



HAL
open science

Modélisation de l'extinction d'un arc de SF₆ hors d'équilibre thermodynamique local

Jean-Belkheir Belhaouari

► **To cite this version:**

Jean-Belkheir Belhaouari. Modélisation de l'extinction d'un arc de SF₆ hors d'équilibre thermodynamique local. Physique [physics]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 1997. Français. NNT : . tel-00003150v2

HAL Id: tel-00003150

<https://theses.hal.science/tel-00003150v2>

Submitted on 23 Jul 2003

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

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

THESE

présentée devant

L'UNIVERSITE PAUL SABATIER TOULOUSE III

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PAUL SABATIER

Spécialité : *Génie des Procédés Plasmas*

**MODELISATION DE L'EXTINCTION D'UN ARC DE SF₆
HORS D'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE LOCAL**

par

Jean-Belkheir BELHAOUARI

Soutenue le 25 Novembre 1997 devant la commission d'examen :

Président :	M.	S. VACQUIE	Directeur de recherche au CNRS, Toulouse
Rapporteurs :	MM.	C. FLEURIER A. LEFORT	Directeur de recherche au CNRS, Orléans Professeur Université Blaise Pascal, Aubière
Examineurs :	MM.	G. BERGER J. CASANOVAS A. GLEIZES J. J. GONZALEZ P. ROBIN-JOUAN J. C. VERITE	Chargé de recherche au CNRS, Gif sur Yvette Professeur Université Paul Sabatier, Toulouse Directeur de recherche au CNRS, Toulouse Chargé de recherche au CNRS, Toulouse Ingénieur GEC-ALSTHOM, Villeurbanne Ingénieur EDF-DER, Clamart

A mes parents qui m'ont toujours soutenu

A ma sœur Malika

A mes grands parents

A toute ma famille

A tous mes amis

Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe Physico-chimie des plasmas d'arc du Centre de Physique des Plasmas et de leurs Applications de Toulouse, ESA n° 5002.

Je remercie Monsieur S. Vacquié, Directeur de recherche au C.N.R.S. à Toulouse, de m'avoir accueilli parmi son groupe de recherche et de m'avoir fait l'honneur de présider ma thèse en ce jour du Mardi 25 Novembre 1997.

Monsieur A. Gleizes, Directeur de recherche au C.N.R.S. à Toulouse, a dirigé ce travail. Pour sa constante disponibilité et ses précieux conseils, je tiens à lui témoigner ma reconnaissance et mes vifs remerciements.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur Jean-Jacques Gonzalez, chargé de recherche au C.N.R.S., dont la compétence, la disponibilité, la patience et l'amitié m'ont permis de concrétiser par ce mémoire ce long travail de thèse.

J'exprime ma gratitude et mes vifs remerciements à Monsieur C. Fleurier, Directeur de recherche au C.N.R.S. à Orléans, et à Monsieur A. Lefort, Professeur à l'Université Blaise Pascal d'Aubière, qui ont examiné avec soins mon manuscrit et qui m'ont fait le grand plaisir d'être les rapporteurs de mon travail.

Mes remerciements vont aux membres du jury : Monsieur G. Berger, Chargé de recherche au C.N.R.S. à Gif sur Yvette, Monsieur J. Casanovas, Professeur à l'Université Paul Sabatier de Toulouse, Monsieur P. Robin Jouan, Ingénieur GEC-ALSHTHOM à Villeurbanne, Monsieur J. C. Vérité, Ingénieur EDF-DER à Clamart.

Je voudrais vivement remercier Jean-François Bilodeau pour sa participation à ce travail.

Je voudrais associer à tous ces remerciements l'ensemble des étudiants du laboratoire.

J'exprime toute ma sympathie à Monsieur M. Razafinimanana, Maître de Conférence à l'Université Paul Sabatier et à Monsieur J. Rolland Technicien au C.N.R.S., ainsi qu'à tous ceux qui, de près ou de loin, m'ont apporté leur concours.

Enfin, je voudrais remercier Monsieur Barrachet pour la réalisation matérielle de ce mémoire.

MODELISATION DE L'EXTINCTION D'UN ARC DE SF₆ HORS D'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE LOCAL

RESUME :

Lors de l'extinction d'un arc de disjoncteur, on observe une brutale diminution de la conductance de l'arc, le plasma est alors soumis à un fort soufflage qui peut conduire à des écarts à l'équilibre chimique. Les modèles fondés sur l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique local (E.T.L.) prévoient une diminution de la conductance mais ne rendent pas bien compte de l'ensemble des mécanismes régissant l'extinction. La forte convection est responsable de la présence d'une certaine quantité de gaz froid qui n'a pas été totalement dissocié dans les parties chaudes du plasma. Les particules froides peuvent se recombiner rapidement avec les électrons ce qui modifierait la résistivité du milieu.

Pour mettre en évidence ce phénomène qui apparaît dans les disjoncteurs nous avons développé un modèle de l'extinction d'un arc de SF₆ pour une géométrie simplifiée à deux dimensions. Ce modèle couple un modèle de cinétique chimique avec un modèle hydrodynamique et permet de calculer les densités des espèces. La mise en place de ce modèle s'est caractérisée par des calculs préliminaires pour l'initialisation : la composition du plasma à l'équilibre est obtenue à l'aide d'un modèle collisionnel ; un modèle hydrodynamique à deux dimensions a été développé et nous permet de calculer les champs de température et de vitesses en régime stationnaire. Le modèle a été complété par une étude sur la cinétique du SF₆ qui nous a permis de mettre en évidence les différents processus réactionnels qui gouvernent la disparition des électrons.

Nous avons simulé l'extinction de l'arc pour une intensité initiale de 50 A et pour des pressions fixées à 0.1 et 0.4 MPa, le modèle cinétique est couplé au modèle hydrodynamique à partir de l'équation des gaz parfaits et de la relation liant la densité de masse aux densités des espèces. Les principaux résultats du modèle hydrodynamique confirment que la vitesse de refroidissement est de l'ordre de -10^8 K.s^{-1} . Les résultats sur la cinétique montrent que la convection agit sur les molécules de S₂ qui se retrouvent, au bord de la décharge et pour des températures comprises entre 4000 K et 6000 K, en surpopulation par rapport à l'équilibre. Par processus d'échange de charge entre les particules S₂ et S⁺ la surpopulation de S₂ va conduire à une surpopulation des ions S₂⁺. Ces ions vont principalement se recombiner avec les électrons provoquant une baisse de la population électronique, et une modification de la résistivité du milieu.

MOTS CLEFS :

Arc électrique
Cinétique chimique
Disjoncteur
Ecart à l'équilibre

Extinction
Hexafluorure de soufre (SF₆)
Modélisation
Plasma thermique

MODELLING OF THE EXTINCTION OF A SF₆ ARC IN NON LOCAL THERMODYNAMIC EQUILIBRIUM

ABSTRACT:

During the circuit-breaker arc decay, a rapid diminution of the conductance of the arc is observed, subjecting the plasma produced in very high convection fields which may introduce departures from chemical equilibrium. The existing models, based on local thermodynamic equilibrium assumption point out this effect but do not consider all the mechanisms susceptible to occur during extinction. The convection may be responsible for the presence of cold gas, partially dissociated in the warmer regions of the plasma. The cold particulate recombine rapidly with the electrons leading to a change in the resistivity of the environment.

For a better understanding of this phenomenon, we have developed a simplified 2D model of a SF₆ arc during extinction. This model associates both chemical kinetic and hydrodynamic models, permitting the calculation of the number densities of the different species present in the plasma. Beforehand, the composition of the plasma is obtained from a collisional model and hydrodynamic code in stationary regime was developed to initialise the temperature and the velocity fields. This model was completed thereafter by a study of the chemical kinetics of SF₆ which allowed us to single out the different reactions which govern the disappearance of the electrons.

We have simulated the extinction of the arc for a current intensity $I = 50$ A and for pressure of 0.1 and 0.4 MPa. The kinetic model is linked with the hydrodynamic one from Dalton's equation and from the relation associating the mass density to that of the species number densities. The principal results of the hydrodynamic code affirm that the cooling rate is about -10^8 K.s⁻¹. The kinetics results indicate that convection affects S₂ molecules, found on the edge of the discharge and for temperature ranging from 4000 K to 6000 K, which are overpopulated compared with that of equilibrium. Due to the charge exchange between S₂ and S⁺ an overpopulation of S₂ leads to overpopulation of S₂⁺. These ions basically recombine with the electrons causing a lowering of the electron population and thus a modification of the resistivity.

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES	13
NOMENCLATURE	19
INTRODUCTION	23
CHAPITRE I- CINETIQUE CHIMIQUE DANS LE SF₆	29
I-1. INTRODUCTION A LA CINETIQUE CHIMIQUE	29
I-1-1. Hypothèses	29
I-1-2. Equation de continuité	30
I-1-3. Expressions générales des taux de réactions	31
I-1-4. Fonctions de partition totales	33
I-1-4-1. Fonction de partition de translation	33
I-1-4-2. Fonction de partition interne pour les espèces monoatomiques	33
I-1-4-3. Fonction de partition interne pour les molécules diatomiques	34
I-1-4-4. Fonction de partition interne pour les molécules polyatomiques	34
I-1-5. Taux de réactions	35
I-1-5-1. Recombinaison électron-ion atomique	36
I-1-5-2. Attachement atomique	36
I-1-5-3. Attachement dissociatif moléculaire	36
I-1-5-4. Association d'atomes et d'ions positifs	37
I-1-5-5. Echange d'ions	37
I-1-5-6. Echange d'électrons	37
I-1-5-7. Recombinaison ion-ion	38
I-1-5-8. Association d'atomes et de molécules	38
I-2. COMPOSITION DU PLASMA DE SF₆ EN REGIME STATIONNAIRE	42
I-2-1. Motivations	42
I-2-2. Choix des espèces et des réactions	42
I-2-3. Equations	43
I-2-4. Expressions du terme source Ca et du terme de perte Da	43
I-2-5. Calcul de la composition du plasma	44
I-2-5. Résultats	46

