Flitti A., Hennad A. et Hamid A., "Résolution numérique des équations de dérive- diffusion pour les décharges électriques haute pression", Congrès Général de la	
	Société Française de Physique, Grenoble, 9-13 Juillet 2007.	
[He]	Held B., "Physique des plasmas froids", Collection Physique Fondamentale et Appliquée Masson, Paris, 1994.	
[La]	Larbre J, "Décontamination de surface par un procédé plasma froid à pression atmosphérique", Thèse de doctorat de l'Université Paris Sud, 26 Juin 2006.	
[Le]	Leroy G., Gary C., Hutzler B., Lalot Jet Dubanton C., "Les propriétés diélectriques de l'air et les très hautes tensions ", Editions Eyrolles, 1984.	
[Lo]	Loeb L.B., "Electrical breakdown of gases with steady or direct current impulse potential", in Encyclopedia of Physics, volume XXII: Gas discharges II, edited by S Flugge, Springer Verlag Berlin, 1991.	
[Ma-1]	Massines F., "Plasmas froids", Publication de l'Université de St Etienne, 2009.	
[Ma-2]	Masuda S., "Destruction of gaseous pollutants and air toxics by surface discharge induced plasma chemical process (SPCP) and pulse corona induced plasma chemical process (PPCP) ", NATO ASI Series, vol. G34-B, page 199-209,1993.	
[Ma-3]	Massines F., "Gas discharges and their applications (GD 92) ", Swansea, W. T. Williams Ed., vol II, page 730-733, Septembre 92.	
[Ma-4]	Massines F., "Gas discharges and their applications (GD 92) ", Swansea, W. T. Williams Ed., vol II, page 318, Septembre 1992.	
[Ma-5]	Massines F., "Réseau Plasmas Froids", Mai 2002.	
[Ma-6]	Massines F., "Traitement de matériaux polymères par plasma de post décharge, application au collage", La lettre Traitement de surface par plasmas ions n°10, page 15-26, Octobre 2003.	
[Ma-7]	Massines F., "Procédés de traitement de surface par décharge hors équilibre à la pression atmosphérique", La lettre Traitement de surface par plasmas ions n°10, page 26-36, Octobre 2003.	
[Ma-8]	Maino A.," La nouvelle génération de générateurs d'ozone ", Ino3 max.	
[Me-1]	Meek J. M., Craggs J. D., "Electrical breakdown of gases", Wiley, Interscience Publication, 1977.	
[Me-2]	Meek J. M., Craggs J. D., "Gas discharges physics ", edited by S Flugge, Springer Verlag Berlin, 1991.	
[Me-3]	Meek J. M., "A theory of spark discharge", Naturwissenschaften, 57, page 722-728, 1940.	
[Mo]	Moisan M., Barbeau J., Crevier M. C., Leduc A., Pelletier J., Philip N.et Saoudi	
	B., "Rôle et effet des photons UV dans l'inactivation des spores par un plasma à pression réduite", La lettre Traitement de surface par plasmas ions n° 9, page 12-26, 2002.	
--------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	
[Od]	Odic E., Goldmann M., Pointu A. M. et Ganciu M., "Stérilisation par décharge à la pression atmosphérique", La lettre traitement de surface par plasmas ions n°9, page 10-26, 2002.	
[Po]	Pospisil M., Viden I., Simek M. et Pekarek S., "Application of plasma technique for exhaust after treatment", 9 th International Symposium, transport and air pollution, Avignon, page 523-528, 2000.	
[Ra-1]	Raiser Y. P., "Gas discharge physics", Springer Verlag, 1991.	
[Ra-2]	Raether H., "Zum Aufbau von Gazentladungen", Rev. Mod. Phys., 28 (47-48), page 729-752, 1940.	
[Ri]	Ricard A., Sixou M., "Apport des technologies plasma dans la stérilisation médicale", Faculté de chirurgie dentaire, La revue trimestrielle du réseau Ecrin n°55, page 20-21,2002.	
[Ro]	Rogowski W., "Stobspannung und durchshlag bei gazen", Arch Elektrotech, 20(1), page 99-106, 1928.	
[Sa]	Salanne J. P., "Contrôle du point de fonctionnement des décharges par l'intermédiaire de leur alimentation", Thèse de doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, 18 Novembre 2005.	
[Se]	Ségur P., "Gaz isolants", Technique de l'ingénieur, D 2530, page 1-10, D2531, page 1-23.	
[Si]	Sindzingre T., "Traitement de surface par plasma atmosphérique vers de nouvelles possibilités en milieu industriel pression atmosphérique ", La lettre Traitement de surface par plasmas ions n° 10, page 24-36, Octobre 2003.	
[To]	Townsend J. S., "Electricity in gases", Clarendon Press, Oxford, 1915.	
[Tr]	Travers S. C, "Nouvelles techniques de stérilisation", La lettre Traitement de surface par plasmas ions n°9, page 8-26, Septembre 2002.	
[1]	"Générateurs d'ozone série CMG, CMGL, CMGK, INNOVATEC", Geratetechnik, Gmbh, page 1-12.	

## CHAPITRE II : MODELES MATHEMATIQUES

## Sommaire chapitre II :

2.1	Introduction	36
2.2	Fonction de distribution	36
2.3	Equilibre avec le champ local	39
2.4	Modèles mathématiques	40
2.4.1	Modèles microscopiques (cinétiques)	40
2.4.2	Modèles macroscopiques (fluides)	41
2.4.2.1	Equations utilisées dans le modèle fluide	42
2.4.3	Modèles de dérive-diffusion	43
2.5	Résolution de l'équation de dérive-diffusion en une dimension	44
2.5.1	Discrétisation de l'équation de continuité	45
2.5.2	Importance du choix du flux moyen	46
2.5.3	Présentation de quelques schémas numériques	47
2.5.3.1	Schéma Upwind	47
2.5.3.2	Schéma de Lax Wendroff	48
2.5.3.3	Schéma de Quickest	48
2.5.3.4	Schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre zéro	48
2.5.4	Critères pour le choix d'un schéma numérique	52
2.5.5	Tests des algorithmes suivant une seule dimension	52
2.5.5.1	Présentation du premier test numérique visuel	53
2.5.5.2	Présentation du deuxième test numérique visuel	58
2.5.5.3	Présentation du troisième test numérique visuel	59
2.5.5.4	Présentation du test qualitatif	61

Bibliographie chapitre II

64

#### **2.1 Introduction**

La modélisation des décharges électriques et des plasmas qu'elles créent est importante tant pour la meilleure compréhension des phénomènes de rupture des gaz que pour les applications utilisant les propriétés des plasmas réactifs : dans les deux cas, les phénomènes fondamentaux sont souvent mal connus [Be].

L'intérêt applicatif peut être l'optimisation des éclateurs à gaz rapides ou la mise au point des réacteurs à plasma froid. Les programmes complets comportent souvent trois parties traitant successivement la physique des décharges électriques, la physico-chimie du plasma créé et les réactions avec les surfaces.

C'est dans le cadre de la première partie de cette modélisation globale que s'inscrit le travail de cette thèse.

Une décharge électrique est une structure très complexe à l'intérieur de laquelle cohabitent des particules chargées (électrons et ions), des atomes ou molécules neutres (dans un état excité ou non) et des photons [Po].

Toutes ces particules interagissent entre elles de telle sorte que le comportement de chacune est fortement dépendant de celui des autres. Cette dépendance est de plus accentuée par la présence d'une charge d'espace lorsque la densité des électrons et des ions est suffisamment importante (valeurs supérieures à  $10^8$  particules par centimètres cube).

La description mathématique rigoureuse d'un système de ce type repose nécessairement sur une approche de mécanique statistique. Cela signifie que l'état d'une particule de type quelconque est décrit par la fonction de distribution des vitesses notée  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ .

#### 2.2 Fonction de distribution

La fonction de distribution des vitesses (notée de manière générale  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ ) dépend de sept variables, trois variables correspondant à la position  $\vec{r}$ , trois variables correspondant à 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).

Elle caractérise aussi le nombre de particules d'un type donné situées dans un élément de volume élémentaire d $\vec{r}$ . d $\vec{v}$  de l'espace des positions  $\vec{r}$ , et de l'espace des vitesses  $\vec{v}$  (l'ensemble étant appelé espace des phases) [Ha-1].

Si la variation élémentaire df de la fonction de distribution s'effectue de manière continue dans l'espace des vitesses, alors elle correspond à la différentielle totale de la fonction de distribution:

$$df = \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \right\} dt$$
(2.1)

Le milieu étudié (dans notre cas, azote à température ambiante) étant un gaz faiblement ionisé et les entités (électrons et ions positifs) qui nous intéressent étant soumises à un champ électrique, on peut conclure que la variation de la fonction de distribution est due aux collisions particules chargées-molécules, avec :

$$\vec{\mathbf{v}} = \frac{\partial \vec{\mathbf{r}}}{\partial t}$$
$$\vec{\mathbf{a}} = \frac{\partial \vec{\mathbf{v}}}{\partial t}$$

On peut dire que la variation de la fonction de distribution dans l'élément de volume dans l'espace des phases est due au flux de particules qui entrent et qui sortent et qui provoquent des collisions dans cet élément de volume. Ce que l'on exprime en disant que la variation de la fonction de distribution est due seulement aux collisions. On peut donc écrire:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{a}\frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = C(f)$$
(2.2)

C(f) représente l'opérateur de collisions. L'équation (2.2) est connue sous le nom d'équation de Boltzmann [Ha-2]. Celle-ci traduit le fait que la fonction de distribution dans un élément de volume de l'espace ( $\vec{r}, \vec{v}$ ) varie:

- Dans le temps par  $(\partial f / \partial t)$  au point  $(\vec{r}, \vec{v})$ ;
- ★ Et spatialement par  $(\vec{v} \partial f / \partial \vec{r})$  qui représente le terme de dérive dans l'espace et traduit la tendance du gaz à relaxer vers un état d'équilibre.

Cette variation est due d'une part à l'effet des forces extérieures  $(\vec{a} \partial f / \partial \vec{v})$  (dérive dans l'espace des vitesses) qui sont dans notre cas des forces créées par des champs électriques, et d'autre part à la création et à la disparition des particules suite aux collisions représentées par l'opérateur C(f).

L'expression complexe de cet opérateur C(f) (qui peut être exprimé  $par(\partial f / \partial t)_{coll}$ ) renferme l'hypothèse des collisions binaires, locales et instantanées ainsi que le nombre de variables considérées dans le terme de gauche. Tout cela complique plus ou moins la résolution numérique de l'équation de Boltzmann (la résolution analytique n'étant pas possible dans les gaz complexes qui nous intéressent).

L'hypothèse selon laquelle, au cours d'une interaction, seulement deux particules libres peuvent se rencontrer en un instant donné est spécifique à l'équation de Boltzmann et donne sa forme particulière au terme de collision de cette équation qui rend compte de ce type d'interaction.

En l'absence de toute force extérieure appliquée et au bout d'un temps de relaxation suffisamment long, la solution de l'équation de Boltzmann correspond à l'équilibre thermodynamique local et conduit à une fonction de distribution de Maxwell quelque soit le type de particules considéré. L'état du système est uniquement caractérisé par sa température T et par les densités des diverses particules, ces grandeurs dépendant ou non de la position  $\vec{r}$  et du temps t.

En présence des forces extérieures (champ électrique), on peut toujours mettre en évidence une solution d'équilibre, mais celle-ci n'est plus décrite par une fonction de Maxwell. Elle est caractérisée par l'équilibre entre l'énergie gagnée par les particules sous l'action des forces extérieures appliquées et l'énergie dissipée par ces mêmes particules au cours des collisions.

La cinétique de chacune des populations des particules chargées (électrons, ions positifs dans notre modèle) est décrite par une fonction de distribution des vitesses solution de l'équation de Boltzmann [Ha-2].

Pour les électrons: 
$$\frac{df_e}{dt} = \frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_e}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \frac{\partial f_e}{\partial \vec{v}} = C(f_e)$$
 (2.3)

Pour les ions positifs:

$$\frac{\mathrm{d}f_{i}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f_{i}}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f_{i}}{\partial \vec{r}} + \vec{a}\frac{\partial f_{i}}{\partial \vec{v}} = C(f_{i})$$
(2.4)

On peut aussi rencontrer une situation plus délicate lorsque la résolution de l'équation de Boltzmann pour les espèces lourdes doit être prise en compte. Et quand la charge d'espace est suffisamment importante pour modifier le champ extérieur comme c'est le cas notamment pour les décharges filamentaires que l'on va étudier, l'équation de Boltzmann doit être couplée à l'équation de Poisson.

L'équation de Poisson est donnée par :

$$\Delta \Phi = \nabla^2 \Phi = -\frac{q_e(n_i - n_e)}{\varepsilon}$$
(2.5)

 $\Phi$  représente le potentiel et :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r \tag{2.6}$$

 $\varepsilon$ ,  $\varepsilon_0$  et  $\varepsilon_r$  représentent respectivement la permittivité du milieu, la permittivité du vide et la permittivité relative. q<sub>e</sub> représente la charge élémentaire d'un électron. Dans notre cas,  $\varepsilon_r$  est pris égal à 1.

Le calcul du champ se fait par la formule (2.7):

$$\vec{\mathbf{E}} = -\nabla \vec{\Phi} \tag{2.7}$$

Si un modèle prend en compte le couplage entre la cinétique des particules chargées et la distribution du champ électrique, on dit que le modèle est auto cohérent (au sens électrique du terme).

La résolution numérique d'un tel système est très complexe et bien trop lourde pour une utilisation à des fins de modélisation, où le facteur temps tient une place prépondérante. Les résultats doivent être obtenus de manière plus rapide et moins coûteuse que les résultats expérimentaux.

Des hypothèses simplificatrices ont été introduites au niveau de la dépendance spatiale et temporelle des paramètres permettant la description de l'évolution des particules. Parmi ces hypothèses, on a celle qui consiste à supposer l'existence d'un régime d'équilibre.

#### 2.3 Equilibre avec le champ local

On considère le cas où le champ appliqué à un système est constant et uniforme. On admet dans une telle situation que les propriétés macroscopiques des particules chargées étudiées sont indépendantes de la position et du temps et sont uniquement fonction du champ appliqué. Les particules sont en équilibre avec le champ électrique et le système est en régime hydrodynamique [Ha-2].

Le régime hydrodynamique (ou régime d'équilibre avec le champ local) est un état d'équilibre dans lequel les pertes d'énergie au cours des collisions sont compensées par le gain d'énergie suite aux collisions et aux forces extérieures. On note que cet état est différent de l'équilibre thermodynamique local dans lequel, en l'absence de forces extérieures et au bout d'un temps suffisamment long, l'ensemble des particules d'un système tend vers une situation caractérisée par une distribution de Maxwell à la température du gaz.

C'est le résultat stable d'un bilan équilibré entre les processus directs et inverses. Cela ne risque pas de se produire dans le milieu qui nous intéresse (plasma froid non thermique produit par décharge filamentaire) où la température des électrons est très supérieure à celle des ions, elle-même supérieure à celle des neutres.

En fait, le bilan des énergies gagnée et perdue n'est pas rigoureusement nul, ce qui implique que l'équilibre n'est jamais réalisé surtout quand le champ varie dans le temps et/ou dans l'espace. Une approximation valable consiste à admettre l'équilibre si la variation du champ électrique le long d'un libre parcours moyen  $\lambda$  est faible.

$1 \text{ dE}_{\text{trace infériour } 2^{-1}}$	(28)
E dx	(2.0)

La variable x repère la position de la particule le long de la direction du champ électrique. Si cette relation est valable, la description de la décharge pourra s'effectuer (même lorsque E dépend de la position et du temps) en utilisant les valeurs des paramètres de transport calculés à l'équilibre lorsque le champ électrique est constant. Dans ces conditions, les grandeurs macroscopiques dépendent de la position et du temps uniquement par l'intermédiaire de la variation spatiale ou temporelle du champ électrique réduit local E/N où E et N sont respectivement le champ électrique et la densité du gaz. Cette approximation consiste à considérer que la fonction de distribution atteint un état d'équilibre quasi instantané en réponse à l'application du champ électrique. Cette hypothèse est valide si la durée de relaxation de la fonction de distribution en énergie et en quantité de mouvement des espèces chargées est faible devant toute variation caractéristique du champ électrique dans la décharge. Vitello et ses associés ont montré la validité de cette hypothèse par la résolution de l'équation de Boltzmann [Vi].

Ils ont montré qu'à la pression atmosphérique et dans l'azote pur, les temps de relaxation sont respectivement de 10 et 100 picosecondes pour des champs réduits de 10 et 100 Townsend.

#### 2.4 Modèles mathématiques

On peut répartir les codes de calcul des décharges électriques suivant trois grandes familles correspondant à des pressions et à des champs différents et donc des approximations différentes.

#### 2.4.1 Modèles microscopiques (cinétiques)

Comme on l'a vu dans le chapitre I, le développement d'un streamer nait de processus collectifs microscopiques, comme par exemple les collisions ionisantes entre électrons et molécules qui forment des avalanches électroniques de taille suffisante pour induire une charge d'espace capable de déformer le champ géométrique. La description microscopique rigoureuse de ces phénomènes ne peut être réalisée que par des modèles particulaires [Du], [Ku-2], [Wu].

Lorsque la description mathématique de la décharge est basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann, on dit que l'approche est microscopique. Dans ce cas, la description complète d'un système s'appuie sur la connaissance des différentes interactions élémentaires entre les particules qui sont caractérisées par les sections efficaces de collisions (collisions électron-molécule, ion-molécule, photon-molécule).

Le modèle de calcul est dit cinétique, c'est l'approche la précise mais la plus difficile ; on résout l'équation de Boltzmann où l'inconnue est la fonction de distribution d'une certaine espèce  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ 

On remonte ainsi à la densité de l'espèce en question au point repéré par  $\vec{r}$ :

$$n(\vec{r},t) = \int f(\vec{r},\vec{v},t) d^3v$$
 (2.9)

v représente le volume.

Résoudre numériquement cette équation passe le plus souvent par des simplifications qui portent sur le nombre de dimensions qui peut être réduit par symétrie, l'approximation des

termes de collision ou l'approximation de la fonction de distribution dans l'espace des vitesses en polynômes de Legendre.

Il y a aussi une façon indirecte de résoudre l'équation de Boltzmann qui consiste à imiter la nature et à simuler sur un ordinateur puissant les trajectoires et les collisions d'un nombre déterminé de particules (10<sup>7</sup> particules) ou groupes de particules. C'est ce que font les codes PIC (Particule In Cell) qui forment un sous-ensemble des méthodes dites de Monte Carlo [Ai], [Be], [Du]. La qualité de la statistique dépend du nombre de particules pris en compte.

La description microscopique d'un système n'est en fait absolument nécessaire que pour des situations très spécifiques pour lesquelles, par exemple, le libre parcours moyen des particules est du même ordre de grandeur ou supérieur aux dimensions du système à l'intérieur duquel elles évoluent.

Cette situation se rencontre essentiellement dans le cas des décharges basse pression ou bien lorsque la structure du milieu considéré change de manière significative à l'échelle d'un libre parcours moyen.

Dans le cas des décharges haute pression, les libres parcours moyens de toutes les particules sont beaucoup plus faibles que les dimensions de l'enceinte et l'approche microscopique n'est pas nécessaire et peut être remplacée par une approche macroscopique moins détaillée mais plus abordable.

#### 2.4.2 Modèles macroscopiques ou fluides

La mise en œuvre de l'approche macroscopique consiste à multiplier l'équation de Boltzmann (2.2) par les puissances du vecteur vitesse soit 1, v,  $v^2, ..., v^n$ . On obtient le premier moment, le deuxième moment, .... le nième moment et à intégrer les équations successives obtenues sur l'espace des vitesses. On obtient un système infini d'équations, strictement équivalent à l'équation de Boltzmann initiale, mais dans lequel ne figure plus la vitesse des particules.

Au lieu de la fonction de distribution des vitesses, les grandeurs physiques, solution de chaque équation, sont respectivement la densité des particules  $n(\vec{r},t)$ , leur vitesse moyenne  $\vec{v}(\vec{r},t)$ , leur énergie moyenne, c'est-à-dire des grandeurs locales.

La vitesse moyenne d'une particule est donnée par:

$$\left\langle \vec{v} \right\rangle = \frac{1}{n(\vec{r},t)} \int \vec{v} f(\vec{r},\vec{v},t) \, d\vec{v} \tag{2.10}$$

Pour toute autre grandeur  $\vec{x}$ , on peut définir sa valeur moyenne par:

$$\left\langle \vec{x} \right\rangle = \frac{1}{n(\vec{r},t)} \int \vec{x} \ f(\vec{r},\vec{v},t) d\vec{v}$$
(2.11)

La fonction de distribution originelle (grandeur microscopique) est remplacée par une succession de grandeurs macroscopiques  $(n(\vec{r},t), \vec{v}(\vec{r},t))$ ; on passe d'une description microscopique à une description macroscopique appelée également fluide.

La représentation fluide est directement limitée par le degré de simplification de la fonction de distribution des vitesses des particules chargées. En général, les grandeurs moyennes sont déterminées à partir de la résolution des deux ou trois premiers moments de l'équation de Boltzmann.

#### 2.4.2.1 Equations utilisées dans le modèle fluide

#### A- Equation de continuité

En multipliant l'équation (2.2) par 1 et en intégrant dans l'espace des vitesses, on obtient le premier moment qui correspond à l'équation de continuité:

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{n} \overline{\mathbf{v}} = \left(\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t}\right)_{\text{coll}}$$
(2.12)

n et  $n\overline{v}$  représentent respectivement la densité des particules et le flux de particules. Pour une espèce donnée, le terme  $(\partial n / \partial t)_{coll}$  représente la variation de la densité des particules sous l'effet des collisions.

L'expression du terme source (membre de droite) sera donnée ultérieurement (voir chapitre IV).

#### **B-** Equation de transfert de la quantité de mouvement

En multipliant l'équation (2.11) par (mv) et en intégrant dans l'espace des vitesses, on obtient le deuxième moment qui correspond à l'équation de transfert de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial nm\overline{v}}{\partial t} + nm(\overline{v} \nabla_{r})\overline{v} + \overline{v}(\nabla_{r} nm\overline{v}) + \nabla_{r}P - n\overline{F} = (mn\frac{\partial\overline{v}}{\partial t})_{coll}$$
(2.13)

F représente les forces extérieures exercées sur les particules, P est le tenseur de pression cinétique qui correspond à la densité d'énergie d'agitation thermique.

Cette équation représente la variation temporelle totale de la quantité de mouvement sous l'effet des forces extérieures, de la pression cinétique et des collisions.

$$\mathbf{P} = \mathbf{m} \int (\mathbf{v} - \overline{\mathbf{v}}) (\mathbf{v} - \overline{\mathbf{v}}) \mathbf{f} \, d\vec{\mathbf{v}}$$
(2.14)

#### **C- Equation de conservation de l'énergie**

Pour améliorer la représentation des processus d'ionisation, un troisième moment de l'équation de Boltzmann correspondant à l'équation de transport de l'énergie pour les particules peut être ajouté au système. Ainsi, dans ce modèle on peut considérer que le terme source d'ionisation 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:

$$\frac{\partial n\varepsilon}{\partial t} + \frac{5}{3} \nabla_r (n\overline{\varepsilon v}) + \nabla_r Q - nq_e \overline{v}E = -n\upsilon_i \overline{\varepsilon}$$
(2.15)

Avec  $q_e$  charge élémentaire,  $\upsilon_i$  fréquence d'échange d'énergie par collision, E champ électrique et Q flux de chaleur.

#### D- Fermeture du système des équations de transport

En considérant les puissances de la vitesse d'ordre supérieur à deux, on obtient un grand nombre d'équations de transport dans la suite de celles décrites ci-dessus et décrivant la conservation des quantités tensorielles d'ordre supérieur (pression cinétique, flux de chaleur, etc...). Dans ce cas, l'avantage apporté par ces équations de transport plus facile à résoudre que l'équation de Boltzmann, est perdu en raison du grand nombre d'équations à résoudre.

Cela n'a pas d'intérêt puisque le but est la difficulté de la résolution de l'équation de Boltzmann. C'est pourquoi, on se limite dans la plupart des cas aux deux ou trois premiers moments de l'équation de Boltzmann. Mais dans tous les cas, le nombre d'inconnues est supérieur au nombre d'équations. On peut fermer le système moyennant des approximations telles que l'hypothèse du champ local ou de l'énergie locale [Ha-2].

On se limite dans notre étude aux deux premiers moments de l'équation de Boltzmann (on dit que le modèle est d'ordre 1). Dans ce cas, la fermeture nécessite deux approximations. La première consiste à négliger les termes de gradients de densité d'ordre supérieur afin d'obtenir une équation simplifiée du transfert de la quantité de mouvement. La seconde approximation correspond à l'hypothèse du champ local.

\*\*Un modèle du second ordre inclue en plus l'équation de l'énergie des électrons. Le modèle d'ordre deux est plus précis mais en raison surtout du manque de données de base et de l'allongement des temps de calcul, on préfère l'utilisation d'un modèle d'ordre 1 beaucoup plus souple.

#### 2.4.3 Modèles de dérive diffusion

En supposant la température constante et le terme de collision prépondérant, on cherche à résoudre l'équation pour le flux de particules :

$$\mathbf{J} = \mathbf{n}\overline{\mathbf{v}} = \mathbf{n}\mathbf{w}(\mathbf{E}) - \mathbf{D}(\mathbf{E})\nabla_{\mathbf{r}}$$
(2.16)

Les paramètres w(E) et D(E) sont respectivement la vitesse de dérive et le coefficient de diffusion de la particule transportée qui dépend de la position et du temps à travers le champ local  $E(\vec{r},t)$ . L'hypothèse du champ local se traduit par  $w(\vec{r},t) \cong w(E(\vec{r},t))$ . En effet, dans le cas des décharges haute pression, on admet habituellement que les particules sont en équilibre avec le champ électrique.

En remplaçant l'équation (2.15) dans l'équation de continuité (2.11), on obtient:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{r} (nw(E) - D(E)\nabla_{r}n) = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll} = S$$
(2.17)

L'équation (2.17) prend la même forme pour les électrons et les ions. Elle est dite équation de dérive-diffusion car elle est constituée d'un terme de dérive (du premier ordre par rapport à la dérivée spatiale) et d'un terme de diffusion (du second ordre par rapport à la dérivée spatiale).

S est le terme source de l'équation de continuité rendant compte des réactions principales possibles :

- ✤ L'ionisation ;
- ✤ L'attachement ;
- ✤ La recombinaison.

Il n'est pas possible en général de résoudre d'une manière analytique l'équation différentielle (2.17) pour chaque particule chargée, il est donc nécessaire de faire appel à des méthodes numériques.