I-3. CINETIQUE CHIMIQUE DU SF₆	49
I-3-1. Motivations	49
I-3-2. Généralités	49
I-3-4. Calcul des fréquences de disparition	50
I-3-4-1. Espèces polyatomiques	51
I-3-4-2. Espèces monoatomiques	52
I-3-4-3. Espèces diatomiques	53
I-3-4-4. Espèces ionisées	53
I-3-5. Calcul des portées	60
I-4. CONCLUSION	62
CHAPITRE II- MODELISATION MATHEMATIQUE ET METHODE NUMERIQUE	65
II-1. GENERALITES	65
II-2. EQUATIONS	66
II-2-1. L'équation de conservation de la masse	66
II-2-2. L'équation de conservation de la quantité de mouvement	67
II-2-3. L'équation de l'énergie	67
II-2-4. Equations électromagnétiques	68
II-2-5. Les équations de couplage	69
II-3. METHODE DE DISCRETISATION	70
II-3-1. Principe	70
II-3-2. Volume de contrôle	71
II-3-3. Discrétisation de l'équation générale	72
II-3-4. Linéarisation du terme source	75
II-3-5. La correction de pression	76
II-3-6. Cas particulier de l'équation de continuité	77
II-3-7. Méthode de résolution	80
II-4. ESTIMATION DU PAS MAXIMAL D'AVANCEMENT SUR LE TEMPS Δt A PARTIR DE LA CINETIQUE	81
II-5. COEFFICIENTS DE TRANSPORT	87
CHAPITRE III- MODELES A UNE DIMENSION	93
III-1. INTRODUCTION	93
III-2. MODELISATION D'UN ARC STABILISE PAR PAROIS EN REGIME STATIONNAIRE	93

Table des matières	15
III-2-1. Equation de bilan d'énergie	93
III-2-2. Influence du pas Δr	94
III-2-3. Influence de l'intensité	97
III-2-4. Influence de la pression	99
III-3. EXTINCTION DE L'ARC STABILISE PAR PAROIS	101
III-3-1. Généralités	101
III-3-2. Influence du pas Δt	102
III-3-3. Résultats et commentaires	102
III-4. EXTINCTION DE L'ARC STABILISE PAR PAROIS, COUPLAGE HYDRO-CINETIQUE	106
III-4-1. Généralités	106
III-4-2. Choix des espèces	106
III-4-3. Calcul du profil initial de température	106
III-4-4. Equations	108
III-4-5. Résolution	109
III-4-6. Modèle de référence	109
III-4-7. Résultats et commentaires	111
III-4-7-1. Profils de température et de vitesse	111
III-4-7-2. Etude sur l'axe	113
III-4-7-3. Ecart à l'équilibre	114
III-5. CONCLUSION	118
CHAPITRE IV- MODELES A DEUX DIMENSIONS	121
IV-1. INTRODUCTION	121
IV-2. DOMAINE DE CALCUL	121
IV-3. MODELE STATIONNAIRE	124
IV-3-1. Procédure de calcul	124
IV-3-2. Caractéristiques générales	125
IV-3-3. Influence du débit	126
IV-3-4. Influence de la pression	130
IV-4. MODELE TRANSITOIRE	133
IV-4-1. Equations	133
IV-4-2. Caractéristiques de l'extinction de l'arc	136
IV-4-2-1. Champs de température et de vitesses	136
IV-4-2-2. Conductance	144

IV-4-2-3. Champs de densités de particules	145
IV-4-3. Influence de la conductivité thermique	153
CONCLUSION	159
ANNEXE I	163
A1-1. Espèces considérées	163
A1-2. Réactions chimiques	163
REFERENCES	169
LISTE DES FIGURES ET DES TABLEAUX	177

NOMENCLATURE

NOMENCLATURE

Afin de faciliter la compréhension des équations, nous présentons la nomenclature des termes utilisés.

Lettres romaines

\vec{a} :	Vecteur accélération	[m.s ⁻²]
B_θ :	Induction magnétique	[T]
C_p :	Chaleur spécifique à pression constante	[J.K ⁻¹ .kg ⁻¹]
Ca_i :	Nombre de particules i créées par unité de temps et de volume	[m ⁻³ .s ⁻¹]
Da_i :	Taux de destruction total pour les particules i	[s ⁻¹]
D :	Débit de masse	[kg.s ⁻¹]
E :	Champ électrique	[V.m ⁻¹]
f_i :	Fonction de distribution de la particule i	
\vec{g} :	Champ de gravité	[m ² .s ⁻¹]
G :	Conductance linéique	[S.m]
h :	Enthalpie	[J.kg ⁻¹]
I :	Intensité de courant	[A]
j_x :	Densité de courant axial	[A.m ⁻²]
K_d :	Taux de réaction direct	[dépend de la nature de la réaction]
K_i :	Taux de réaction indirect	[dépend de la nature de la réaction]
m_i :	Masse de la particule i	[kg]
n_i :	Densité numérique de la particule i	[m ⁻³]
p :	Pression	[Pa]
\vec{r} :	Vecteur position	[m]
r :	Coordonnée radiale	[m]
R :	Rayon de la décharge	[m]
T :	Température du gaz	[K]
T_e :	Température des électrons	[K]
T_i :	Température des particules ionisées	[K]
T_g :	Température des particules lourdes	[K]

T_p :	Température de paroi	[K]
t :	Coordonnée temporelle	[s]
u :	Vitesse axiale	[m.s ⁻¹]
u_R :	Puissance rayonnée	[W.m ⁻³]
\vec{v} :	Vecteur vitesse	[m.s ⁻¹]
\vec{v}_i :	Vecteur vitesse de la particule i	[m.s ⁻¹]
v :	Vitesse radiale	[m.s ⁻¹]
w :	Vitesse azimutale	[m.s ⁻¹]
x :	Coordonnée axiale	[m]
Z_e :	Fonction de partition d'excitation	
Z_{int} :	Fonction de partition interne	
Z_r :	Fonction de partition de rotation	
Z_v :	Fonction de partition de vibration	
Δt :	Pas d'avancement sur le temps	[s]

Lettres grecques

ϵ_N :	Coefficient d'émission nette	[W.m ⁻³ .sr ⁻¹]
K :	Conductivité thermique	[W.K ⁻¹ .m ⁻¹]
μ :	Viscosité dynamique	[kg.m ⁻¹ .s ⁻¹]
θ :	Angle azimutal	[sr]
ρ :	Densité de masse	[kg.m ⁻³]
σ :	Conductivité électrique	[S.m ⁻¹]
τ_p^A :	Temps de relaxation de l'espèce A spécifique à la réaction p	[s]
τ^A :	Temps de relaxation globale de l'espèce A	[s]

Constantes

k_b :	Constante de Boltzmann (= 1.3807 10 ⁻²³ J.K ⁻¹)
q_i :	Charge de la particule i (= 1.602 10 ⁻¹⁹ C)
R_0 :	Constante des gaz parfaits (= 8.206 10 ⁻² m ³ atm kmole ⁻¹ K ⁻¹)
μ_0 :	Perméabilité du vide (= 4 π 10 ⁻⁷ H.m ⁻¹)

INTRODUCTION

INTRODUCTION

Dans les réseaux de distribution de l'électricité à haute tension, la coupure du courant est assurée par des disjoncteurs à hexafluorure de soufre (SF_6). Le mécanisme de coupure est fondé sur la séparation de contacts qui entraîne l'apparition d'un arc électrique dont l'amplitude peut atteindre plusieurs dizaines de kilo ampères dans des conditions de défaut de court-circuit. Cet arc est ensuite violemment soufflé lorsque l'intensité du courant alternatif passe au voisinage du zéro de courant.

Le développement et le contrôle des disjoncteurs modernes nécessitent une connaissance précise de tous les mécanismes de transfert d'énergie et d'écoulement mis en jeu lors de l'apparition puis de l'extinction de l'arc. Afin d'améliorer la conception et la validation des appareillages de coupure et de disposer d'une expertise efficace dans ce domaine, Electricité De France s'est associée à deux grands fabricants français de disjoncteur (GEC Alsthom T&D et Schneider Electric) pour développer un projet national sur la modélisation des arcs de disjoncteur à SF_6 en collaboration avec plusieurs équipes universitaires. Le programme général ne se limite pas à la mise au point de codes numériques, mais il inclut de nombreuses études expérimentales et théoriques permettant soit d'affiner le traitement d'un phénomène physique (influence des vapeurs métalliques, transfert radiatif, érosion des parois) soit de valider des résultats de codes appliqués à des maquettes de disjoncteur (comparaison entre des valeurs de température, pression ou bilan d'énergie).

La première phase de ce vaste projet qui s'est déroulée entre 1992 et 1996 a porté essentiellement sur la représentation des phénomènes engendrés lors de l'existence de l'arc à forte intensité de courant. La deuxième phase du projet, en développement depuis 1996, consiste à continuer à améliorer les codes numériques décrivant l'étape de fort courant, et à étudier l'extinction de l'arc. Ce dernier aspect est loin d'être trivial. En effet dans certaines conditions, immédiatement après le passage du courant au zéro, le réseau a tendance à appliquer aux bornes du disjoncteur une tension transitoire de rétablissement (TTR) dont la croissance est de l'ordre de plusieurs kilo Volt par micro seconde. Or durant cette phase qui suit le moment de l'annulation du courant, l'arc se refroidit rapidement à cause du violent soufflage qu'il subit, ce qui induit une augmentation rapide de la résistance électrique entre les contacts du disjoncteur. Cette augmentation est rapide mais la transition entre un état conducteur (quand l'arc est établi) et l'état diélectrique n'est pas instantanée. L'application de la TTR dans un milieu légèrement conducteur peut donc conduire à l'établissement

d'un courant (appelé courant post-arc) qui peut induire un réchauffement du plasma si l'intensité de ce courant résiduel est trop importante (typiquement cette intensité ne doit pas dépasser un ampère).

Les modèles numériques fondés sur l'hypothèse que le plasma est en équilibre thermodynamique local (ETL) montrent qu'il existe toujours un certain courant post-arc. Or la réalité expérimentale est souvent différente : malgré les progrès dans la mesure de ce courant post-arc, on observe que dans la plupart des cas le courant post-arc n'existe pas ou reste indétectable. Une des idées émises pour expliquer cette contradiction a été de suggérer que des écarts à l'ETL pourraient se manifester lors de l'extinction de l'arc. La forte convection serait alors responsable de la présence d'une certaine quantité de gaz froid qui n'a pas été totalement dissociée dans les parties chaudes du plasma. Les particules froides se recombineraient rapidement avec les électrons ce qui modifierait la résistivité du milieu. Pour mettre en évidence ce phénomène qui apparaît dans les disjoncteurs nous avons développé un modèle de l'extinction d'un arc de SF₆ pour une géométrie simplifiée à deux dimensions. Ce modèle couple un modèle de cinétique chimique avec un modèle hydrodynamique et permet de calculer les densités des espèces que l'on considère lors de l'extinction.