#### 2.5 Résolution de l'équation de dérive-diffusion en une dimension

L'équation fondamentale rendant compte de l'évolution spatio-temporelle de la densité des particules dans notre modèle (milieu azote où on ne considère que les électrons et les ions positifs) est l'équation de continuité à une dimension qui prend la même forme pour les électrons et les ions positifs:

$$\frac{\partial n_{e}(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial n_{e}(x,t)w_{e}(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}D_{e}(x,t)\frac{\partial n_{e}(x,t)}{\partial x} = S_{e}(x,t)$$
(2.18)

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{i}(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{n}_{i}(\mathbf{x},t)\mathbf{w}_{i}(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{D}_{i}(\mathbf{x},t)\frac{\partial \mathbf{n}_{i}(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{S}_{i}(\mathbf{x},t)$$
(2.19)

Ces deux équations vont être couplées à l'équation de Poisson:

$$\frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{|\mathbf{q}_{e}|}{\varepsilon_{0}} \Big[ \mathbf{n}_{i}(\mathbf{x},t) - \mathbf{n}_{e}(\mathbf{x},t) \Big]$$
(2.20)

Dans les équations (2.17) et (2.18),  $S_e$  et  $S_i$  sont respectivement les termes sources électronique et ionique ;  $n_e$  et  $n_i$  sont les densités des électrons et des ions ;  $w_e$ ,  $D_e$ ,  $w_i$  et  $D_i$  sont respectivement les vitesses de dérive et les coefficients de diffusion électronique et ionique ;  $\epsilon_0$  représente la constante diélectrique ou permittivité du vide ;  $q_e$  est la charge d'un électron.

Nous venons d'établir les équations macroscopiques qui sont nécessaires à la modélisation de la décharge filamentaire.

L'évolution spatio-temporelle des densités des différentes particules chargées obéit à une équation dite de dérive-diffusion. La spécificité de cette équation est de présenter, selon les valeurs respectives de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion, des types de solutions extrêmement différents.

Si le terme de diffusion prédomine, une distribution initiale de particules chargées quelconque évolue vers une forme gaussienne de plus en plus élargie au fur et à mesure que le temps croît.

Si le terme de dérive est relativement important par rapport au terme de diffusion, cette distribution se propage sans modification au cours du temps. C'est le cas des décharges filamentaires haute pression.

#### 2.5.1 Discrétisation de l'équation de continuité

L'équation de continuité à une dimension peut être écrite de deux façons (si on ne tient pas compte du terme source ou membre de droite) aussi bien pour les électrons que pour les ions positifs :

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial n(x,t)w(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}D(x,t)\frac{\partial n(x,t)}{\partial x} = 0$$
(2.21)

Ou bien :

$$\frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{x},t)}{\partial \mathbf{x}} = 0$$
(2.22)

L'équation (2.22) discrétisée prend la forme suivante :

$$\frac{\mathbf{n}_{i}^{k+1} - \mathbf{n}_{i}^{k}}{\Delta t} + \frac{\mathbf{J}_{i+1/2}^{k} - \mathbf{J}_{i-1/2}^{k}}{\Delta x} = 0$$
(2.23)

Dans la relation (2.23),  $\Delta t$  représente le pas de temps et  $\Delta x$  le pas suivant la position, les exposants de l'équation (2.23) k et k+1 représentent respectivement les instants t et  $t + \Delta t$ .  $J_{i+1/2}$  est le flux moyen entre la cellule i et la cellule i+1, et  $J_{i-1/2}$  est le flux moyen entre la cellule i et la cellule i+1.



Figure 2.1 : Discrétisation suivant l'axe de propagation Ox

$$\mathbf{n}_{i}^{k+1} = \mathbf{n}_{i}^{k} - \frac{\Delta t \left( \mathbf{J}_{i+1/2}^{k} - \mathbf{J}_{i-1/2}^{k} \right)}{\Delta \mathbf{x}}$$
(2.24)

La relation (2.24) montre que  $n_i^{k+1}$  s'obtient à partir de  $n_i^k$  et des flux aux milieux de deux cellules consécutives. Les valeurs de n à l'instant  $t_k$  s'obtiennent de proche en proche à partir de l'instant initial  $t_0$  et de la connaissance des conditions initiales [Po].

Les valeurs du flux au centre des cellules élémentaires peuvent s'obtenir (voir figure (2.1)) de différentes manières.

La difficulté principale au niveau de l'établissement d'un schéma numérique repose sur la détermination optimale du flux qui doit nécessairement s'exprimer en termes de combinaison linéaire des densités  $n_i^k$  situées de part et d'autre de  $x_i$ .

#### 2.5.2 Importance du choix du flux moyen

Comme  $J_{i+l/2}^k$  est situé au centre de la cellule i, l'approximation la plus naturelle consiste à admettre que la densité n varie linéairement entre  $x_i$  et  $x_{i+1}$ . Dans ces conditions, on peut écrire en négligeant pour l'instant le terme de diffusion que le flux  $J_{i+l/2}^k$  est donné par l'expression :

$$\mathbf{J}_{i+1/2}^{k} = \mathbf{w}_{i+1/2} \frac{\left(\mathbf{n}_{i}^{k} + \mathbf{n}_{i+1}^{k}\right)}{2} \quad \forall i \in [1, nx-1]$$
(2.25)

La vitesse  $w_{i+1/2}$  est la vitesse de dérive de la particule au point  $x_{i+1/2}$  supposée différente d'une cellule à une autre. Si on introduit la relation (2.25) dans (2.24), on obtient :

$$\mathbf{n}_{i}^{k+1} = \mathbf{n}_{i}^{k} \left( 1 + \frac{\left( \varepsilon_{i+1/2} - \varepsilon_{i+1/2} \right)}{2} \right) - \mathbf{n}_{i+1}^{k} \frac{\varepsilon_{i+1/2}}{2} + \mathbf{n}_{i-1}^{k} \frac{\varepsilon_{i-1/2}}{2}$$
(2.26)

On pose que :

$$\varepsilon_{i+1/2} = w_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x}$$
(2.27)

La quantité  $\varepsilon_{i+1/2}$  s'appelle le nombre de courant de Friedrich Levy (CFL). Elle représente le rapport entre la distance effectivement parcourue dans une cellule élémentaire par la particule et la longueur de la cellule  $\Delta x$ .

\*\*Dans le cas d'un schéma explicite, la distance effectivement parcourue par la particule doit être inférieure ou égale à la moitié de  $\Delta x$ .

Cela entraine que :

$$\epsilon_{i+1/2} \le 0.5$$
 (2.28)

#### 2.5.3 Présentation de quelques schémas numériques

#### 2.5.3.1 Schéma Upwind

Le calcul du flux moyen  $J_{i+l/2}^k$  dans le schéma Upwind est donné par les deux formules qui suivent :

Pour une vitesse w positive, on a :

$$\mathbf{J}_{i+1/2}^{k} = \mathbf{w}_{i} \ \mathbf{n}_{i}^{k} \quad \forall \ i \in [1, \mathbf{nx}-1]$$

$$(2.29)$$

Pour une vitesse w négative, on a :

$$\mathbf{J}_{i+1/2}^{k} = \mathbf{w}_{i} \ \mathbf{n}_{i+1}^{k} \ \forall \ i \ \in [1, \, \text{nx-1}]$$
(2.30)

La structure de ce schéma étant dépendante du signe de la vitesse, c'est-à-dire du sens de déplacement des particules, les anglo-saxons lui ont attribué le nom de Upwind (dans le sens du vent). C'est un schéma d'ordre un en espace et en temps.

Comme le nombre de Courant ou CFL doit être inférieur à 0.5, on constate que la densité  $n_i^{k+1}$  est égale à la combinaison linéaire de deux termes dont les coefficients sont strictement positifs, il s'en suit que le schéma Upwind respecte la condition de positivité.

#### 2.5.3.2 Schéma de Lax Wendroff

Le calcul du flux moyen  $J^k_{i\!+\!l/\!2}$  dans le schéma de Lax Wendroff est donné par l'équation suivante :

$$\mathbf{J}_{i+1/2}^{k} = \mathbf{w}_{i+1/2} \frac{\left(\mathbf{n}_{i}^{k} + \mathbf{n}_{i+1}^{k}\right) - \varepsilon_{i+1/2}\left(\mathbf{n}_{i+1}^{k} - \mathbf{n}_{i}^{k}\right)}{2}$$
(2.31)

C'est un schéma d'ordre deux en espace et un en temps.

#### 2.5.3.3 Schéma de Quickest

On présente dans ce paragraphe un schéma excentré d'ordre élevé. Le schéma a été développé par Leonard [Le]. On calcule pour une vitesse de dérive positive le flux moyen  $J_{i+1/2}^k$  par la formule :

$$J_{i+1/2} = \varepsilon_{i+1/2} n_{i+1/2} = \frac{1}{2} \varepsilon_{i+1/2} \left( n_{i+1}^{k} + n_{i}^{k} \right) - \frac{1}{2} \varepsilon_{i+1/2}^{2} \left( n_{i+1}^{k} - n_{i}^{k} \right) - \frac{1}{6} \varepsilon_{i+1/2} \left( n_{i}^{k} - 2n_{i+1}^{k} + n_{i+2}^{k} \right) \left( 1 - \varepsilon_{i+1/2}^{2} \right)$$
(2.32)

#### 2.5.3.4 Schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre zéro

Dans ce paragraphe, nous allons développer le schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre 0 adapté par Kulikovsky [Ku-1]. En 1969, Scharfetter et Gummel [Sc] ont proposé la première version du schéma à flux exponentiel pour la résolution de l'équation de dérivediffusion. Ce schéma que l'on va noter SG est construit selon les points suivants:

Sur l'axe Ox, on note i-1/2 le milieu de la cellule comprise entre les points i-1 et i et par i+1/2 le milieu de la cellule comprise entre les points i et i+1 (voir figure (2.2)). On considère aussi que la variation du champ est linéaire entre deux nœuds adjacents.



Figure 2.2: Maillage élémentaire suivant l'axe Ox

Pour obtenir l'expression du flux aux frontières de la cellule, soit  $J_{i+1/2}$ , on suppose qu'entre deux nœuds consécutifs i et i+1; le champ E, le coefficient de diffusion D, et le flux J sont constants et égaux à  $E_{i+1/2}$ ,  $D_{i+1/2}$ , et  $J_{i+1/2}$ . La solution de l'équation de continuité est donnée par l'expression (2.33) :

$$n(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \left[ n_{i} - \frac{\mathbf{J}_{i+1/2}}{\mathbf{D}_{i+1/2}} \int_{0}^{\xi} e^{\alpha \xi'} d\xi' \right] e^{-\alpha \xi}$$

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_{i} \quad \text{et} \quad \xi = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}) / \Delta \mathbf{x}$$
(2.33)

Si on pose  $x = x_{i+1}$  (donc  $\xi = 1$ ), on peut calculer le flux par la formule suivante:

$$\mathbf{J}_{i+1/2} = \frac{\mathbf{D}_{i+1/2}}{\Delta x \ \mathbf{I}_0} (\mathbf{n}_i - \mathbf{e}^{\alpha} \mathbf{n}_{i+1})$$
(2.34)

$$\alpha = \frac{\mu \Delta x \ E_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} \qquad \text{et} \qquad I_0 = \frac{e^{\alpha} - 1}{\alpha}$$

Après avoir déterminé les flux  $J_{i+1/2}$  et  $J_{i-1/2}$ , le calcul de la densité de particules chargées est effectué en utilisant l'équation (2.24).

Dans les décharges filamentaires à pression atmosphérique, on sait que le champ électrique peut prendre des valeurs relativement élevées, et que le pas suivant la position a des valeurs inférieures ou égales à 10<sup>-4</sup> cm.

Kulikovsky [Ku-1] a introduit une procédure d'interpolation exponentielle pour pouvoir assurer ces deux conditions. Cette interpolation a donné naissance à un nouveau schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre 0 (on le notera SG0).

Deux nœuds virtuels  $x_G$  et  $x_D$  sont insérés entre  $x_i$  et  $x_{i+1}$  (Voir figure (2.3)). Les deux nœuds sont placés symétriquement par rapport au milieu de la maille élémentaire défini par l'abscisse  $x_{i+1/2}$ .



Figure 2.3: Position des nœuds virtuels  $x_G$  et  $x_D$ 

Les densités aux nœuds virtuels sont obtenues par une méthode d'interpolation exponentielle appropriée de la densité sur l'intervalle  $(x_i, x_{i+1})$  (on donnera la formule par la suite). La construction du schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre zéro doit respecter les étapes suivantes:

- On considère les deux nœuds du maillage de base  $x_i$  et  $x_{i+1}$ ;
- On calcule le pas virtuel  $h_v$  entre deux nœuds virtuels de coordonnées  $x_D$  et  $x_G$  en utilisant la relation:

$$h_{v} = x_{D} - x_{G} = \sqrt{2 \eta D_{i+1/2} \Delta x / |w_{i+1} - w_{i}|}$$
(2.35)

Avec le facteur d'interpolation  $\eta$  qui doit être compris entre 0.01 et 0.04.