Les premiers travaux de modélisation effectués sur l'arc de disjoncteur ont été réalisés en supposant l'existence de l'ETL. Dans ces travaux, deux types d'études ont été élaborés. Le premier concerne les modèles hydrodynamiques : au début ces modèles d'arc étaient très simplifiés [He-1], [Tu-1] ; ensuite sont apparues des simulations rendant compte d'un écoulement laminaire [Co-1], [Ch-1]. Pour expliquer la supériorité du SF₆ sur l'azote, et en s'inspirant des travaux antérieurs [He-2], [Tu-2], les modélisations ont fait intervenir le rôle de la turbulence dans les arcs de disjoncteur dans des géométries simplifiées [Gl-1], [Gl-2], [Lo-1] et [Fa-1]. D'autres modèles étaient consacrés à l'étude de l'extinction dans le cas d'un arc stabilisé par parois [Lo-3], [Gl-3]. Depuis ces dernières années les modèles utilisés sont devenus de plus en plus sophistiqués, traitant des cas en régime stationnaire ou à l'extinction en prenant en compte les phénomènes de turbulence ainsi que des géométries plus complexes à deux dimensions [Gl-4], [Go-1], [Ve-1].

Le deuxième type concerne les études sur la cinétique, les modèles développés par [Br-1], [Mb-1], [Bo-1], [Ad-1], [Cl-1] calculent par exemple l'évolution temporelle des densités des espèces chimiques à partir d'une composition initiale en se donnant une loi de décroissance en température. Cependant ce type de modèle est incapable d'étudier l'influence de l'injection du gaz froid dans les parties chaudes. En effet la pression étant supposée constante et le modèle sans dimension, le terme de convection est remplacé par des termes d'apport de particules [Br-1] [Dr-1]. Or ces termes de substitution apportent des particules de même nature que celles qui existent dans le

plasma et ne prennent pas en compte le fait que le gaz envoyé réellement dans le plasma est du SF₆ froid et que la dissociation du SF₆ n'est pas instantanée. Pour tenir compte réellement de ce phénomène il faut coupler le modèle cinétique à l'écoulement du milieu.

Il faut cependant préciser que la finalité de notre étude n'est pas de simuler exactement le comportement d'un arc de disjoncteur à SF₆, mais de se placer dans des conditions suffisamment proches de la réalité pour être capable de dire si les écarts à l'équilibre doivent être pris en compte dans une modélisation globale d'un arc de disjoncteur. Cette thèse constitue la première partie de l'objectif final de l'équipe du CPAT qui englobe à plus long terme la mise au point d'un modèle à deux températures. Les conditions géométriques de l'étude sont simplifiées par rapport à celles d'un disjoncteur réel. Par ailleurs nous ne représentons pas toute l'évolution de la vie de l'arc de disjoncteur (création, fort courant, diminution de l'intensité jusqu'au zéro et phase post-arc) et nous nous limitons à la dernière étape simulée par des conditions initiales stationnaires pour un arc d'intensité continue (50 A typiquement) et par l'étude de l'évolution du plasma après l'annulation instantanée du terme de source d'énergie électrique.

Cette thèse est divisée en quatre chapitres. Le premier est consacré à l'étude de la cinétique du SF₆. Nous présenterons les éléments théoriques nécessaires pour la mise en œuvre des différents modèles cinétiques, à savoir, le modèle de calcul de la composition du milieu à l'état stationnaire ainsi que les modèles permettant d'étudier la cinétique réactionnelle du SF₆. Le deuxième chapitre est essentiellement théorique, nous exposerons les bases numériques de la modélisation et les justifications physiques. Les chapitres trois et quatre sont relatifs aux résultats des différents modèles hydrodynamiques et hydro-cinétiques, nous présenterons les résultats des modèles à une dimension dans le troisième chapitre et les résultats des modèles à deux dimensions dans le dernier chapitre. Les résultats de ce dernier chapitre sont bien sûr les plus attendus. En effet, la modélisation à deux dimensions apporte une grandeur supplémentaire pour la convection (vitesse axiale), ainsi les résultats de la cinétique sont en particulier fonction de la forte convection qu'on injecte à l'entrée de la décharge.

CHAPITRE I

CINETIQUE CHIMIQUE DANS LE SF₆

CHAPITRE I- CINETIQUE CHIMIQUE DANS LE SF₆

I-1. INTRODUCTION A LA CINETIQUE CHIMIQUE

Les bases du modèle cinétique établi dans cette étude ont été développées dans un travail antérieur au sein de l'équipe 'physico-chimie des plasmas d'arc' du laboratoire [Mb-1] [Bo-1]. Les motivations de ces études étaient liées au comportement électrique du milieu dans les disjoncteurs à SF₆ à haute tension [Mb-1] ainsi qu'à la caractérisation du plasma en présence d'impuretés (Cu, H₂O, C) qui se forment à l'intérieur du disjoncteur longtemps après la séparation des contacts [Bo-1].

Quand l'état du plasma s'écarte de l'équilibre thermodynamique local (ETL), la composition du milieu doit être décrite sur la base de modèles dans lesquels les propriétés atomiques individuelles et les réactions chimiques interviennent. Ces modèles sont dits collisionnels radiatifs, ils prennent en compte les mécanismes collisionnels des particules ainsi que les mécanismes radiatifs responsables de la création et de la disparition des atomes et des molécules. La mise au point de ces modèles comporte plusieurs étapes à savoir la détermination des différentes espèces mises en jeu, le calcul de leurs fonctions de partition et les différentes réactions chimiques les reliant. Nous nous proposons dans cette partie de rappeler quelques éléments de la théorie dont nous nous servirons dans nos modèles.

I-1-1. Hypothèses

A partir d'un état de plasma quasi-stationnaire à haute température ($\cong 12000$ K sur l'axe) on étudie le refroidissement du plasma et l'évolution des densités des particules qui le composent en considérant les hypothèses suivantes :

- Le milieu se comporte comme un gaz parfait.
- Le milieu évolue à pression constante.
- Les termes de diffusion sont négligés, chaque type de particule à une vitesse égale à la vitesse moyenne dirigée de l'ensemble des particules.

- A chaque instant on suppose que les fonctions de distribution en énergie de toutes les espèces sont Maxwelliennes et centrées sur la même énergie moyenne.
- Le milieu est à l'équilibre thermique : à chaque instant une seule température caractérise toutes les espèces.
- Les taux des réactions ne sont fonctions que de la température.
- Pour chaque espèce donnée on ne considère qu'un seul état qui correspond au niveau fondamental.

I-1-2. Equation de continuité

Une particule à l'instant t est caractérisée par 6 coordonnées (r, θ, x, v, w, u) dans un espace (\vec{r}, \vec{v}) à 6 dimensions appelé espace des phases. Soit $f_i(\vec{r}, \vec{v}, t)$ la fonction de distribution des particules « i », l'équation de Boltzmann est une équation de continuité dans l'espace des phases, qui traduit les variations du nombre des particules dans chaque cellule de l'espace des phases, sous l'effet d'une part des forces extérieures ou propres et d'autre part des collisions.

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_i + \vec{a} \cdot \vec{\nabla}_v f_i = \left\{ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right\}_{\text{Coll}} \quad (\text{I-1})$$

En intégrant l'équation de Boltzmann dans l'espace des vitesses (moment zéro de l'équation de Boltzmann) on obtient l'équation de continuité relative au bilan de particules :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \vec{\nabla}_r \cdot n_i \vec{v}_i = S_i \quad (\text{I-2})$$

En généralisant les processus de perte et de création de particules, le terme source, à droite de la relation (I-2) s'écrit :

$$S_i = \int_v \left\{ \frac{\delta f_i}{\delta t} \right\}_{\text{Coll}} d^3v = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{\text{C.R.}} = Ca_i - n_i Da_i \quad (\text{I-3})$$

v_i représente la vitesse moyenne dirigée de la particule i , S_i est le terme collisionnel radiatif, il est égal à la différence entre le nombre de particules créées par unité de volume et par unité de temps (Ca_i), et le nombre de particules disparues par unité de volume et par unité de temps ($n_i Da_i$).

I-1-3. Expressions générales des taux de réactions

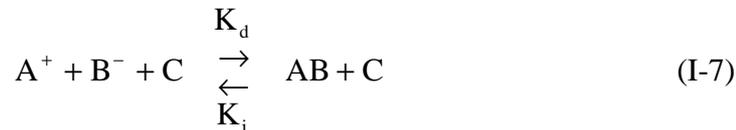
Soit le processus de formation des espèces C et D à partir des espèces A et B :



A l'équilibre, le nombre de réactions directes par unités de temps et de volume (appelé vitesse de réaction) est égal au nombre de réactions inverses, soit :

$$n_A n_B K_d = n_C n_D K_i \quad (\text{I-5})$$

Cette relation, établie dans l'hypothèse de l'équilibre, reste également valable dans nos conditions, c'est-à-dire quand les fonctions de distribution de toutes les espèces sont Maxwelliennes, à l'équilibre thermique. Dans les applications concrètes, la relation (I-4) peut prendre deux formes générales :



Pour la relation (I-6) la relation entre le taux direct et le taux inverse s'écrit :

$$K_i = \left(\frac{n_A n_B}{n_{AB}} \right)_{\text{eq}} \left(\frac{n_{BC}}{n_B n_C} \right)_{\text{eq}} K_d \quad (\text{I-8})$$

Les termes entre parenthèses sont donnés par la loi de Guldberg-Waage :

$$\left(\frac{n_A n_B}{n_{AB}} \right)_{\text{eq}} = \frac{Z_A Z_B}{Z_{AB}} \left(\frac{2\pi\mu_{AB} k T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{D_{AB}}{kT}\right) \quad (\text{I-9})$$

Z_X est la fonction de partition interne de la particule X, D_{AB} l'énergie de dissociation de la molécule AB et μ_{AB} la masse réduite des particules A et B :

$$\mu_{AB} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (\text{I-10})$$

Pour la relation (I-7) nous avons :

$$K_i = \left(\frac{n_A^+ n_B^-}{n_{AB}} \right)_{\text{eq}} K_d \quad (\text{I-11})$$

soit :

$$K_i = \left(\frac{n_A n_B}{n_{AB}} \right)_{\text{eq}} \left(\frac{n_e n_A^+}{n_A} \right)_{\text{eq}} \left(\frac{n_B^-}{n_e n_B} \right)_{\text{eq}} K_d \quad (\text{I-12})$$

Le premier terme est donné par la loi de Guldberg-Waage tandis que les deux suivants le sont par la loi de Saha :

$$\left(\frac{n_e n_A^+}{n_A} \right)_{\text{eq}} = \frac{2Z_{A^+}}{Z_A} \left(\frac{2\pi m_e k T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \quad (\text{I-13})$$

où m_e est la masse électronique et E_i l'énergie d'ionisation de l'espèce A.