Dans ce cas, la détermination de la distance virtuelle doit respecter la condition suivante:

$$h_{v} \ll \frac{2D_{i+1/2}}{\mu |\Delta E_{v}|}$$

$$(2.36)$$

Où le calcul de la variation virtuelle du champ électrique  $\Delta E_v$  est donné par l'équation suivante:

$$\Delta E_{v} = E_{D} - E_{G} = \frac{h_{v} \Delta E_{i}}{\Delta x}$$
(2.37)

Avec

$$\begin{cases} E_{G} = (E_{i} + E_{i+1} - \Delta E_{v})/2 \\ E_{D} = (E_{i} + E_{i+1} + \Delta E_{v})/2 \end{cases}$$
(2.38)

µ représente la mobilité. Deux cas de figure peuvent se présenter :

Si  $h_v \ge \Delta x$ , le flux  $J_{i+1/2}$  est calculé par l'équation (2.34) (schéma classique de Scharfetter et Gummel);

Dans le cas contraire, on utilise la procédure suivante:

On définit les positions des nœuds virtuels et les vitesses de dérive correspondantes:

$$\begin{cases} x_{G} = (x_{i} + x_{i+1} - h_{v})/2 \\ x_{D} = (x_{i} + x_{i+1} + h_{v})/2 \\ \\ w_{G} = (w_{i} + w_{i+1} - \Delta w_{v})/2 \\ \\ w_{D} = (w_{i} + w_{i+1} + \Delta w_{v})/2 \end{cases}$$
(2.39)
(2.39)

Avec:  $\Delta w_v = \frac{h_v}{\Delta x} (w_{i+1} - w_i)$ 

• On calcule les densités  $n_G$  et  $n_D$  (densité à gauche et à droite) d'un nœud virtuel en utilisant l'expression d'interpolation exponentielle:

$$n(x,t) + 1 = (n_{i} + 1)e^{a(x - x_{i})}$$

$$a = \frac{1}{\Delta x} \log \left[ \frac{n_{i+1} + 1}{n_{i} + 1} \right]$$
(2.41)

 Le calcul du flux J<sub>i+1/2</sub> par le schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre 0 SG0 est donné par l'expression suivante:

$$J_{i+1/2} = \frac{D_{i+1/2}}{h_v I_0} (n_G - e^{\alpha_v} n_D)$$

$$\alpha_v = -\frac{h_v W_{i+1/2}}{D_{i+1/2}} ; \qquad I_0 = \frac{e^{\alpha_v} - 1}{\alpha_v}$$
(2.42)

On voit que le calcul du flux moyen au milieu de la cellule diffère d'un schéma à un autre.

#### 2.5.4 Critères pour le choix d'un schéma numérique

Un schéma numérique adapté à la modélisation des streamers et des gradients de densité doit répondre aux critères donnés par Bessières [Be], Book [Bo] et Flitti [Fl-2]:

- La conservation des profils de densité des particules chargées, exprimée par l'équation de continuité (2.21), doit être assurée par le schéma que l'on va adopter (caractère conservatif);
- Les profils des densités propagés doivent être monotones c'est-à-dire que le profil calculé par le schéma numérique doit garder la même forme ou varier très peu par rapport à la forme qu'il avait initialement puisque l'équation (2.21) est résolue avec un terme source égal à zéro ;
- L'algorithme doit être non dispersif pour ne pas générer des oscillations parasites et assurer la positivité de la solution numérique pour éviter les valeurs de densités négatives (positivité de la solution c'est-à-dire des densités);
- Le schéma numérique ne doit pas être diffusif (la diffusion numérique doit être minimale);
- Le schéma numérique doit pouvoir traiter l'évolution des profils comportant des variations spatiales brusques et les problèmes de choc ;
- ✤ Le schéma numérique doit pouvoir restituer rapidement la solution.

#### 2.5.5 Tests des algorithmes suivant une seule dimension

On travaille dans le cadre d'une description eulérienne, c'est-à-dire que l'on définit un réseau de cellules fixes par rapport au référentiel du laboratoire.

Dans ces cellules, on calcule l'évolution des grandeurs physiques.

L'équation de continuité de la densité des particules chargées (électrons ou ions positifs) est étudiée selon une seule dimension du repère cartésien et sans terme source, soit l'équation :

$$n_{i}^{k+1} = n_{i}^{k} - \frac{\Delta t \left(J_{i+1/2}^{k} - J_{i-1/2}^{k}\right)}{\Delta x}$$
(2.43)

L'équation (2.43) est résolue par quatre algorithmes différents (Upwind, Lax Wendroff, Quickest et Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre zéro) pour un test mathématique contraignant [Ku-1]. Le test fait se propager de forts gradients de densité dans un champ de vitesse linéaire.

Ce test a été choisi car il reproduit en partie les conditions rencontrées lors de la propagation des streamers, notamment dans le front de l'ionisation.

#### 2.5.5.1 Présentation du premier test numérique visuel

Le test utilisé est le test de Kulikovsky [Ku-1]. La solution analytique (solution exacte) est un moyen pour évaluer la réaction de l'algorithme SG0 dans des conditions difficiles (profil initial présentant un fort gradient de densité).

L'objectif est de savoir si l'algorithme est apte à être utilisé dans la résolution complète du modèle 1.5D avec un terme source. Ce modèle qui fait un couplage auto cohérent entre les équations de continuité électronique et ionique (ions positifs) et l'équation de Poisson est un système non linéaire et la solution analytique dans ce cas n'existe pas.

C'est la raison pour laquelle les tests numériques préliminaires sont importants pour valider l'algorithme SG0.

La forme du champ utilisé pour ce test numérique est donnée par l'expression suivante:

$$E(x) = Ax \qquad Avec \qquad 0 \le x \le 1 \qquad (2.44)$$

Où la constante A est égale à  $10^4$  (ua). Pour ces tests, Kulikovsky [Ku-1] a utilisé une vitesse de dérive de la forme:

$$\mathbf{w} = -\mathbf{A}\mathbf{x} \tag{2.45}$$

En négligeant le terme de diffusion dans l'équation de continuité, on obtient l'équation de dérive suivante:

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} - \frac{\partial (\mathbf{A}\mathbf{x}\mathbf{n})}{\partial \mathbf{x}} = 0 \tag{2.46}$$

L'équation différentielle (2.46) admet une solution analytique donnée par:

$$n(x,t) = e^{At} n(xe^{At}, t = 0)$$
(2.47)

Cette solution analytique de l'équation de dérive-diffusion va permettre de valider la solution numérique issue des quatre schémas que l'on va étudier dans les mêmes conditions de simulation. On peut aussi travailler avec une vitesse de dérive positive (vitesse de dérive des ions positifs dans le code principal). Le premier profil de la densité initiale utilisé est un modèle d'onde de choc de la forme suivante:

$$n(x, t = 0) = n_1 + \frac{1}{2} \left[ 1 + \tanh\left(\frac{x - x_0}{\sigma}\right) \right] n_2$$
(2.48)

Avec :  $n_1 = 10^2$  (ua) et  $n_2 = 10^{12}$  (ua). Les paramètres  $\sigma$  et  $x_0$  prennent les valeurs respectives de 0.02 et 0.8 (ua). On compare en premier lieu l'algorithme SG0 avec le schéma numérique Upwind pour une vitesse de dérive négative (le déplacement va se faire de droite à gauche : ce sera le déplacement des électrons).



*Figure 2.4: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Upwind, nt = 400, nx = 200, CFL =0.4, êta = 0.02, vitesse de dérive négative* 



Figure 2.5: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Upwind, nt = 200, nx =400, CFL =0.4, êta = 0.02, vitesse de dérive négative

Pour la figure (2.4), l'intervalle d'espace est divisé en 200 cellules de pas constant, le nombre de pas en temps est égal à 400 et le CFL est pris égal à 0.4. La performance d'un algorithme est validée par la comparaison de la solution numérique à la solution analytique.

On a représenté le tracé de la densité initiale donnée par la formule (2.48), le profil de la solution analytique (formule 2.47) et le profil de la densité calculée par le schéma amélioré SG0 et par le schéma Upwind.

Le profil issu du schéma Upwind ne se superpose pas à la solution analytique. On constate qu'il s'écarte fortement de la valeur exacte en particulier dans les régions où la solution exacte varie brutalement. Ces résultats sont la conséquence de la diffusion numérique. Par contre, la solution numérique est strictement positive. Le profil issu du schéma SG0 se superpose presque au profil de la solution analytique.

Pour la figure (2.5), l'intervalle d'espace est divisé en 400 cellules de pas constant, le nombre de pas en temps est égal à 200 et le CFL est pris égal à 0.4. La densité initiale et analytique sont les mêmes que pour le test précédent. On remarque que le profil de la densité calculée par le schéma amélioré SG0 se rapproche plus du profil de la solution analytique que le profil donné par le schéma Upwind.

La diffusion numérique existe toujours pour le schéma Upwind.

On a aussi comparé l'algorithme SG0 avec le schéma numérique Upwind pour une vitesse de dérive positive (le déplacement va se faire de gauche à droite). Le profil de la densité initiale prend la même forme que celle qui est donnée par l'équation (2.48).

 $n_1$  et  $n_2$  gardent les mêmes valeurs que celles qui sont données précédemment. Les paramètres  $\sigma$  et  $x_0$  prennent les valeurs respectives de 0.02 et 0.5 (ua). On a procédé au changement de valeur de  $x_0$  pour que le déplacement puisse se faire. La solution analytique est calculée par la formule (2.47).

Pour la figure (2.6), l'intervalle d'espace est divisé en 200 cellules de pas constant, le nombre de pas en temps est égal à 400 et le CFL est pris égal à 0.4.

Pour la figure (2.7), l'intervalle d'espace est divisé en 400 cellules de pas constant, le nombre de pas en temps est égal à 200 et le CFL est pris égal à 0.4.

On aboutit aux mêmes conclusions que précédemment: le schéma Upwind est diffusif ; en augmentant le nombre de points suivant la position, la diffusion est diminuée mais elle existe toujours. Le schéma SG0 donne un profil qui se confond presque avec la solution analytique.



Figure 2.6: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Upwind, nt = 400, nx=200, CFL =0.4, êta =0.02, vitesse de dérive positive



Figure 2.7: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Upwind, nt = 200, nx = 400, CFL =0.4, êta =0.01, vitesse de dérive positive



Figure 2.8: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Lax Wendroff, nt = 400, nx=200, CFL =0.4, êta = 0.02, vitesse de dérive positive



Figure 2.9: Profils de la densité initiale, analytique, densités calculées par le schéma SG0 et Quickest, nt = 200, nx = 400, CFL = 0.4, êta = 0.02, vitesse de dérive positive

La figure (2.8) représente les résultats obtenus avec la même distribution de densité initiale que la figure (2.6) et les mêmes conditions de calcul mais avec le schéma de Lax Wendroff (vitesse de dérive positive). On constate que des oscillations importantes au niveau du front abrupt. Par contre, la diffusion numérique comme espéré, puisque la solution est du second ordre en espace, est nettement moins importante.

Les résultats obtenus montrent que ni le schéma Upwind ni le schéma de Lax Wendroff ne peuvent être utilisés sans précautions particulières, puisque le premier présente une forte diffusion numérique et le second des oscillations au niveau du front abrupt.

Les résultats précédents semblent indiquer que les schémas les plus performants doivent être décentrés, donc de type Upwind pour minimiser les oscillations et d'ordre plus élevé. C'est la procédure utilisée par Léonard [Le] dans le schéma Quickest.

On a obtenu dans la figure (2.9) la forme de la densité initiale, la densité analytique, le profile de la densité issu du schéma Quickest et le schéma SGO pour les mêmes conditions que celles utilisées dans la figure (2.6). On voit que les deux profils donnés par les deux schémas se superposent et sont presque confondus avec la solution analytique.

En conclusion, à la suite de ces tests visuels, on remarque que les schémas améliorés SG0 et Quickest ont une grande capacité à reproduire les forts gradients de densité présents dans les décharges filamentaires haute pression. Pour le schéma Quickest, on ne l'a pas utilisé par la suite dans le modèle 1.5 D car on n'est pas encore en possession de la formule permettant le calcul du flux moyen dans le cas d'une vitesse négative.

#### 2.5.5.2 Présentation du deuxième test numérique visuel

Le deuxième profil est un profil gaussien donné aussi par [Ku-1]. Il est de la forme:

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}, \mathbf{t} = 0) = \mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2 \exp\left[\left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_0}{\sigma}\right)^2\right]$$
(2.49)

Où  $n_1$  et  $n_2$  prennent les mêmes valeurs que dans le premier test numérique,  $x_0$  prend la valeur 0.5 et  $\sigma^2$  0.04. Les conditions de simulation sont identiques à celles utilisées pour obtenir les profils précédents.

La figure (2.10) représente le profil de la densité initiale, le profil de la densité calculée par le schéma de Scharfetter et Gummel amélioré d'ordre zéro et le profil de la densité analytique. On remarque que les deux profils de densité calculés se superposent. Le schéma SG0 reproduit de manière correcte toute forme de densité initiale.



Figure 2.10: Profils de la densité initiale et analytique, densité calculée par le schéma SG0, nt = 200, nx=200, CFL =0.4, êta =0.01, vitesse de dérive négative

#### 2.5.5.3 Présentation du troisième test numérique visuel

Pour le troisième test numérique, on a pris la forme de la densité initiale donnée par la formule (2.48), la forme de la densité analytique donnée par l'expression (2.47). Le nombre de pas en position est 200, le nombre de pas en temps est 400, le CFL vaut 0.4.

Pour la figure (2.11), la valeur du coefficient êta est de 0.005. Le profil de la densité calculé par le schéma SG0 présente des oscillations. C'est donc une valeur à ne pas utiliser. Kulikovsky [Ku-1] a bien spécifié dans son article que la valeur du coefficient êta devait appartenir a l'intervalle [0.01, 0.04].

On voit de part la figure (2.12) que pour la valeur du coefficient êta = 0.01, le profil de la densité calculé par le schéma SGO est le plus proche du profil donné par la solution analytique, que le profil calculé s'éloigne du profil issu de la solution analytique au fur et à mesure que êta prend des valeurs de plus en plus grandes mais appartenant à l'intervalle imposé par Kulikovsky [Ku-1].

Les tests auxquels nous avons procédés sont des tests visuels.



*Figure 2.11: Profils de la densité initiale, analytique, densité calculée par le schéma SG0, nt = 400, nx =200, CFL =0.4, êta = 0.005, vitesse de dérive négative* 



Figure 2.12: Profils de la densité initiale, analytique, densité calculée par le schéma SG0, nt = 400, nx =200, CFL =0.4, êta = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, vitesse de dérive négative

#### 2.5.5.4 Présentation du test qualitatif

On considère le cas d'une vitesse de dérive négative. Le schéma Upwind donne une diffusion numérique qui diminue avec le nombre de points utilisés. Le profil issu du schéma SG0 se superpose presque au profil de la solution analytique.

Dans ce qui suit, on calcule l'Erreur Relative Moyenne (ERM) pour les deux schémas:

$$ERM = \frac{1}{nx} \sum_{i=1}^{nx} \left| \frac{n_i^{\text{calculée}} - n_i^{\text{analytique}}}{n_i^{\text{analytique}}} \right|$$
(2.50)

D' après le tableau (2.1), on remarque que l'ERM pour le schéma SG0 est la plus faible pour le coefficient êta = 0.01 et qu'elle est inversement proportionnelle au nombre de points suivant la position (pour nx =200, l'ERM vaut 1.72, pour nx = 400, l'ERM est de 0.45688). Le CFL est de 0.4 (appartient à l'intervalle imposé par un schéma explicite). Pour nx = 200, l'ERM vaut 34616 et pour nx = 400, l'ERM vaut 5.3532 pour le schéma Upwind. On remarque aussi que l'ERM prend la plus petite valeur pour une valeur du coefficient êta =0.01 (1.72 pour nx = 200 et 0.45688 pour nx = 400).

On a aussi représenté les résultats sous forme d'histogrammes qui indiquent les mêmes conclusions.

Schéma utilisé	Erreur moyenne relative ERM ; nx = 200	Erreur moyenne relative ; nx = 400
SG0, êta = 0.01	1.72	0.45688
SG0, êta = 0.02	13.581	1.3618
SG0, êta = 0.03	60.806	2.9349
SG0, êta = 0.04	195.99	5.5108
Upwind	34616	5.3532

Tableau 2.1 : Erreur relative	moyenne pour $nt = 400$ ,	CFL = 0.4,	vitesse de	dérive
	négative			

![](_page_64_Figure_0.jpeg)

Figure 2.13 : Histogramme de l'ERM pour les schémas Upwind et SG0, nx = 400, CFL =0.4, vitesse de dérive négative

![](_page_64_Figure_2.jpeg)

Figure 2.14 : Histogramme de l'ERM pour le schéma SG0, nx = 400, CFL =0.4, vitesse de dérive négative

Schéma utilisé	Erreur moyenne relative ERM ; nx = 200	Erreur moyenne relative ; nx = 400
SG0, êta = 0.01	20.932	0.67334
SG0, êta = 0.02	516.94	4.4894
SG0, êta = 0.03	3636.2	17.887
SG0, êta = 0.04	13240	55.058
Upwind	0.1075 10 <sup>7</sup>	61.715

Tableau 2.2 : Erreur relative moyenne pour nt = 400, CFL = 0.7, vitesse de dérive négative

On voit d'après le tableau (2.2) que pour un CFL de 0.7 (supérieur à 0.5), l'erreur relative moyenne est plus grande que celle donnée par un CFL de 0.4 et pour le nombre de points suivant la position égal à 200 et à 400.

En conclusion de ces tests visuels et qualitatifs, le schéma Upwind est diffusif, le schéma Lax Wendroff donne des oscillations, le schéma Quickest et le schéma SG0 donnent des profils de densité qui se superposent pour Quickest et presque pour SG0 à la solution analytique, le schéma SG0 fonctionne aussi bien pour une vitesse de dérive négative (déplacement des électrons) que pour une vitesse de dérive positive (déplacement des ions positifs), et comme on n'a pas encore la formule qui permet le calcul du flux moyen pour une vitesse positive dans le cas du schéma Quickest, on a donc opté pour le schéma amélioré d'ordre zéro SG0 de Kulikovsky pour simuler l'équation de continuité en une dimension dans le modèle 1.5 D du chapitre IV.

## Bibliographie chapitre II

[Ai]	Aissaoui A.," Modélisation des décharges luminescentes radio fréquence",
	Thèse de Magister de la Faculté de Génie Electrique, Département
	d'Electrotechnique, Université des Sciences et de la Technologie Mohammed
	Boudiaf Oran, Juin 2000.
[Be]	Bessières D., "Modélisation des décharges électriques filamentaires", Thèse de
	doctorat en électrotechnique, Université de Pau et des Pays de l'Adour,
	Décembre 2006.
[Bo]	Book D. L, "Finite differences techniques for vectorized fluid dynamics
	calculations", Springer Series in Computational Physics Springer-Verlag, New
	York, 1981.
[Du]	Ducasse O., " Modélisation électrodynamique d'un réacteur plasma hors
	équilibre de dépollution des gaz", thèse de doctorat de l'Université Paul
	Sabatier Toulouse III, 2006.
[Ha-1]	Hagelaar G. J. M et Pitchford L. C., Plasma Sources Sci. Technol., 14, 722,
	2005.
[Ha-2]	Hamani A.," Modélisation multidimensionnelle des décharges froides haute
	pression pour l'application aux dispositifs de dépollution des gaz
	d'échappement", thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse,
	10 Juillet 1996.
[Fl-1]	Flitti A., Hennad A. et Hamid A., "Résolution numérique des équations de
	dérive-diffusion pour les décharges électriques haute pression", Congrès
	Général de la Société Française de Physique, Grenoble, 9-13 Juillet 2007.
[Fl-2]	Flitti A., Hennad A. et Benaired N., "Résolution numérique de l'équation de
	dérive-diffusion : traitement d'un problème non-linéaire", Revue
	Internationale des Technologies Avancées, CDTA, 19, page 14-24, 2007.
[Ku-1]	Kulikovsky A., "A More Accurate Scharfetter-Gummel Algorithm of
	Electron Transport for Semiconductor and Gas Discharge Simulation",
	journal of Computational Physics 119, page 149-155, 1995.
[Ku-2]	Kunhardt E. E., Wu C., "Towards a more accurate flux corrected transport
	algorithm", J. Comp. Phys. Vol. 68, page 127-150, 1987.
[Le]	Leonard B.P., "The ultimate conservative difference scheme applied to
	unsteady one dimensional advection", Computer Methods in Applied
	Mechanics and Engineering, Vol 88, page 17-74, 1991.
[Po]	Potin J., "Modélisation numérique d'une décharge filamentaire contrôlée par
	barrière diélectrique dans l'azote à la pression atmosphérique ", Thèse de
	doctorat en physique et ingénierie des plasmas de décharge, Université Paul
	Sabatier de Toulouse, Septembre 2001.
[Sc]	Scharfetter D., Gummel H., IEEE Trans. Electron Devices, 16, 1, 64-77, 1969.
[Vi]	Vitello P. A., Penetrante B. M. et Bardsley J.N., " Simulation of negative
	streamer dynamics in nitrogen", Phys. Rev. E., vol. 49, n°6, page 5574-5800,
	1994.
[Wu]	Wu C., Kunhardt E. E., "Formation and propagation of streamer in $N_2$ -SF <sub>6</sub>
	mixtures", Phys. Rev. A, vol. 37, n°11, page 4396-4406, 1988.

# CHAPITRE III : EQUATION DE POISSON

## Sommaire chapitre III

3.1	Introduction	67
3.2	Equation de Poisson	67
3.3	Méthode des disques	68
3.4	Test numérique	71
	Bibliographie chapitre III	74

#### **3.1 Introduction**

Ce chapitre est consacré à la description de la méthode numérique nécessaire à la résolution de l'équation de Poisson qui va permettre la modélisation de la décharge filamentaire. En effet, toute modélisation repose sur le ou les algorithmes utilisés qui doivent répondre aux contraintes physiques du phénomène et aux exigences de temps de calcul.

L'algorithme pour calculer le champ doit répondre à deux exigences. Il faut savoir que d'une part, le fait de prendre en compte l'effet de charge d'espace implique le calcul du champ électrique à chaque pas de temps.

D'autre part, le calcul du champ doit être aussi précis que possible puisque chaque écart par rapport à la valeur réelle du champ se répercute d'une façon doublement exponentielle sur l'évolution des espèces.

Et puisque la vitesse de calcul et la précision d'une méthode sont deux contraintes opposées, il faut trouver l'algorithme qui par rapport au problème posé, réalise un bon compromis entre les deux exigences (rapidité et précision).

Comme la décharge filamentaire que l'on va simuler est sujet à une expansion radiale, on a opté pour la méthode des disques développée par Davies [Da-1]. Une résolution classique de l'équation de Poisson ne peut être utilisée : pour pouvoir l'utiliser, il faut que le rayon de la décharge soit grand ou infini devant la distance inter-électrodes.

#### 3.2 Equation de Poisson

La mise en équation d'un problème lié aux décharges électriques serait totalement incomplète si elle ne prenait pas en compte le calcul du champ électrique. Ce dernier apparaît comme une grandeur qui gouverne entièrement l'évolution des densités des espèces chargées à travers l'expression de la vitesse de dérive et du terme source [Ha].

Le modèle unidimensionnel, suivant la direction de propagation des densités, ne prend en compte que la composante prépondérante du champ électrique suivant cette direction. Le champ électrique total est la résultante du champ géométrique appliqué  $\vec{E}_G$  et du champ de charge d'espace  $\vec{E}_C$ .

Le choix d'un modèle unidimensionnel pour simuler une décharge électrique pose tout particulièrement le problème de la représentativité du champ électrique de charge d'espace calculé par l'équation de Poisson qui s'écrit sous la forme suivante:

$$\frac{\partial E}{\partial x}(x,t) = -\frac{\rho(x,t)}{\varepsilon_0}$$
(4.1)

Avec  $\rho(x,t)$  la charge d'espace nette au point d'abscisse x et à l'instant t.

L'équation de Poisson peut être écrite de la façon suivante :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial x^2}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\mathbf{q}_e}{\varepsilon_0} \Big[ \mathbf{n}_i(\mathbf{x}, t) - \mathbf{n}_e(\mathbf{x}, t) \Big]$$
(4.2)

 $q_e$  charge élémentaire d'un électron,  $\varepsilon_0$  représente la permittivité du vide.  $n_e$  et  $n_i$  représentent respectivement la densité des électrons et des ions.

Discrétisé, le membre de l'équation de Poisson prend la forme :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{V}}{\partial \mathbf{x}^2} = \frac{\mathbf{V}_{i+1} - 2\mathbf{V}_i + \mathbf{V}_{i-1}}{d\mathbf{x}^2}$$
(4.3)

D'après [Da-1], le choix du calcul du champ dépend du rapport rayon de la décharge à la distance inter électrodes. Dans le cas ou ce rapport est inférieur à un, c'est-à-dire dans le cas d'une décharge concentrée de type streamer, la résolution de l'équation de Poisson avec l'hypothèse de symétrie radiale est mal adaptée. Dans ce cas, nous utilisons la méthode des disques développée par [Da-1] pour le calcul du champ de charge d'espace. La décharge est confinée dans un cylindre de rayon 1 fini (connu à priori à partir des conditions expérimentales) et compris entre les deux électrodes.

#### 3.3 Méthodes des disques

La méthode utilisée dans la section suivante peut être résumée par les points suivants :

- Le problème possède la symétrie cylindrique ;
- Le champ électrique axial est calculé par la méthode des disques et est supposé indépendant de la distance radiale. Le champ électrique radial n'est pas considéré.

La méthode des disques introduite par Davies et all [Da-1] et utilisée par la suite par de nombreux auteurs ([Ba], [Da-2,3], [Kl-1,2], [Yo]) consiste à supposer que la charge d'espace est distribuée de façon uniforme radialement (avec un rayon éventuellement variable) [Bo]) et à calculer, en chaque point de l'axe de symétrie de la décharge, le champ électrique résultant, somme des champs dus à chaque disque élémentaire (et à ses images au-delà des électrodes) ; l'avantage de cette méthode réside dans les deux points suivants :

- Elle permet un calcul rapide (point important car le champ électrique doit être recalculé souvent) avec un degré très correct du champ électrique axial ;
- L'approximation qu'elle implique est bien meilleure que l'approximation unidimensionnelle.

![](_page_70_Figure_0.jpeg)

*Figure 4.1 : Cylindre de rayon fini dans lequel la décharge se propage utilisé dans la méthode des disques* 

Le canal de la décharge est représenté par un cylindre de rayon l constitué par un ensemble de disques d'épaisseur dr'. La distribution des charges à l'intérieur de chaque disque est supposée uniforme et égale à:

$$\rho(r) = q_{e} \left[ n_{i}(r) - n_{e}(r) \right]$$
(4.4)

Le champ de charge d'espace  $E_C(r)$  si on tient compte de toutes les charges présentes dans le cylindre au point P sur l'axe s'obtient par la formule:

$$E_{C}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\epsilon_{0}} \int_{-\mathbf{r}}^{0} \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \left[ -1 - \frac{\mathbf{r}'}{\sqrt{\mathbf{r}'^{2} + l^{2}}} \right] d\mathbf{r}' + \frac{1}{2\epsilon_{0}} \int_{0}^{d-\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \left[ 1 - \frac{\mathbf{r}'}{\sqrt{\mathbf{r}'^{2} + l^{2}}} \right] d\mathbf{r}'$$
(4.5)

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{G}} + \mathbf{E}_{\mathbf{C}} \tag{4.6}$$

 $E_G$  représente le champ géométrique appliqué et E le champ total ou local. d représente la distance inter électrodes.