Pour les réactions réversibles les taux des réactions directes et les taux de réactions inverses ont été calculés par Borge [Bo-1]. Les taux directs ainsi que les sections efficaces sont issus de la

littérature, les taux inverses sont calculés par micro-réversibilité, ce qui nécessite de calculer les fonctions de partition de toutes les espèces.

I-1-4. Fonctions de partition totales

La fonction de partition totale correspond à la somme de tous les états que peut occuper une espèce, à la fois dans le volume et dans l'espace des énergies. On peut écrire la fonction de partition totale sous la forme du produit de deux fonctions dont l'une représente la fonction de partition de translation (Z_{tr}) et l'autre la fonction de partition interne (Z_{int}).

$$Z_T = Z_{tr} Z_{int} \quad (I-14)$$

I-1-4-1. Fonction de partition de translation

La fonction de partition de translation est donnée par :

$$Z_{tr} = V \left(\frac{2 \pi M k T}{h^2} \right)^{3/2} \quad V = \frac{N k T}{p} \quad (I-15)$$

où M est la masse de la particule, V le volume considéré, N le nombre d'Avogadro. En unités MKSA et à la pression atmosphérique on a :

$$Z_{tr} = 2.0309 \cdot 10^{61} M^{3/2} T^{5/2} \quad (I-16)$$

I-1-4-2. Fonction de partition interne pour les espèces monoatomiques

Les états d'énergie possibles obéissent à la distribution de Boltzmann, la sommation s'effectue sur tous les niveaux j de l'atome, de poids statistique g_j , et d'énergie d'excitation E_j . La fonction de partition interne est alors donnée par :

$$Z_{\text{int}} = \sum_{j=0}^{\infty} g_j \exp\left(-\frac{E_j}{kT}\right) \quad (\text{I-17})$$

I-1-4-3. Fonction de partition interne pour les molécules diatomiques

Dans le cas des molécules diatomiques il faut tenir compte des niveaux d'excitation, de vibration et de rotation. La fonction de partition interne s'écrit :

$$Z_{\text{int}} = \sum_e Z_e Z_v Z_r \quad (\text{I-18})$$

Pour un état électronique il faut calculer :

$$Z_v Z_r = \sum_v \exp\left(-\frac{G(v)}{kT}\right) \left[\sum_j (2J+1) \exp\left(-\frac{F_v(J)}{kT}\right) \right] \quad (\text{I-19})$$

où v et J représentent respectivement les nombre quantiques de vibration et de rotation

$$G(v) \cong w_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - w_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + w_e y_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^3 \quad (\text{I-20})$$

$$F(J) = B_v (J(J+1)) - D_v (J(J+1))^2 \quad (\text{I-21})$$

où w_e , x_e , y_e , B_v et D_v sont les constantes spectroscopiques tabulées par Herzberg [He-3].

I-1-4-4. Fonction de partition interne pour les molécules polyatomiques

Suivant le type de molécule on utilise deux formules [He-4] :

Pour les molécules linéaires :

$$Z_{\text{int}} = \frac{1}{\sigma} \frac{\sum_J (2J+1) \exp\left(-\frac{BJ(J+1)hc}{kT}\right)}{\sum_i \left[1 - \exp\left(-\frac{\omega_i hc}{kT}\right)\right]^{d_i}} \quad (\text{I-22})$$

Pour les molécules non linéaires :

$$Z_{\text{int}} = \frac{1}{\sigma} \frac{\sqrt{\pi \left(\frac{8\pi^2 c}{h}\right)^3 I_A I_B I_C \left(\frac{kT}{hc}\right)^3}}{\sum_i \left[1 - \exp\left(-\frac{\omega_i hc}{kT}\right)\right]^{d_i}} \quad (\text{I-23})$$

Pour les deux cas la molécule est considérée comme rigide et harmonique et la contribution du spin est nul, σ est le nombre de symétries, d_i le degré de dégénérescence des vibrations de nombre d'onde ω_i , $I_A I_B I_C$ est le produit des moments d'inertie. Les valeurs introduites dans ces deux relations sont données dans les tables de la JANAF [Ja-1].

I-1-5. Taux de réactions

Dans la littérature les informations concernant les réactions liant les espèces qui nous intéressent sont données soit sous forme de section efficace ou soit sous forme de taux de réaction. La section efficace est équivalente à une probabilité d'interaction et est en général fonction de l'énergie des particules en collision. Le taux de réaction est une grandeur plus globale qui tient compte de la distribution des particules en énergie, cette distribution est maxwellienne à l'équilibre. La relation qui lie le taux de réaction K à la section efficace σ est d'après [Gl-5] :

$$K = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi\mu_{AB}}} \int_{E_0/k_b T}^{\infty} x \sigma e^{-x} dx = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi\mu_{AB}}} e^{-\frac{E_0}{k_b T}} \int_0^{\infty} \left(x + \frac{E_0}{k_b T}\right) \sigma e^{-x} dx \quad (\text{I-24})$$

où E_0 est l'énergie seuil de la réaction. Si un des partenaires de la collision est un électron, la masse réduite μ_{AB} se simplifie en m_e , masse de l'électron.

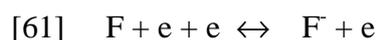
NB : Les numéros des réactions correspondent aux numéros donnés en annexe 1.

I-1-5-1. Recombinaison électron-ion atomique



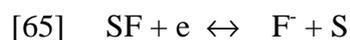
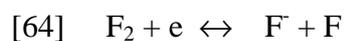
Nous avons utilisé les coefficients de recombinaison et d'ionisation calculés par Gleizes et al. [GL-7] qui tiennent compte de façon globale des mécanismes de chaque couple de réactions.

I-1-5-2. Attachement atomique

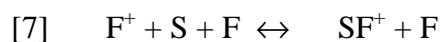
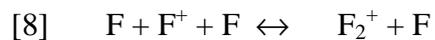


Pour l'attachement radiatif nous avons utilisé les sections efficaces de Vacquié et al. [Va-1] pour [62], les valeurs de Robinson et Geltman [Ro-1] pour [63]. Pour l'attachement collisionnel à trois corps [61] nous avons utilisé les valeurs des sections efficaces du processus inverse (détachement) rapportées par Pearl et al [Pe-1].

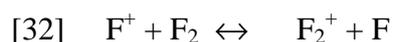
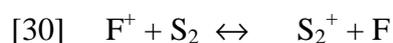
I-1-5-3. Attachement dissociatif moléculaire



Pour la réaction d'attachement dissociatif du fluor [64], la section efficace d'attachement a été rapportée par Mc Corkle et al. [Co-2]. Pour la réaction équivalente [65], la loi de similarité de Brand et Kopainsky a été utilisée [Br-1].

I-1-5-4. Association d'atomes et d'ions positifs

Les sections efficaces de ces réactions ont été calculées à partir de l'approximation du modèle « boule de billard ».

I-1-5-5. Echange d'ions

Les taux des réactions ont été calculés à partir de l'approximation semi-classique [Br-1].

$$K = 2\pi \sqrt{\frac{e^2 \alpha}{\mu}} \quad (\text{I-25})$$

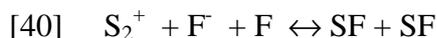
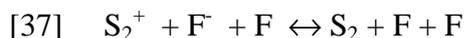
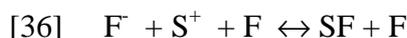
où α est la polarisabilité des molécules, μ la masse réduite des ions et molécules.

I-1-5-6. Echange d'électrons

Le taux de réaction de [27] a été obtenu par [Ch-2] :

$$K = 1.46 \cdot 10^{-10} \sqrt{\frac{T}{\mu}} \quad (\text{I-26})$$

où μ est la masse réduite des espèces S et SF₂.

I-1-5-7. Recombinaison ion-ion

Les taux de réaction [35] à [40] ainsi que [43] ont été calculés par la théorie de Thompson déduite de la littérature [Dr-2] alors que pour ceux des réactions [41] et [42], les valeurs de Wilson et Shapiro [Wi-1] ont été utilisées avec une loi en température en $T^{-5/2}$.

I-1-5-8. Association d'atomes et de molécules

Il existe de très nombreuses réactions entre les espèces issues des décompositions du SF₆. Pour la plupart des réactions chimiques de type dissociation, la méthode du potentiel de Lennard-Jones a été utilisée pour calculer les taux. A ces réactions sont associés des taux de la forme :

$$K = A \left(\frac{T}{T_0} \right)^n e^{-\frac{B}{T}} \quad (I-27)$$

Pour les réactions dont le taux est donné constant, on a choisi les approximations suivantes :

- si la réaction est exothermique : $\Delta H < 0$, elle sera considérée comme indépendante de la température. On gardera alors un taux constant en fonction de la température.

- si la réaction est endothermique : $\Delta H > 0$, l'enthalpie des produits est supérieure à celles des réactants : il faut donc fournir de l'énergie pour que la réaction ait lieu. La réaction sera donc

dépendante de la température et on utilisera la loi d'Arrhénius pour le calcul du taux de réaction selon la relation :

$$K = A e^{-\frac{E_a}{R_0 T}} \quad (\text{I-28})$$

où A est la constante pré-exponentielle et E_a énergie d'activation.