Les résultats obtenus par Davies [Da-3] et donnés en figure (4.2) montrent effectivement que la méthode des disques permet un calcul de champ ayant une forme et une amplitude capable d'expliquer correctement la propagation rapide de l'onde d'ionisation, ce qui n'est pas le cas de l'équation de Poisson en géométrie 1D.

![](_page_71_Figure_0.jpeg)

Figure 4.2. Calcul du champ électrique donné par Davies

- (*i*) *Distribution électronique typique d'une avalanche ;*
- (*ii*) (*ii*) Densité nette de charge ;
- *(iii) (iii) Champ électrique obtenu à partir de l'équation de Poisson en ID ;*
- (iv) Champ électrique obtenu à partir de la méthode des disques.

Dans l'approximation unidimensionnelle, le champ électrique est constant si la charge d'espace est nulle (voir figure (4.2.iii)).

On voit qu'une telle approximation ne peut rendre compte de la propagation rapide des fronts qui est due en partie dans les décharges filamentaires à l'augmentation du champ au voisinage des fronts, qui est bien prévue par la méthode des disques (voir figure (4.2.vi)).
d ou distance inter électrodes doit être prise en principe suffisamment grande pour tenir compte des charges images ; si ce n'est pas le cas et dans le cas d'électrodes métalliques, on doit aussi introduire aussi dans le calcul du champ, l'influence des charges images. On va considérer dans notre cas les charges images présentes à une distance 3 fois la distance inter électrodes de part et d'autre des électrodes.



Figure 4.2 : Cylindre de rayon fini dans lequel la décharge se propage utilisé dans la méthode des disques avec les charges images de part et d'autre de l'espace inter électrodes

#### 3.4 Test numérique

Afin de valider la méthode des disques, nous allons étudier son comportement dans le cas des situations tests dans lesquelles nous connaissons, au préalable la solution de l'équation de Poisson. Il s'agit de calculer le champ et le potentiel électriques en tout point de l'intervalle inter électrodes, aux bornes duquel nous appliquons une tension constante avec des profils différents de la charge d'espace nette.

Pour ces tests, nous allons prendre:

-Une distance inter électrodes égale à 1(ua).

- Un nombre de points nx égal à 100.

-Une tension constante de 10 (ua) et appliquée au niveau de l'électrode de droite et une charge nulle.

Dans cet exemple, le rayon de la décharge est plus petit que la distance inter électrodes et les charges images sont prises sur trois la distance d de part et d'autre des électrodes.



Figure 4.3 : Champ électrique obtenu à partir d'une densité nulle



Figure 4.4 : Potentiel électrique obtenu à partir d'une densité nulle

Les figures (4.3) et (4.4) représentent les variations du champ et du potentiel électriques en fonction de la position pour un profil de charge d'espace nulle issu de la méthode des disques avec charges images et aussi par la méthode de Thomas. On remarque que les variations du champ et du potentiel par la méthode des disques sont similaires à celles issues de la technique classique de Thomas et les résultats obtenus sont corrects puisque la courbe donnant le champ est une constante négative et le potentiel est représenté par une droite (le potentiel est obtenu en intégrant le champ).

On peut donc utiliser la méthode des disques pour la modélisation de la décharge filamentaire du chapitre IV. Il faut surtout prendre en considération les charges images car le rayon du cylindre que l'on va considérer est de 0.05 centimètre et la distance inter électrodes est de 1 centimètre.

## Bibliographie chapitre III

[Ba]	Bayle P., Cornebois B., Phys. Rev. A31, page 1, 1985.
[Bo]	Bœuf J.P.," Modélisation de la cinétique électronique dans un gaz faiblement
	ionisé", thèse de Doctorat de l'Université Paris Sud, Centre d'Orsay, 21 Juin
	1985.
[Da-1]	Davies A. J., Evans C. J. et Llewellyn Jones F., " Electrical discharges in
	gases: the spatio-temporal growth of ionization in field distorted by space
	charge", Proc. Roy. Soc, 281, page 164-183, 1983.
[Da-2]	Davies A. J., Evans C. S., and Woodison P. M., Proc. IEE, 122, 7, page 765,
	1965.
[Da-3]	Davies A. J., Davies C. S., Evans C. J., "Computer simulation of rapidly
	developing gaseous discharges", Proc. IEE., 118, page 816-823, 1971.
[Fl-1]	Flitti A., Hennad A. et Benaired N., "Résolution numérique de l'équation de
	dérive-diffusion : traitement d'un problème non-linéaire", Revue de la
	Technologie avancée CDTA, 19, page 14-24, 2007.
[Ha]	Hamani A.," Modélisation multidimensionnelle des décharges froides haute
	pression pour l'application aux dispositifs de dépollution des gaz
	d'échappement", thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse,
	10 Juillet 1996.
[Kl-1]	Kline L. E., J. Appl. Phys. 45, page 2046-2054, 1974.
[K1-2]	Kline L. E., J. Appl. Phys. 46, page 5, 1975.
[Yo]	Yoshida K., Tagashira H., "Computer simulation of a nitrogen discharge
	considering the radial electron drift", J. Phys. D. Appl. Phys, vol 9, page 485-
	505, 1976.

# **CHAPITRE IV : MODELE 1.5 D**

## Sommaire chapitre IV :

4.1	Introduction	76
4.2	Modèle hydrodynamique utilisé ; organigramme général du code de calcul	76
4.3	Exemple de propagation d'une décharge filamentaire dans l'azote	78
4.3.1	Modèle mathématique	78
4.3.2	Paramètres de transport et forme des gaussiennes initiales	79
4.3.3	Configuration géométrique utilisée et conditions aux limites	80
4.3.4	Calcul du champ électrique en une dimension	80
4.3.4.1	Champ géométrique	80
4.3.4.2	Champ de charge d'espace	81
4.3.5	Traitement du terme source	81
4.3.6	Résultats et discussions	81
4.4	Etude paramétrique	86
4.4.1	Influence de la pression	86
4.4.2	Influence de la tension	91
4.4.3	Influence de la hauteur de la gaussienne	91
4.4.4	Influence du fond de préionisation	94
4.4.5	Influence du coefficient êta	94

Bibliographie chapitre IV 100

#### **4.1 Introduction**

La modélisation numérique des décharges filamentaires fait l'objet depuis de nombreuses années d'un grand nombre de travaux [Fl-1], [Mo-1], [Mo-2], [Po-1], [Po-2]. Les premiers travaux effectués dans les années 70-80 étaient basés sur une approche simplifiée dans laquelle la modélisation du transport des particules chargées s'appuyait sur une approche mono dimensionnelle, le calcul du champ électrique étant effectué en deux dimensions (au moyen de la méthode des disques [Da-1]). Cette approche est dite modèle 1.5 D (équation de continuité en 1D et équation de Poisson en 2D).

# 4.2 Modèle hydrodynamique utilisé ; organigramme général du code de calcul

L'approche macroscopique est celle que l'on va utiliser pour effectuer la modélisation de la décharge haute pression ou décharge filamentaire. Elle conduit, moyennant des hypothèses de fermeture spécifique du système d'équations pour les électrons et les ions positifs à une formulation caractéristique dans laquelle figurent des grandeurs directement mesurables telle que la vitesse de dérive des particules et leurs coefficients de diffusion.

La fermeture du système consiste à supposer que l'énergie due au champ électrique gagnée par les particules chargées à un temps donné et à une position donnée est exactement compensée par la perte d'énergie due aux collisions aux mêmes instants. Les particules chargées doivent avoir effectuer suffisamment de collisions pour supposer en première approximation qu'elles sont en équilibre avec le champ électrique réduit local. Les fréquences de collision, d'ionisation, les mobilités, coefficients de diffusion dépendent du champ électrique local [FI-1]. Le modèle hydrodynamique que l'on va utiliser est basé sur le couplage de façon auto cohérente des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann à l'équation de Poisson. Il est nécessaire de connaître les coefficients de transport et de réaction qui prennent en compte les phénomènes de non équilibre causés par les variations spatiales ou temporelles rapides du champ électrique et par des processus collisionnels liés à la pression élevée du gaz [Be-1].

La figure (4.1) représente la structure générale de l'organigramme. A l'entrée de l'organigramme, les conditions initiales de la décharge sont connues, telles que la tension appliquée, la distance inter électrodes, la température et la pression du gaz, la forme initiale des densités électronique et ionique. On calcule le champ de charge d'espace par la résolution de l'équation de Poisson.

On utilise pour cela la méthode des disques. On résout ensuite les équations de transport pour obtenir les densités électronique et ionique. On utilise le schéma numérique de Scharfetter et Gummel d'ordre zéro SGO (et le schéma Upwind pour voir qu'il est diffusif). On connait les densités électroniques et ioniques, on recalcule le champ résultant de la somme du champ de charge d'espace et du champ géométrique, on relance à nouveau le calcul des densités et on s'arrête lorsque le temps maximal imposé est atteint. A la sortie de l'organigramme, on obtient les résultats qui décrivent la décharge (densité électronique, ionique, champ électrique, densité de charge d'espace).



Figure (4.1) : Organigramme utilisé pour les calculs

#### 4.3 Exemple de propagation d'une décharge filamentaire dans l'azote

#### 4.3.1 Modèle mathématique

Dans cette partie, les méthodes numériques sont appliquées à la propagation des décharges filamentaires sous polarité positive.

L'étude s'inspire de la modélisation de Dhali et Williams [Dh 1,2]. Les phénomènes sont initiés dans l'azote à pression atmosphérique.

Le système dynamique se réduit à trois équations :

-Deux équations de continuité à une dimension qui prend la même forme pour les électrons et les ions positifs :

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{e}}{\partial t} + \frac{\partial \left(\mathbf{n}_{e} \mathbf{w}_{e}\right)}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{D}_{e} \left(\frac{\partial \mathbf{n}_{e}}{\partial \mathbf{x}}\right)\right) = \mathbf{S}_{e}$$

$$(4.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{n}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial (\mathbf{n}_{i} \mathbf{w}_{i})}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \mathbf{D}_{i} \left( \frac{\partial \mathbf{n}_{i}}{\partial x} \right) \right) = \mathbf{S}_{i}$$
(4.2)

Les deux équations ci-dessus sont dites équations de dérive-diffusion. Elles sont constituées d'un terme de dérive (du premier ordre par rapport à la dérivée spatiale) et d'un terme de diffusion (du second ordre par rapport à la dérivée spatiale).

-Ces deux équations vont être couplées à l'équation de Poisson:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{x}} = -\frac{|\mathbf{q}_e|}{\varepsilon_0} (\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_e)$$
(4.3)

 $-S_e$  et  $S_i$  sont respectivement les termes sources électronique et ionique des équations (4.1) et (4.2);

$$\mathbf{S}_{\mathbf{e}} = \mathbf{S}_{\mathbf{i}} = \alpha \, \mathbf{n}_{\mathbf{e}} \left| \mathbf{w}_{\mathbf{e}} \right| \tag{4.4}$$

 $-\alpha$  est le coefficient d'ionisation ;

- n<sub>e</sub> et n<sub>i</sub> sont respectivement les densités des électrons et des ions positifs ;

 $-w_e$ ,  $D_e$ ,  $w_i$  et  $D_i$  sont respectivement les vitesses de dérive et les coefficients de diffusion électronique et ionique ;

 $-\varepsilon_0$  représente la constante diélectrique ou permittivité du vide ;

-qe est la charge d'un électron.

Le flux dans les équations (4.1) et (4.2) est calculé par les schémas de Scharfetter et Gummel d'ordre zéro et Upwind. L'équation de Poisson est résolue en utilisant la méthode des disques avec charges images.

#### 4.3.2 Paramètres de transport et forme des gaussiennes initiales

Mobilité des électrons	$\mu_e = 2.9 \ 10^5 / P  (cm^2 \ V^{-1} s^{-1})$
Mobilité des ions	$\mu_{\rm i} = 2.6 \ 10^5 / \ {\rm P} \qquad ({\rm cm}^2 \ {\rm V}^{-1} {\rm s}^{-1})$
Coefficient de diffusion axial pour les électrons	$D_{a-e} = 1800$ (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
Coefficient de diffusion axial pour les ions	$D_{a-i} = 180$ (cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
Coefficient d'ionisation	$\alpha = N \ 1.61 \ 10^{-16} \exp(-735/E/N)$ (cm <sup>-1</sup> )

Les différents paramètres de transport sont pris de Dhali et Williams [Dh 1,2] :

<i>Tableau</i> (4.1) : <i>Parametres ae transport utilise</i>	u (4.1) : Paramètres de transport	utilisés
---------------------------------------------------------------	-----------------------------------	----------

\*\* E est le champ électrique local (somme du champ géométrique et champ de charge d'espace) et N la densité du gaz. P est la pression atmosphérique.

Par convention, dans l'ensemble du travail effectué, la cathode est placée à gauche de l'intervalle.