Méthode de Lennard-Jones

Si l'on considère un potentiel réaliste d'interaction entre particules, la « constante » pré-exponentielle 'A' varie avec la température. Dans le cas d'une collision entre deux radicaux, le calcul de A peut être effectué en calculant la fréquence de collision suivant la méthode de Troe [Tr-1]. On suppose que le potentiel d'interaction est du type Lennard-Jones et la fréquence de collision est définie par :

$$Z_{ij} = \pi \sigma_{A-B}^2 \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_{AB}}} \Omega^{(2,2)} N_a \quad (\text{en m}^3 \text{ s}^{-1} \text{ mole}^{-1}) \quad (\text{I-29})$$

$$\Omega^{(2,2)} = \left[0.636 + 0.567 \log \left(\frac{k_b T}{\epsilon_{AB}} \right) \right]^{-1}$$

avec σ_{A-B} le diamètre de la collision, N_a le nombre d'Avogadro, R la constante des gaz parfaits, M_{AB} la masse réduite des particules A et B et $\Omega^{(2,2)}$ une intégrale de collision. Le paramètre ϵ est caractéristique du potentiel de Lennard-Jones et s'appelle température réduite [Hi-1]. Il est tabulé pour un certain nombre d'espèces. Pour une réaction entre une espèce A caractérisée par une température ϵ_A et une espèce B caractérisée par ϵ_B , le paramètre d'interaction est donné par :

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_A \epsilon_B} \quad (\text{I-30})$$

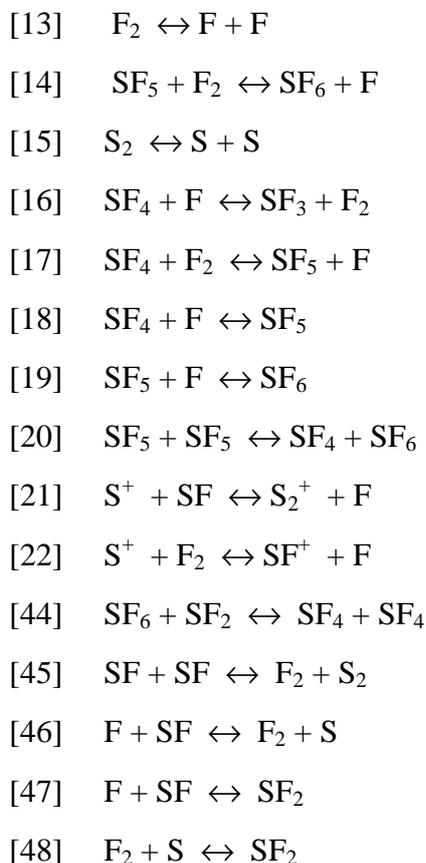
L'expression (I-29) conduit à une valeur limite supérieure de la fréquence de collision et donc de la constante pré-exponentielle 'A'. Cette valeur sera utilisée lors de l'interaction entre deux radicaux. Pour une réaction molécule-radical, il faudra pondérer la valeur de A par un facteur 0.1 et pour une réaction entre deux molécules par un facteur 0.01 [Fa-2].

Les réactions d'association du type $A+B \rightarrow AB$ sont en général exothermiques, c'est à dire que l'énergie de formation de AB est inférieure à la somme des énergies de formation de A et de B. Cependant il ne suffit pas que les particules A et B entrent en collision pour qu'automatiquement elles s'associent pour former la molécule AB. Si les espèces A et B sont très réactives (cas de deux radicaux), la réaction sera plus efficace que si ce sont des molécules stables. Dans ce dernier cas, on peut considérer que les molécules, lors de leur collision, doivent dépasser un potentiel répulsif qui se traduit par une énergie mise en jeu dans la réaction ; c'est l'énergie d'activation E_a . Il existe une loi empirique simple permettant d'évaluer l'ordre de grandeur de l'énergie d'activation d'une réaction bimoléculaire [Fa-2] :

- entre deux radicaux, $E_a = 0$
- entre un radical et une molécule $5 \leq E_a \leq 10 \text{ kcal mole}^{-1}$
- entre deux molécules : $E_a > 20 \text{ kcal mole}^{-1}$

Dans nos conditions, pour les réactions entre une molécule et un radical, nous avons choisi arbitrairement $E_a = 10 \text{ kcal mole}^{-1}$, alors que pour les réactions entre deux molécules, nous avons posé $E_a = 30 \text{ kcal mole}^{-1}$.

Les valeurs des paramètres nécessaires au calcul des taux des réactions sont données dans la thèse de Borge [Bo-1]. Les réactions dont le taux à été calculé par cette méthode sont les suivantes :



-
- [49] $\text{SF} + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_2 + \text{F}$
- [50] $\text{SF} + \text{SF} \leftrightarrow \text{S} + \text{SF}_2$
- [51] $\text{S}_2 + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_2 + \text{S}$
- [52] $\text{SF}_2 + \text{F} \leftrightarrow \text{SF}_3$
- [53] $\text{SF}_2 + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_3 + \text{F}$
- [54] $\text{SF} + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_3$
- [55] $\text{SF}_2 + \text{SF}_2 \leftrightarrow \text{SF}_3 + \text{SF}$
- [56] $\text{SF}_3 + \text{F} \leftrightarrow \text{SF}_4$
- [57] $\text{SF}_2 + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_4$
- [58] $\text{SF}_3 + \text{SF}_3 \leftrightarrow \text{SF}_2 + \text{SF}_4$
- [59] $\text{SF}_2 + \text{SF}_2 \leftrightarrow \text{SF}_4 + \text{S}$
- [60] $\text{SF}_3 + \text{F}_2 \leftrightarrow \text{SF}_5$

I-2. COMPOSITION DU PLASMA DE SF₆ EN REGIME STATIONNAIRE

I-2-1. Motivations

La résolution du système d'équations de conservation en régime stationnaire se justifie pour plusieurs raisons, i) elle permet de tester le calcul des taux inverses à travers la mise en place de nombreuses lois de Saha et de Guldberg-Waage, ii) la résolution en régime transitoire nécessite comme conditions initiales les valeurs en régime stationnaire, iii) la composition à l'équilibre sert de référence pour étudier les écarts à l'équilibre lors de l'extinction de l'arc, iv) à partir de la composition et des valeurs des taux de réaction obtenues en stationnaire le code permet de calculer les vitesses de réaction et les temps de relaxation des diverses réactions chimiques. Ces grandeurs sont intéressantes et servent à connaître les réactions les plus probables, c'est à dire les espèces dominantes qui entrent en jeu dans une gamme de température donnée (cf. I-3.).

I-2-2. Choix des espèces et des réactions

La résolution en régime transitoire nécessite comme conditions initiales les valeurs de la composition du plasma en régime stationnaire. Nous avons séparé le domaine de température (12000 K - 300 K) en trois gammes. Cette séparation est nécessaire pour éviter de traiter des espèces qui deviennent très minoritaires dans certaines régions du domaine et qui de ce fait accroissent considérablement le temps de calcul.

La première gamme de température comprise entre 12000 K et 2100 K comporte 19 espèces : (e⁻, S, S⁻, S⁺, S₂, S₂⁺, F, F⁻, F⁺, F₂, F₂⁺, SF, SF⁻, SF⁺, SF₂, SF₃, SF₄, SF₅, SF₆).

Afin de ne pas augmenter le temps de calcul, les espèces très minoritaires telles que (SF₅⁺, SF₄⁺, SF₃⁺, SF₂⁺, F²⁺, S²⁺ ...) n'ont pas été retenues. En effet elles présentent une constante d'évolution dans le temps faible et nécessiteraient alors pour les décrire des pas de calcul très petits. De même les ions négatifs, F₂⁻, S₂⁻, SF₄⁻, SF₅⁻, SF₆⁻, en faible quantité dans la gamme de température considérée (2100 K < T < 12000 K) ne sont pas pris en compte. Une étude préalable sur les réactions a montré que ces espèces n'interviennent que faiblement dans le processus de capture

électronique. Pour cette gamme de température, nous avons considéré 66 réactions chimiques liant toutes ces espèces. Ces réactions ainsi que le taux direct associé sont listées dans l'annexe 1.

Pour la deuxième gamme (2100 K - 1000 K) nous n'avons retenu que 8 espèces (F, F₂, SF, SF₂, SF₃, SF₄, SF₅, SF₆) car en dessous de 2100 K les espèces chargées deviennent négligeables. Dans la troisième gamme (1000 K - 300 K) nous n'avons sélectionné que 5 espèces (F, F₂, SF₄, SF₅, SF₆).

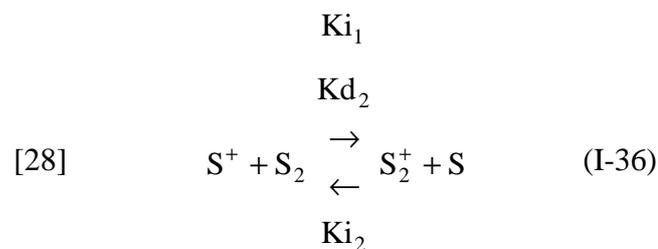
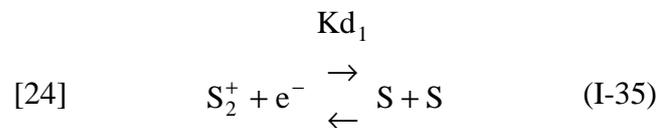
I-2-3. Equations

En régime stationnaire le terme de convection et le terme dépendant du temps de l'équation de conservation (I-2) sont nuls. Il y a équilibre entre le nombre de particules créées et le nombre de particules disparues, les équations de conservation s'écrivent :

$$S_i = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t} \right)_{C.R.} = Ca_i - n_i Da_i = 0 \quad \Rightarrow \quad n_i = \frac{Ca_i}{Da_i} \quad (I-34)$$

I-2-4. Expressions du terme source Ca et du terme de perte Da

Ces termes sont proportionnels au taux de réaction (direct et inverse) et aux densités des particules mises en jeu dans le processus. A titre d'exemple nous nous proposons d'étudier le cas de la réaction d'attachement dissociatif entre l'ion S₂⁺ et les électrons [24] et de la réaction d'échange d'ion entre S⁺ et S₂ [28].



Soient Kd₁ et Kd₂ les taux de réaction directs des processus [24] et [28], Ki₁ et Ki₂ les taux de réaction inverses des processus [24] et [28]. Nous nous proposons d'évaluer les termes sources

Ca et les termes pertes Da des espèces chimiques S₂⁺ et S au cours des deux réactions afin d'établir leurs équations de conservation.