La modélisation du streamer positif est ensuite initiée en plaçant un profil de charges gaussien identique aussi bien pour les électrons que pour les ions positifs centré sur l'anode et de la forme :

$$n_{e}(x,t=0) = n_{i}(x,t=0) = n_{préionisation} + n_{0} \exp\left[-\left(\frac{x-x_{0}}{\sigma}\right)^{2}\right]$$

$$n_{préionisation} = 10^{8} \text{ cm}^{-3}, \ n_{0} = 10^{14} \text{ cm}^{-3}, \ x_{0} = 1 \text{ cm},$$
(4.5)

 $\sigma = 0.025 \text{ cm}$ 

La valeur de l'amplitude  $10^{14}$  cm<sup>-3</sup> permet la propagation immédiate du streamer et évite le traitement de la phase de croissance de l'avalanche électronique initiale. Les effets secondaires sont pris en compte à travers la présence du fond continu de gaz ionisé ( $10^8$  cm<sup>-3</sup>) globalement neutre. Cette répartition de charges ne modifie pas le champ électrique initial et constitue une réserve d'électrons germes nécessaire à la propagation de la décharge positive. Elle permet ainsi d'éviter un lourd calcul de transfert radiatif [Be-2].

Il faut noter que si l'intervalle est initialement privé d'électrons germes, aucun schéma numérique n'entraine le départ d'un streamer à l'anode dans les conditions fixées.

#### 4.3.3 Configuration géométrique utilisée et conditions aux limites

La décharge a lieu dans le gaz azote à pression atmosphérique en champ inhomogène. L'anode pointe de rayon de courbure R 0.324 micromètres est placée à 1 centimètre de l'électrode plane. Le potentiel appliqué est 13 kilovolts. La décharge est supposée confinée dans un cylindre de rayon 0.05 centimètres. La valeur de ce rayon est fixée de manière à obtenir les valeurs de champ électrique en tête de streamer 150 kilovolts/ centimètre proches de celles données par Dhali et Williams [Dh 1,2] dans leur simulation bidimensionnelle.

Les conditions aux limites imposent un gradient nul des densités électronique et ionique aux électrodes :

$$\frac{\partial n_{e}}{\partial x} = \frac{\partial n_{i}}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = 0 \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial n_{e}}{\partial x} = \frac{\partial n_{i}}{\partial x} = 0 \quad \text{pour } x = d \text{ (d distance inter électrodes)}$$
(4.7)

Concernant la propagation du streamer positif, la discrétisation de l'intervalle est choisie de telle façon qu'il y a une définition suffisante de la densité nette de charge.

Cette grandeur peut être considérée d'un ordre inférieur aux densités des espèces, et donc plus sensible à la discrétisation. Si le nombre total de cellules dans l'intervalle est trop faible, la densité de charge d'espace n'est pas décrite de manière correcte et les profils de champ correspondants manquent de précision [Be-2]. Dans notre cas, la discrétisation de l'intervalle inter électrodes comprend 1500 mailles. La base du code de calcul est commune pour les deux schémas numériques SG0 et Upwind, seul le traitement du transport des particules diffère. Pour le schéma SG0, la valeur du coefficient êta est prise égale à 0.01.

#### 4.3.4 Calcul du champ électrique

Le champ électrique est la somme du champ géométrique dit aussi Laplacien  $E_G$  et du champ de charge d'espace  $E_C$ .

#### 4.3.4.1 Champ géométrique

En géométrie pointe- plan, dans le cas où la cathode est une pointe de rayon de courbure R, le champ Laplacien sur l'axe est déterminé par l'approximation hyperboloïde classique [Du]:

$$E_{G}(x) = \frac{2V}{RLn\left(\frac{4d}{R}\right)} \frac{1}{1 - \frac{x}{d}\left(1 - \frac{2d}{R}\right) - \left(\frac{x}{d}\right)^{2}\frac{d}{R}}$$
(4.8)

Avec x = 0 à la cathode et x = d à l'anode.

#### 4.3.4.2 Champ de charge d'espace

Le choix d'un modèle monodimensionnel pour simuler une décharge filamentaire pose particulièrement le problème de la représentativité du champ électrique de charge d'espace.

Dans ce cas, et comme indiqué au chapitre III, pour essayer de reproduire au mieux les conditions réelles, Davies et all [Da 2,3] ont développé une technique de résolution originale connue sous le nom de méthode des disques.

On a comme eux confiné la décharge dans un cylindre de rayon r égal à 0.05 centimètres donc fini et constitué par un ensemble de disques. La répartition des charges à l'intérieur de chaque disque est considérée comme uniforme.

Le champ électrique total ne dépend pas uniquement de la contribution de chaque disque chargé de l'espace inter électrodes mais également de la double infinité de disques images de part et d'autre des électrodes métalliques. En pratique, une bonne approximation est établie en ne considérant l'influence que sur deux ou trois longueurs d de part et d'autre de chacune des électrodes (on a pris 3 d dans le code principal).

#### 4.3.5 Traitement du terme source

Les équations (4.1) et (4.2) contiennent un terme source qu'il faut résoudre. Les coefficients du terme source (voir équation (4.4)) comme les paramètres de transport ne sont pas directement des fonctions de la position et du temps mais du champ électrique.

La difficulté intervenant dans cette équation est que les valeurs du champ électrique sont connues aux bords et non au milieu des mailles. La solution donc adoptée est d'interpoler les valeurs du champ électrique au centre des mailles pour obtenir une meilleure détermination des coefficients des divers processus de création et de disparition des particules dans l'intervalle. Le traitement du terme source est effectué avec une méthode de Runge-Kutta d'ordre deux.

#### 4.3.6 Résultats et discussions

Les figures (4.2) et (4.6) représentent la distribution spatiale de la densité électronique et ionique à divers instants (0.1, 5, 10, 15, 20, 25 et 30 ns) de la propagation du streamer positif dans l'intervalle. On a utilisé deux schémas numériques pour la résolution de l'équation de continuité en une dimension soit le schéma SG0 et le schéma Upwind.

On voit que l'onde d'ionisation se propage avec une vitesse quasi constante, les valeurs de la densité électronique et ionique n'excèdent pas  $10^{14}$  particules /cm<sup>3</sup>. Si on compare nos résultats avec ceux donnés dans la thèse de Bessières [Be-2], on voit qu'à 30 ns, le profil issu du schéma le plus diffusif soit Upwind a déjà traversé l'intervalle. En terme de vitesse de propagation, le profil donné par le schéma Upwind est le plus rapide, il est suivi par le profil issu du schéma SG0 et le plus lent est celui donné par le schéma Quickest associé au limiteur Ultimate 3 [Be-2]. Du point de vue allure, tous les profils sont similaires et cela pour les trois schémas.



Figure 4.2 : Densité électronique aux instants 0.1, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite, trait plein par le schéma SG0, trait discontinu par le schéma Upwind



Figure 4.3 : Densité électronique aux instants 0, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite issue du schéma Quickest associé au limiteur Ultimate 3, thèse de Bessières [Be-2]



Figure 4.4 : Champ électrique aux instants 0.1, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite, trait plein par le schéma SG0, trait discontinu par le schéma Upwind



Figure 4.5 : Champ électrique aux instants 0, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite issue du schéma Quickest associé au limiteur Ultimate 3 , thèse de Bessières [Be-2]



Figure 4.6 : Densité ionique aux instants 0.1, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite, trait plein par le schéma SG0, en trait discontinu par le schéma Upwind



Figure 4.7 : Densité ionique aux instants 0, 5, 10, 15, 20,25 et 30 ns à partir de la droite issue du schéma Quickest associé au limiteur Ultimate 3 , thèse de Bessières [Be-2]



*Figure 4.8 : Distribution de la densité spatiale de charge aux instants 5, 15, et 25ns à partir de la droite, trait plein par le schéma SG0, en trait discontinu par le schéma Upwind* 



Figure 4.9 : Distribution de la densité spatiale de charge aux instants 5,15 et 25ns à partir de la droite issue du schéma Quickest associé au limiteur Ultimate 3, thèse de Bessières [Be-2]

Le schéma le plus diffusif est le schéma Upwind puisque à 30 ns, le streamer n'existe plus pour ce schéma.

Dans la figure (4.4), le champ électrique axial à la tête du streamer pour les différents instants de propagation (0.1, 5, 10, 15, 20, 25 et 30 ns) est très important. On a aussi une zone de champ beaucoup plus faible juste à l'arrière de ce front (canal du streamer). Si on compare la valeur du champ électrique issu de notre calcul et celui donné par Bessières [Be-2], l'ordre de grandeur au front d'ionisation est presque le même (130 kilovolts/centimètre).

La figure (4.8) montre la distribution de la densité nette de charge d'espace à 5, 15 et 25 ns de la propagation du streamer positif par les schémas SG0 et Upwind. Les valeurs de la densité nette de charge sont positives et leurs amplitudes sont sensiblement les mêmes ; la vitesse de propagation des fronts simulés dépend de la diffusion numérique du schéma utilisé. L'ordre de propagation des fronts suivant les deux schémas est fixé dès l'initiation du streamer, du schéma le plus diffusif (Upwind) qui est devant au schéma SG0 qui est toujours à l'arrière. De légères oscillations apparaissent dans le canal de décharge simulé par les deux schémas.

Les comparaisons effectuées ci-dessus montrent que les résultats qu'on a obtenus avec les deux schémas numériques SG0 et Upwind (reste diffusif) sont physiquement proches de ceux obtenus par Bessières [Be-2]. Des différences subsistent notamment la vitesse de propagation qui est plus rapide dans notre cas.

L'explication de ces différences est difficile à obtenir car la vitesse de propagation est extrêmement dépendante d'un grand nombre de paramètres. Par exemple la méthode numérique utilisée pour le calcul du terme source, le nombre de points de discrétisation, leur répartition dans l'espace, le pas minimal choisi pour l'évolution temporelle, la méthode numérique utilisée pour la résolution de l'équation de Poisson, peuvent changer les résultats.

#### 4.4 Etude paramétrique

#### 4.4.1 Influence de la pression

Les effets de la pression sont étudiés en ne changeant aucune condition initiale. Seules, les valeurs de la pression changent et sont égales respectivement à 700, 760 et 820 Torrs ce qui correspond à un pas de variation de 60 Torrs.

Les figures (4.10), (4.11), (4.12) et (4.13) représentent respectivement la variation de la densité électronique, ionique, du champ électrique et de la densité nette de charge d'espace pour les différentes valeurs de pression aux instants 5, 15 et 25 ns et pour une tension de 13 kilovolts. On remarque que la propagation du streamer positif est de moins en moins rapide lorsque la pression du milieu augmente.

On peut expliquer ce comportement physique par le fait que les libres parcours moyens et les mobilités des particules chargées sont inversement proportionnels à la pression du gaz. C'està-dire que la probabilité de collision diminue avec l'augmentation de la pression ce qui engendre un ralentissement de la propagation normale du streamer positif de l'anode vers la cathode. Cependant, l'allure des courbes et les valeurs des densités électroniques, ioniques, des champs électriques et des densités nettes de charge ne changent pas.



Figure 4.10 : Densité électronique aux instants 5, 15 et 25 ns à partir de la droite, en pointillé 860 Torrs, en trait plein 760 Torrs, en trait discontinu 700 Torrs



Figure 4.11 : Densité ionique aux instants 5, 15 et 25 ns à partir de la droite, en pointillé 860 Torrs, en trait plein 760 Torrs, en trait discontinu 700 Torrs



Figure 4.12 : Champ électrique aux instants 5, 15 et 25 ns à partir de la droite, en pointillé 860 Torrs, en trait plein 760 Torrs, en trait discontinu 700 Torrs



Figure 4.13 : Densité nette de charge aux instants 5, 15 et 25 ns à partir de la droite, en pointillé 860 Torrs, en trait plein 760 Torrs, en trait discontinu 700 Torrs



Figure 4.14 : Densité électronique aux instants 5et 10 ns à partir de la droite, en pointillé 10kV, en trait plein 13 kV, en trait discontinu 16 kV



Figure 4.15 : Densité ionique aux instants 5 et 10 ns à partir de la droite, en pointillé 10kV, en trait plein 13 kV, en trait discontinu 16 kV



Figure 4.16 : Champ électrique aux instants 5 et 10 ns à partir de la droite, en pointillé 10kV, en trait plein 13 kV, en trait discontinu 16 kV



Figure 4.17 : Densité nette de charge aux instants 5 et 10 ns à partir de la droite, en pointillé 10kV, en trait plein 13 kV, en trait discontinu 16 kV

On peut conclure que la variation de la pression influe uniquement sur la vitesse de propagation du streamer positif. L'amplitude des profils de toutes les caractéristiques ne change pas.

#### 4.4.2 Influence de la tension

Dans cette partie du mémoire, on a étudié les effets de la tension appliquée en fixant toutes les autres conditions initiales. Les valeurs de la tension appliquée sont respectivement 10, 13 et 16 kilovolts. Les figures (4.14) et (4.15) représentent respectivement la variation de la densité électronique et de la densité ionique. Les figures (4.16) et (4.17) représentent respectivement celles du champ électrique et de la densité nette de charge pour les différentes valeurs de la tension électrique aux instants 5 et 10 ns.

On remarque que la vitesse de propagation augmente avec la valeur de la tension appliquée. La valeur maximale de la densité électronique et ionique est plus grande pour 16 kilovolts que pour 13 kilovolts et 10 kilovolts (elle croit avec la tension appliquée). Le champ électrique au niveau du front de l'onde d'ionisation vaut 80 kilovolts (pour une tension appliquée de 10 kilovolts), ensuite il prend la valeur 120 kilovolts (pour une tension appliquée de 13 kilovolts) et 140 kilovolts (pour une tension appliquée de 16 kilovolts).

Le champ électrique local augmente avec la valeur de la tension appliquée. Il en est de même de la densité nette de charge.