Pour la réaction [24] nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
 - \text{ le taux de création de } S_2^+ &= K_{i_1} (n_S)^2 \\
 - \text{ le taux de disparition de } S_2^+ &= K_{d_1} n_{e^-} n_{S_2^+} \\
 - \text{ le taux de création de } S &= 2 K_{d_1} n_{e^-} n_{S_2^+} \\
 - \text{ le taux de disparition de } S &= 2 K_{i_1} (n_S)^2
 \end{aligned}$$

Pour la réaction [28] nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
 - \text{ le taux de création de } S_2^+ &= K_{d_2} n_{S^+} n_{S_2} \\
 - \text{ le taux de disparition de } S_2^+ &= K_{i_2} n_S n_{S_2^+} \\
 - \text{ le taux de création de } S &= K_{d_2} n_{S^+} n_{S_2} \\
 - \text{ le taux de disparition de } S &= K_{i_2} n_S n_{S_2^+}
 \end{aligned}$$

A partir de ces taux de réaction nous pouvons déterminer les termes sources et les termes pertes des espèces S₂⁺ et S relatifs à ces deux processus.

$$\left[Ca - n_{S_2^+} Da \right]_{S_2^+} = \left(K_{i_1} (n_S)^2 + K_{d_2} n_{S^+} n_{S_2} \right) - n_{S_2^+} \left(K_{d_1} n_{e^-} + K_{i_2} n_S \right) \quad (I-37)$$

$$[Ca - n_S Da]_S = \left(2 K_{d_1} n_{e^-} n_{S_2^+} + K_{d_2} n_{S^+} n_{S_2} \right) - n_S \left(2 K_{i_1} n_S + K_{i_2} n_{S_2^+} \right) \quad (I-38)$$

I-2-5. Calcul de la composition du plasma

La méthode de calcul de la composition du plasma d'arc de SF₆ en régime quasi-stationnaire à été détaillée par Habib [Ha-1]. Comme cela a été indiqué dans la thèse de Mbolidi [Mb-1], l'ensemble des équations (I-34) appliqué à toutes les espèces ne constitue pas un système d'équations indépendantes. Pour rendre le système indépendant et donc soluble, il faut remplacer trois équations de conservation par les trois lois de l'équilibre qui sont :

- la neutralité électrique.

- la conservation de la stoechiométrie du milieu
($M = \text{nombre d'atome de fluor} / \text{nombre d'atome de soufre} = 6$).
- la loi des gaz parfaits.

Le choix des équations qui doivent être remplacées tient compte d'un certain nombre de critères à savoir : i) la densité de l'espèce associée à chaque équation à remplacer doit, de préférence, être importante, ii) l'application de la loi de neutralité électrique exige que soit éliminée une des équations ayant pour solution la densité d'une particule chargée, iii) la loi de dissociation du SF_6 ne s'applique pas aux électrons. Les conditions où les trois lois de l'équilibre remplacent les trois équations de conservation pour une pression de 0.1 MPa sont :

- la neutralité électrique remplace la conservation des :
 - électrons de 12000 K à 8000 K
 - ions S^+ de 8000 K à 4700 K
 - ions S_2^+ de 4700 K à 2600 K
 - ions F^- de 2600 K à 2100 K
- la dissociation du SF_6 remplace la conservation des atomes S de 12000 K à 2800 K des :
 - molécules SF_2 de 2800 K à 2100 K
 - molécules SF_4 de 2100 K à 1800 K
 - atomes F de 1800 K à 300 K
- la loi des gaz parfaits remplace la conservation des
 - atomes F de 12000 K à 1800 K
 - molécules SF_6 de 1800 K à 300 K

Le système d'équations est résolu par la méthode de Newton-Raphson [No-1]. Pour aboutir à la composition réelle du plasma il faudrait tenir compte des processus radiatifs directs et inverses ; ils ne sont pris en compte qu'à travers le modèle collisionnel radiatif de recombinaison des ions atomiques S^+ et F^+ . Le plasma est dit en équilibre thermodynamique partiel. Par contre, en éliminant toutes les réactions faisant intervenir les processus radiatifs, notre modèle conduit à la composition d'équilibre du plasma, à cause de la micro-réversibilité des processus purement collisionnels.

I-2-5. Résultats

Les figures 1 et 2 montrent les variations des densités de particules en fonction de la température pour la pression atmosphérique (0.1 MPa). Les électrons ainsi que S⁺ constituent les espèces chargées dominantes de 12000 K à 4500 K, en dessous de cette température ce sont les espèces ioniques S₂⁺ et F⁻ qui sont majoritaires, parmi les espèces chargées, jusqu'à une température avoisinant les 2500 K. De même nous pouvons remarquer la recombinaison progressive des espèces polyatomiques aux basses températures. A partir de 1700 K le SF₆ se dissocie pour donner principalement du SF₄ et du fluor, ce qui explique leurs densités croissantes. Le SF₄ se dissocie vers 2100 K en SF₂, F et SF₃ qui se dissocient rapidement vers 2400 K et 2200 K. Ces dernières donnent F, SF et S₂, SF se dissociant à partir de 2800 K et S₂ à partir de 3000 K. Les espèces diatomiques SF et S₂ sont majoritaires devant F₂ pour une température comprise entre 3500 K et 6000 K. Pour valider notre modèle nous avons comparé la composition obtenue avec la composition calculée à l'aide d'un modèle d'équilibre [Ch-1]. Nous avons obtenu un bon accord entre les deux séries de résultats.

Afin de montrer l'influence de la pression nous avons tracé sur la figure 3 la composition calculée pour une pression de 0.4 MPa et sur la figure 4 le rapport entre les densités calculées à 0.4 MPa et les densités obtenues à la pression atmosphérique (0.1 MPa) pour une gamme de température comprise entre 2100 K et 12000 K. La figure 4 montre que le rapport des espèces majoritaires F et S vaut quatre. On remarque que dans cette gamme de température le rapport pour les espèces diatomiques peut être supérieur à 4 et peut atteindre des valeurs supérieures à 15. De même nous pouvons noter que le rapport pour les électrons est inférieur à 4 et que le rapport pour les espèces ionisées S₂⁺, F₂⁺ et F⁻ est supérieure à 4. Ces résultats montrent que la pression peut avoir une influence importante sur le comportement des densités et par conséquent sur les écarts à l'équilibre.

En prenant en compte ces différents résultats nous avons tabulé la composition en fonction de la température et pour une pression variant de 0.05 à 0.45 MPa. Le pas en température est de 10 K, précision nécessaire pour avoir une bonne interpolation lors du calcul des profils initiaux de densités à l'extinction. Les densités obtenues serviront de condition initiale et de référence pour le calcul en régime transitoire.

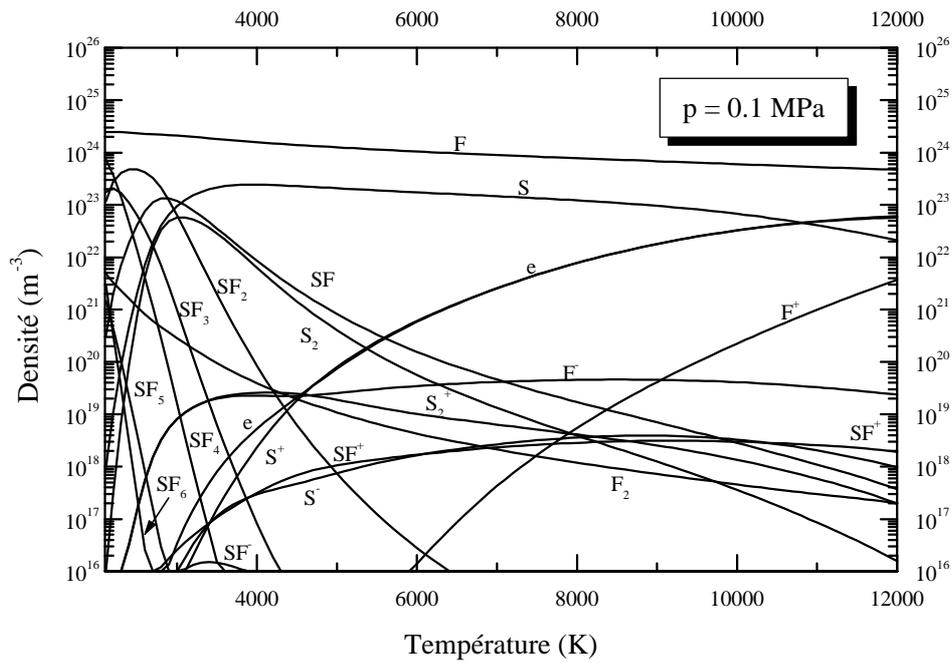


Figure 1 : Composition d'équilibre du SF₆ (2100 K < T < 12000 K, p = 0.1 MPa).

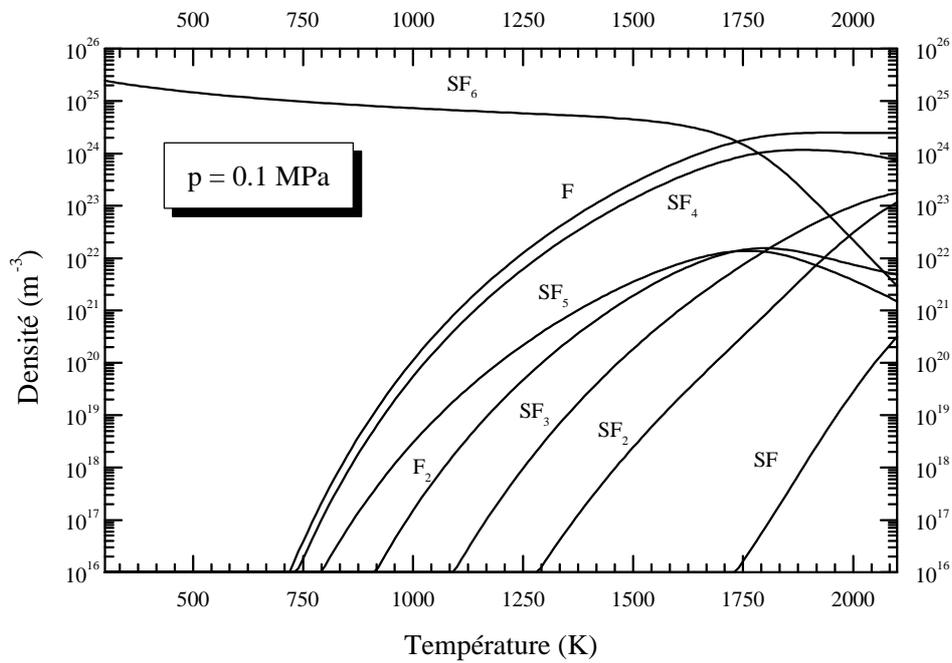


Figure 2 : Composition d'équilibre du SF₆ (300 K < T < 2100 K, p = 0.1 MPa).