Les variations de la densité électronique (et ionique) et du champ électrique sont à prévoir ; on a une présence de probabilité de collisions élastique et inélastique importante dans l'espace inter électrodes. Cette probabilité est très favorable pour une évolution rapide de la décharge considérée.

Une variation de tension influe d'une part sur la vitesse de propagation du streamer et d'autre part sur les valeurs des densités électroniques et ioniques, du champ électrique et de la densité nette de charge au niveau du front d'ionisation.

#### 4.4.3 Influence de la hauteur de la gaussienne

La troisième étude paramétrique consiste à donner à la hauteur de la gaussienne aussi bien électronique qu'ionique différentes hauteurs  $(10^{12} \text{ cm}^{-3}, 10^{13} \text{ cm}^{-3}, 10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ et } 10^{15} \text{ cm}^{-3})$ . Toutes les autres conditions initiales sont maintenues fixées.

La figure (4.18) représente les variations de la densité électronique pour les différentes valeurs de la hauteur de la gaussienne et cela aux instants 10et 20 ns.

La figure (4.19) représente les variations de la densité ionique, les figures (4.20) et (4.21) représentent respectivement les variations du champ électrique et de la densité nette de charge.

Les amplitudes de tous les profils restent identiques à ceux trouvés quand on a fait varier la pression, seule la vitesse de propagation du streamer positif augmente avec l'augmentation de la hauteur maximale de la gaussienne.



Figure 4.18: Densité électronique aux instants 10 et 20ns à partir de la droite, en pointillé hauteur 10<sup>13</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu et pointillé 10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>



Figure 4.19: Densité ionique aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé hauteur 10<sup>13</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu et pointillé 10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en discontinu 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>



Figure 4.20: Champ électrique aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé hauteur 10<sup>13</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu et pointillé 10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en discontinu 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>



Figure 4.21: Densité de charge nette aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé hauteur 10<sup>13</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu et pointillé 10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>, en discontinu 10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>

#### 4.4.4 Influence du fond de préionisation

La quatrième étude paramétrique consiste à faire varier le fond de préionisation en lui donnant les valeurs  $10^7$  cm<sup>-3</sup>,  $10^8$  cm<sup>-3</sup> et  $10^9$  cm<sup>-3</sup>. Comme pour toutes les autres études paramétriques, tout le reste des conditions initiales est maintenu fixé ; on ne fait varier qu'un seul paramètre à la fois.

Les courbes (4.22), (4.23), (4.24) et (4.25) représentent respectivement la densité électronique, ionique, le champ électrique et la densité nette de charge d'espace.

Si l'on observe les courbes (4.22) et (4.23), on voit que les différents fonds de préionisation sont bien apparents, la vitesse de propagation de l'onde d'ionisation augmente avec l'augmentation de la valeur du font de préionisation, et cela est normal car le font de préionisation constitue une réserve d'électrons germes nécessaire à la propagation de la décharge positive, plus le fond de préionisation est important, plus les collisions seront importantes et donc la vitesse de propagation sera plus élevée.

Pour le champ électrique suivant l'axe de propagation (voir figure (4.24)) et la densité nette de charge (voir figure (4.25)), les amplitudes des profils diminuent avec l'augmentation de la valeur du font de préionisation.

#### 4.4.5 Influence de la valeur du coefficient êta

Comme dernière étude paramétrique, on a fait varier la valeur du coefficient êta (le facteur d'interpolation  $\eta$  doit être compris entre 0.01 et 0.04 comme indiqué par Kulikovsky [Ku-2]).

On lui a donné les valeurs 0.01, 0.02, et 0.03.

Tous les profils (densité électronique (figure (4.26)), densité ionique (figure (4.27)), champ électrique axial (figure (4.28)), densité nette de charge d'espace (figure (4.29)), sont presque confondus pour les deux instants de calcul (10 et 20 ns) et les amplitudes des différentes caractéristiques ne changent aucunement.

Le coefficient d'interpolation êta n'a aucune influence sur la vitesse de propagation et sur la valeur des amplitudes des différents profils.



*Figure 4.22: Densité électronique aux instants 10 et 20ns à partir de la droite, en pointillé fond de préionisation 10<sup>7</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein 10<sup>8</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu 10<sup>9</sup> cm<sup>-3</sup>* 



Figure 4.23: Densité ionique aux instants 10 et 20ns à partir de la droite, en pointillé fond de préionisation 10<sup>7</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait plein 10<sup>8</sup> cm<sup>-3</sup>, en trait discontinu 10<sup>9</sup> cm<sup>-3</sup>



*Figure 4.24: Champ électrique aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé fond de préionisation 10<sup>7</sup> cm<sup>-3</sup> en trait plein 10<sup>8</sup> cm<sup>-3</sup>, en discontinu 10<sup>9</sup> cm<sup>-3</sup>* 



Figure 4.25: Densité nette de charge aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé fond de préionisation  $10^7$  cm<sup>-3</sup> en trait plein  $10^8$  cm<sup>-3</sup>, en discontinu  $10^9$  cm<sup>-3</sup>



Figure 4.26: Densité électronique aux instants 10 et 20ns à partir de la droite, en pointillé êta 0.01, en trait êta 0.02, en trait discontinu êta 0.03



Figure 4.27: Densité ionique aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé êta 0.01, en trait êta 0.02, en trait discontinu êta 0.03



Figure 4.28: Champ électrique aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé êta 0.01, en trait êta 0.02, en trait discontinu êta 0.03



Figure 4.29: Densité nette de charge aux instants 10 et 20 ns à partir de la droite, en pointillé êta 0.01, en trait êta 0.02, en trait discontinu êta 0.03

Les résultats du paragraphe (4.3.6) montrent que sous polarité positive (streamer positif ou CDS : cathode directed streamer), plus les schémas sont diffusifs, plus la vitesse de propagation des fronts simulés croit et moins les gradients sont conservés (voir figure (4.2), (4.3), (4.4), (4.5), (4.6) et (4.7)).

A partir de l'étude paramétrique, on peut dire qu'une augmentation de la pression, une augmentation de la valeur de la hauteur maximale de la gaussienne ou encore une augmentation de la valeur du fond de préionisation et cela pour un même schéma numérique utilisé influent sur la vitesse de propagation du streamer positif.

Une augmentation de la valeur de la tension appliquée donne une augmentation de la valeur maximale de la densité électronique, ionique, du champ électrique au niveau du front de l'onde et une augmentation de la densité nette de charge.

La variation du coefficient êta n'a aucune influence sur la vitesse de propagation de l'onde d'ionisation et sur les valeurs des amplitudes des profils considérés.

Un code numérique 1.5 D ne peut par nature rendre compte de manière précise de la propagation du streamer, il y a une expansion radiale de la décharge. Il faut pour la suite de ce travail penser à monter un code en deux ou trois dimensions.

Une première approche de modélisation bidimensionnelle de la décharge peut être effectuée en utilisant une méthode de pas fractionnaires (splitting) sur les deux axes de la propagation (radial et axial). Le problème numérique en deux dimensions se réduit à une succession de problèmes en une dimension. On pourra aussi résoudre l'équation de continuité de manière globale soit en deux dimensions et l'équation de Poisson aussi.

## Bibliographie chapitre IV

[Be-1]	Benaired N., "Modélisation des décharges luminescentes radio fréquence",
	Thèse de Magister de la Faculté de Génie Electrique, Département
	d'Electrotechnique, Université des Sciences et de la Technologie Mohammed
	Boudiaf Oran, Juin 2005.
[Be-2]	Bessières D., "Modélisation des décharges électriques filamentaires", Thèse de
	doctorat en électrotechnique, Université de Pau et des Pays de l'Adour,
	Décembre 2006.
[Da-1]	Davies A. J., Davies C. S, Evans C. J," Computer simulation of rapidly
	developing gaseous discharges ", Proc. IEE, vol 118, 6, page 816-821, 1971.
[Da-2]	Davies A. J, Evans C. J., Llewellen Jones F., "Electrical discharges in gases:
	the spatio-temporal growth of ionization in fields distorted by space charge", Proc. Roy. Soc., 281, page 164-183, 1964.
[Da-3]	Davies A. J, Evans C. J, Proc IEEE, 114, page 1547, 1967.
[Dh-1]	Dhali S., Williams P., "Numerical simulation of streamer propagation in nitrogen at atmospheric pressure" Phys Rev A 31 page 1219-1221 1985
	introgen at atmospheric pressure, rings, nev. rin, 51, page 1217 1221, 1765.
[Dh-2]	Dhali S., Williams P., "Two dimensional studies of streamers in gases ", J. Appl. Phys, 62, page 4696-4707, 1987.
[Du]	Durand E., "Electrostatique", Edition Masson, 1966.
[Ha-2]	Hamani A.," Modélisation multidimensionnelle des décharges froides haute
	pression pour l'application aux dispositifs de dépollution des gaz
	d'échappement", thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse,
	10 Juniet 1996.
[Fl-1]	Flitti A., Hennad A. et Benaired N., "Résolution numérique de l'équation de
	dérive-diffusion : traitement d'un problème non-linéaire", Revue de la
	Technologie avancée CDTA, 19, page 14-24, 2007.
[Mo-1]	Morrow R., Lowke J.J., "Space charge effects on drift dominated electron and
	plasma motion", J. Phys. D: Appl. Phys., 14, page 202-234, 1981.
[Mo-2]	Morrow R., Lowke J.J., "Streamer propagation in air", J. Phys. D: Appl. Phys.,
	30, page 614-27, 1997.
[Po-1]	Potamianou S., Loiseau J. F., Spyrou N., " A numerical study of a corona
	glow discharge in medium pressure", XIII Int Conf on gas discharges and their applications, Glasgow, page 352-355, 2000.
1	

[Po-2]	Potamianou S., Loiseau J. F., Spyrou N., "Numerical study of a medium pressure point to plane discharge", J. Phys. D: Appl. Phys., 35, page 1-8, 2001.
[Sc]	Scharfetter D., Gummel H., IEEE Trans. Electron Devices, 16, 1, page 64-77, 1969.

## CONCLUSION GENERALE ; PERSPECTIVES

Ce travail apporte une contribution à une meilleure connaissance de la propagation de la décharge filamentaire dans un gaz faiblement ionisé ; il est basé sur une modélisation macroscopique du mouvement des particules chargées (électrons et ions positifs) sous l'effet d'un champ électrique extérieur et un champ de charge d'espace.

La simulation numérique est un moyen puissant d'investigation des phénomènes physiques parallèle et complémentaire aux approches théoriques et expérimentales car elle permet d'obtenir des informations détaillées sur des systèmes complexes devant lesquels les méthodes de calcul analytiques sont impuissantes et d'accéder à des grandeurs souvent inaccessibles à l'expérience.

La connaissance détaillée des caractéristiques essentielles de la décharge filamentaire permet non seulement une évaluation quantitative précise des grandeurs intéressantes du point de vue des applications mais conduit à une meilleure compréhension des phénomènes étudiés.

On s'est intéressé à la modélisation d'une décharge filamentaire sous polarité positive dans une configuration pointe plan dans le gaz azote à la pression atmosphérique.

On a en premier lieu fait un état de l'art sur les plasmas thermiques et non thermiques, défini les paramètres essentiels des plasmas hors équilibre, énuméré les applications industrielles de ces plasmas et expliqué les différences entre décharge de Townsend et décharge streamer.

On a ensuite défini les trois modèles mathématiques utilisés pour simuler une décharge filamentaire 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 troisième 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.

En effet, toute modélisation repose sur le ou les algorithmes utilisés qui doivent répondre aux contraintes physiques du phénomène et aux exigences de temps de calcul. On a besoin de deux algorithmes complémentaires, l'un pour résoudre les équations de continuité des espèces chargées et l'autre pour calculer le champ électrique par résolution de l'équation de Poisson. La spécifité de la décharge que l'on va étudier (fortes variations de champ et de densité) nécessite un choix de schémas numériques très exigeants du point de vue performance. Pour la résolution des deux équations de continuité, on a choisi le schéma de Scharfetter et Gummel d'ordre zéro établi par Kulikovsky et cela après avoir fait des tests numériques d'abord visuels ensuite qualitatifs.

Au troisième chapitre, on a présenté la méthode des disques qui est utilisée pour la résolution de l'équation de Poisson. Comme les électrodes sont métalliques et que le rayon du cylindre qu'on a choisi est petit par rapport à la distance inter électrodes, on a ajouté les charges images sur trois distances d de part et d'autre de l'espace inter électrodes.

Au quatrième chapitre, on a réalisé le couplage auto cohérent entre les équations de continuité des particules chargées et l'équation de Poisson. On a obtenu les caractéristiques essentielles de la décharge soit la densité électronique, la densité ionique, le champ électrique et la densité nette de charge d'espace. On a aussi fait une étude paramétrique en ne faisant varier qu'une seule condition initiale à la fois (variation de la pression, variation de la tension appliquée, variation de la hauteur de la gaussienne, variation du fond de préionisation et enfin variation du coefficient d'interpolation). On a vu l'effet de ces changements sur la vitesse de propagation de la décharge filamentaire.

Pour les perspectives, il y en a plusieurs : on peut changer le milieu de propagation et prendre l'air par exemple, on peut introduire d'aitres termes sources (photo ionisation, attachement, recombinaison, détachement).

On peut aussi simuler la propagation dans une configuration en deux dimensions et cela pour mieux voir l'expansion radiale de la décharge. Un code numérique 1.5D ne peut pas rendre compte de manière précise de la propagation des streamers. Une telle étude demande une approche en deux ou trois dimensions.