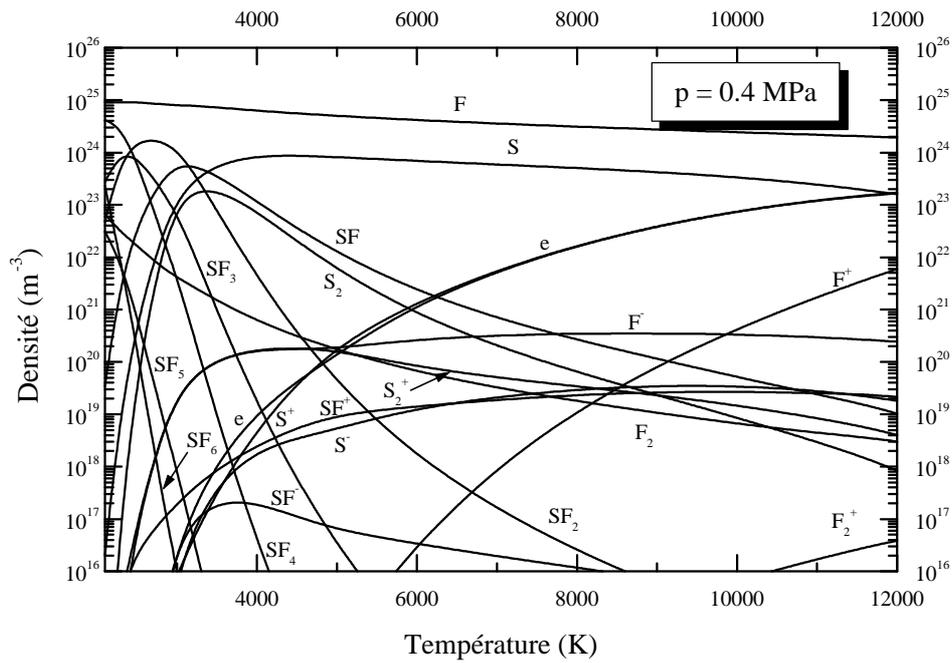


Figure 3 : Composition d'équilibre du SF₆ (2100 K < T < 12000 K, p = 0.4 MPa).

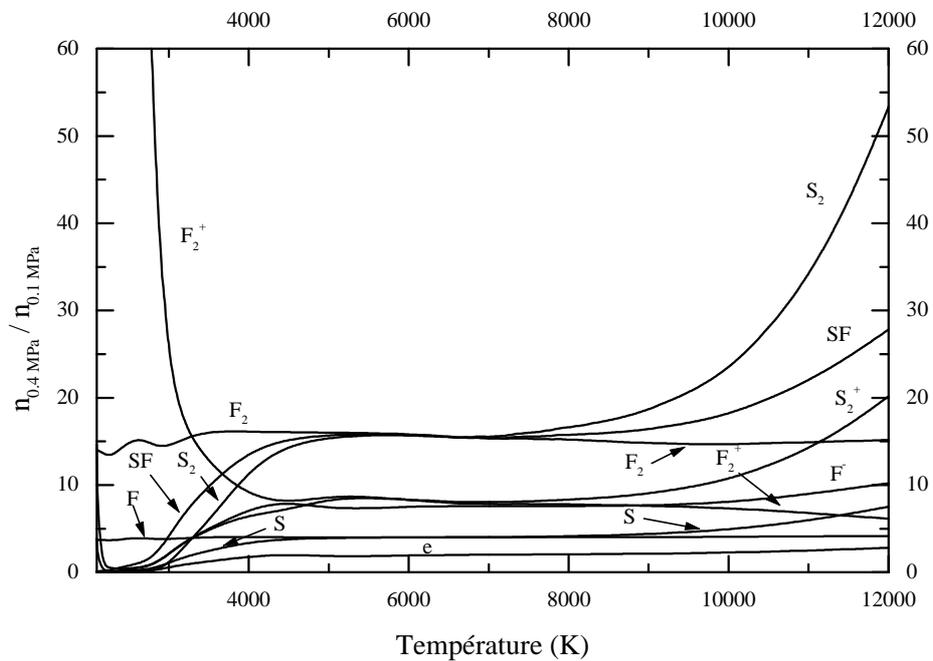


Figure 4 : Rapport ($n_{0.4 \text{ MPa}} / n_{0.1 \text{ MPa}}$) (2100 K < T < 12000 K).

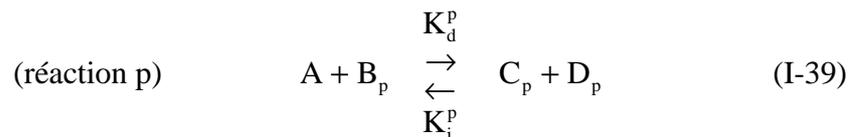
I-3. CINETIQUE CHIMIQUE DU SF₆

I-3-1. Motivations

Nous présentons dans cette partie une étude concernant la cinétique réactionnelle du SF₆. Au cours de l'extinction, le plasma est soumis à un fort soufflage, la colonne de plasma peut être localement coupée par une tranche de gaz froid à très faible conductivité électronique ce qui a pour effet de modifier la circulation du courant électrique. L'apport des particules froides, dans les zones chaudes du plasma, tend à faire disparaître les électrons. Nous essayerons dans cette étude, de connaître principalement quelles espèces favorisent la disparition des électrons et d'une manière générale de connaître quelles réactions dominent la disparition de chaque espèce.

I-3-2. Généralités

Soit le processus général (p) des réactions de dissociation ou de recombinaison des espèces atomiques et moléculaires :



Supposons que plusieurs processus soient les seuls mécanismes responsables de la disparition des particules A, alors le nombre de réactions par unité de temps des particules A dues à la réaction (p) (appelé fréquence de réaction) s'écrit :

$$K_d^p n_{B_p} = \frac{1}{\tau_p^A} \quad \text{(I-40)}$$

La fréquence de réaction est exprimée en fonction de l'inverse d'un temps τ_p^A . Pour l'ensemble des réactions concernant la particule A, la fréquence de réaction globale de la particule A s'écrit :

$$\sum_p K_d^p n_{B_p} \quad (\text{I-41})$$

A partir de la fréquence de réaction globale nous pouvons déterminer le temps global de relaxation de l'espèce A :

$$\tau^A = \frac{1}{\sum_p K_d^p n_{B_p}} \quad \text{ou encore} \quad \frac{1}{\tau^A} = \sum_p \frac{1}{\tau_p^A} \quad (\text{I-42})$$

En se donnant une vitesse des particules 'v', il est possible de remonter à une distance caractéristique 'd' de l'espèce A :

$$d = v \tau^A \quad (\text{I-43})$$

Comme le temps global de relaxation de l'espèce A est inversement proportionnel à la somme des fréquences de réaction (équation I-42), c'est la réaction qui aura la plus forte vitesse de réaction qui s'imposera dans le calcul du temps de relaxation globale et de la distance caractéristique.

I-3-4. Calcul des fréquences de disparition

La fréquence de disparition d'une espèce est par définition la fréquence de réaction qui rentre dans le processus de disparition de l'espèce considérée. Les équations considérées, pour le calcul des fréquences de disparition, sont données en annexe 1. Afin de mettre en évidence le processus dominant la disparition des espèces diatomiques nous avons calculé les fréquences de toutes les espèces à partir de la composition d'équilibre du SF₆ pour une température comprise entre 300 K et 12000 K et pour une pression fixée à 0.1 MPa. L'intérêt de ce type de calcul est de permettre de connaître les processus qui dominent la disparition de l'espèce que l'on considère

suivant la température. Sur les figures 5 à 13 nous avons tracé les fréquences de disparition pour quelques espèces, nous avons reporté les réactions qui dominent le processus de disparition pour ces espèces ainsi que pour les autres dans les tableaux 1 à 4.

I-3-4-1. Espèces polyatomiques

Lorsque la température est supérieure à 2500 K, les espèces polyatomiques SF₂, SF₃ et SF₄ se dissocient suivant la réaction du type SF_{X-1} + F ↔ SF_X (X=2,4), à plus basse température ce sont des réactions entre molécules polyatomiques qui dominent. Pour les molécules SF₅ et SF₆ seules les réactions introduisant F dominent la disparition de ces molécules. Prenons par exemple le cas de la molécule SF₅, pour une température comprise entre 300 K et 2100 K la réaction de dissociation qui domine est la réaction de formation du SF₆ ([19] SF₅ + F ↔ SF₆), à plus haute température le SF₅ se dissocie en SF₄ et F pour une température comprise entre 2100 K et 3400 K, puis se dissocie en SF₃ et F₂ pour une température comprise entre 3400 K et 12000 K.

Espèce	Gamme de température	Réactions dominantes
SF ₂	300 K < T < 850 K 850 K < T < 2350 K 2350 K < T < 12000 K	[44] SF ₆ + SF ₂ ↔ SF ₄ + SF ₄ [58] SF ₃ + SF ₃ ↔ SF ₂ + SF ₄ [47] F + SF ↔ SF ₂
SF ₃	300 K < T < 1350 K 1350 K < T < 3000 K 3000 K < T < 12000 K	[16] SF ₄ + F ↔ SF ₃ + F ₂ [56] SF ₃ + F ↔ SF ₄ [52] SF ₂ + F ↔ SF ₃
SF ₄	300 K < T < 400 K 400 K < T < 850 K 850 K < T < 1350 K 1350 K < T < 12000 K	[16] SF ₄ + F ↔ SF ₃ + F ₂ [20] SF ₅ + SF ₅ ↔ SF ₄ + SF ₆ [16] SF ₄ + F ↔ SF ₃ + F ₂ [56] SF ₃ + F ↔ SF ₄
SF ₅	300 K < T < 2100 K 2100 K < T < 3400 K 3400 K < T < 12000 K	[19] SF ₅ + F ↔ SF ₆ [18] SF ₄ + F ↔ SF ₅ [60] SF ₃ + F ₂ ↔ SF ₅
SF ₆	300 K < T < 400 K 400 K < T < 4050 K 4050 K < T < 12000 K	[20] SF ₅ + SF ₅ ↔ SF ₄ + SF ₆ [19] SF ₅ + F ↔ SF ₆ [12] SF ₄ + F ₂ ↔ SF ₆

Tableau 1 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces polyatomiques.

Dans le cas du SF₆ la réaction de dissociation en SF₅ et en F est dominante (réaction [19]), mais on peut remarquer sur les figures 5 et 6 que l'ordre de grandeur de la fréquence de réaction de

dissociation du SF₆ (figure 5, réaction inverse [19]) est soit inférieure à la fréquence de recombinaison du SF₆ (figure 6, réaction directe [19]) qui se produit à basse température ou soit supérieure ce qui se produit à plus haute température.

Ce simple exemple sur les processus réactifs du SF₅ et SF₆ montre qu'il est important de tenir compte des deux sens de la réaction pour savoir si il y a création ou disparition de l'espèce que l'on considère ; par contre l'exemple montre le type de réaction qui domine le processus de disparition. On remarque que les ordres de grandeur des fréquences de disparition des molécules polyatomiques SF_X (X=2,6) à haute température dépasse les 10¹⁰ s⁻¹ et peuvent atteindre les 10¹³ s⁻¹ à 12000 K caractérisant ainsi une faible probabilité de trouver ces espèces.

I-3-4-2. Espèces monoatomiques

Pour une température comprise entre 300 K et 8300 K, les processus qui dominent la disparition du fluor sont du type SF_{X-1} + F ↔ SF_X. On constate que le fluor s'associe à des molécules polyatomiques comportant un nombre impair d'atomes de fluor, ce nombre est d'autant plus important quand la température baisse. Pour le soufre les processus qui dominent la disparition, mettent en jeu de préférence les molécules diatomiques (SF, F₂) à basse température (T < 5900 K), contrairement au fluor. Entre 5900 K et 8390 K les atomes de soufre réagissent entre eux pour donner S₂⁺ et des électrons.

Espèce	Gamme de température	Réactions dominantes
S	300 K < T < 2000 K	[46] F + SF ↔ F ₂ + S
	2000 K < T < 4130 K	[50] SF + SF ↔ S + SF ₂
	4130 K < T < 5900 K	[46] F + SF ↔ F ₂ + S
	5900 K < T < 8390 K	[24] S ₂ ⁺ + e ↔ S + S
	8390 K < T < 12000 K	[2] S ⁺ + e + e ↔ S + e
F	300 K < T < 1600 K	[19] SF ₅ + F ↔ SF ₆
	1600 K < T < 2600 K	[56] SF ₃ + F ↔ SF ₄
	2600 K < T < 8300 K	[47] F + SF ↔ SF ₂
	8300 K < T < 12000 K	[23] SF ⁺ + e ↔ S + F

Tableau 2 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces monoatomiques.

I-3-4-3. Espèces diatomiques

Dans le cas des molécules diatomiques (figures 7 à 9) nous nous intéresserons uniquement au phénomène concernant la capture électronique. Pour les molécules F_2 et SF la capture électronique se produit à partir de 8020 K pour F_2 , formant les espèces F^- et F, et 10000 K pour SF, formant les espèces F^- et S. Pour la molécule S_2 c'est la réaction d'échange de charge avec S^+ qui est prépondérante, cette réaction donne l'ion S_2^+ et du soufre.

Espèce	Gamme de température	Réactions dominantes
F_2	300 K < T < 1000 K	[14] $SF_5 + F_2 \leftrightarrow SF_6 + F$
	1000 K < T < 2500 K	[16] $SF_4 + F \leftrightarrow SF_3 + F_2$
	2500 K < T < 3180 K	[45] $SF + SF \leftrightarrow F_2 + S_2$
	3180 K < T < 8020 K	[46] $F + SF \leftrightarrow F_2 + S$
	8020 K < T < 12000 K	[64] $F_2 + e \leftrightarrow F^- + F$
SF	300 K < T < 10000 K	[47] $F + SF \leftrightarrow SF_2$
	10000 K < T < 12000 K	[64] $SF + e \leftrightarrow F^- + S$
S_2	300 K < T < 4540 K	[45] $SF + SF \leftrightarrow F_2 + S_2$
	4540 K < T < 12000 K	[28] $S^+ + S_2 \leftrightarrow S_2^+ + S$

Tableau 3 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces diatomiques.

I-3-4-4. Espèces ionisées

Les résultats concernant la disparition des électrons (figure 10) montrent que pour une température inférieure à 4280 K les électrons disparaissent principalement par attachement dissociatif avec les molécules diatomiques F_2 (300 K < T < 2500 K) et SF (2500 K < T < 4280 K). Pour une température comprise entre 4280 K et 7500 K c'est l'attachement dissociatif avec S_2^+ qui est dominant ([24] $S_2^+ + e \leftrightarrow S + S$) puis à plus haute température, les électrons devenant de plus en plus nombreux, les espèces diatomiques plus rares, c'est la réaction avec S^+ qui domine. Dans le cas de S_2^+ , le processus d'attachement dissociatif avec les électrons est principalement responsable de la disparition de S_2^+ (réaction [24]) pour une température comprise entre 4920 K et 12000 K. C'est ce même type de réaction qui est responsable de la disparition de SF^+ (réaction [23]) pour une température supérieure à 5230 K et de la disparition de F_2^+ (réaction [25]) pour une température supérieure à 6400 K. Nous remarquons d'après les figures 11 et 12 que les fréquences de disparition

de SF⁺ et de S₂⁺ (réactions [23] et [24] respectivement) sont du même ordre de grandeur, tandis que la fréquence de disparition de F₂⁺ est inférieure à celles des deux précédentes. Comme la densité de S₂⁺ est supérieure à celles de SF⁺ et de F₂⁺ c'est la réaction [24] qui dominera le processus de capture électronique par rapport aux réactions [23] et [25].

Espèce	Gamme de température	Réactions dominantes
électrons	300 K < T < 2500 K 2500 K < T < 4280 K 4280 K < T < 7500 K 7500 K < T < 12000 K	[64] F ₂ + e ↔ F ⁻ + F [65] SF + e ↔ F ⁻ + S [24] S ₂ ⁺ + e ↔ S + S [2] S ⁺ + e + e ↔ S + e (sens →)
S ⁻	300 K < T < 1700 K 1700 K < T < 1900 K 1900 K < T < 4850 K 4850 K < T < 12000 K	[4] F + S ⁻ + F ↔ SF ⁻ + F [34] S + e + F ↔ S ⁻ + F [27] S ⁻ + SF ↔ S + SF ⁻ [34] S + e + F ↔ S ⁻ + F
F ⁻	300 K < T < 2550 K 2550 K < T < 8950 K 8950 K < T < 12000 K	[64] F ₂ + e ↔ F ⁻ + F [65] SF + e ↔ F ⁻ + S [64] F ₂ + e ↔ F ⁻ + F
SF ⁻	300 K < T < 2150 K 2150 K < T < 12000 K	[3] S + F ⁻ + F ↔ SF ⁻ + F [4] F + S ⁻ + F ↔ SF ⁻ + F
S ⁺	300 K < T < 2200 K 2200 K < T < 3300 K 3300 K < T < 4100 K 4100 K < T < 12000 K	[22] S ⁺ + F ₂ ↔ SF ⁺ + F [21] S ⁺ + SF ↔ S ₂ ⁺ + F [28] S ⁺ + S ₂ ↔ S ₂ ⁺ + S [21] S ⁺ + SF ↔ S ₂ ⁺ + F
F ⁺	300 K < T < 2100 K 2150 K < T < 9450 K 9450 K < T < 12000 K	[32] F ⁺ + F ₂ ↔ F ₂ ⁺ + F [7] F ⁺ + S + F ↔ SF ⁺ + F [1] F ⁺ + e + e ↔ F + e
SF ⁺	300 K < T < 2320 K 2320 K < T < 5210 K 5210 K < T < 12000 K	[22] S ⁺ + F ₂ ↔ SF ⁺ + F [29] S ⁺ + SF ↔ SF ⁺ + S [23] SF ⁺ + e ↔ S + F
F ₂ ⁺	300 K < T < 6400 K 6400 K < T < 12000 K	[32] F ⁺ + F ₂ ↔ F ₂ ⁺ + F [25] F ₂ ⁺ + e ↔ F + F
S ₂ ⁺	300 K < T < 3300 K 3300 K < T < 4000 K 4000 K < T < 4920 K 4920 K < T < 12000 K	[21] S ⁺ + SF ↔ S ₂ ⁺ + F [28] S ⁺ + S ₂ ↔ S ₂ ⁺ + S [21] S ⁺ + SF ↔ S ₂ ⁺ + F [24] S ₂ ⁺ + e ↔ S + S

Tableau 4 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces ionisées.

Examinons la gamme de température comprise entre 5000 K et 8000 K ; cette gamme de température est celle qui nous intéresse. En effet c'est à partir de 5000 K que la conductivité électrique devient importante. Nous avons vu que le processus dominant la capture électronique est l'attachement dissociatif avec S₂⁺ ([24] S₂⁺ + e ↔ S + S) de même que l'ion S₂⁺ est principalement

créé par échange de charge entre l'ion S^+ et la molécule diatomique S_2 ($S^+ + S_2 \leftrightarrow S_2^+ + S$). Ces résultats confirment l'importance du rôle joué par l'espèce S_2 qui indirectement est responsable de la disparition des électrons à moyenne température. Par ailleurs, le processus dominant la disparition de SF^+ , pour une température supérieure à 5000 K, est le processus d'attachement dissociatif avec les électrons ; ce processus reste négligeable devant le processus d'attachement dissociatif entre les électrons et S_2 .

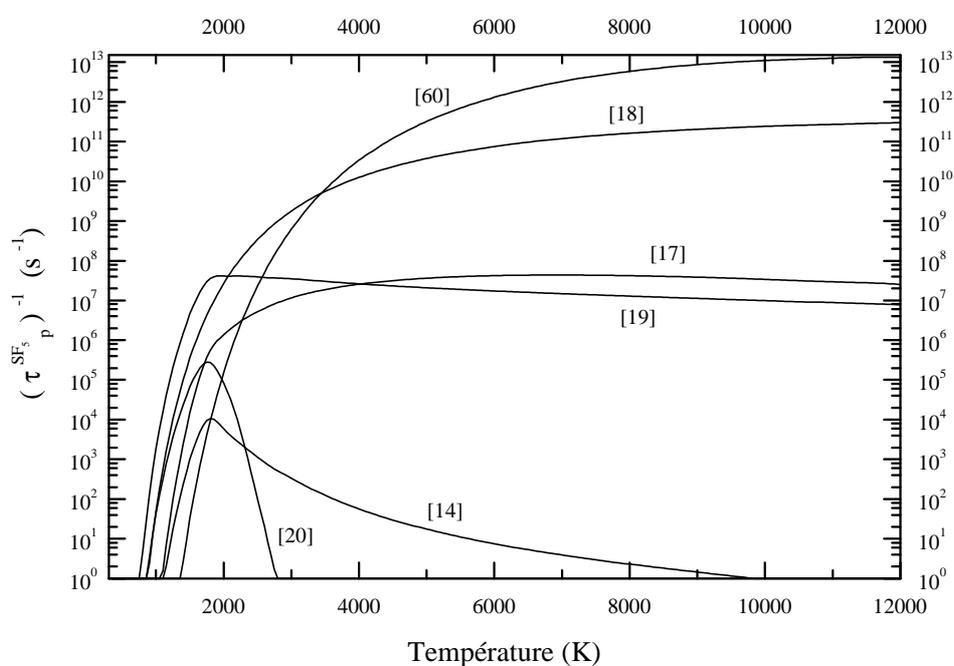


Figure 5 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF_5).

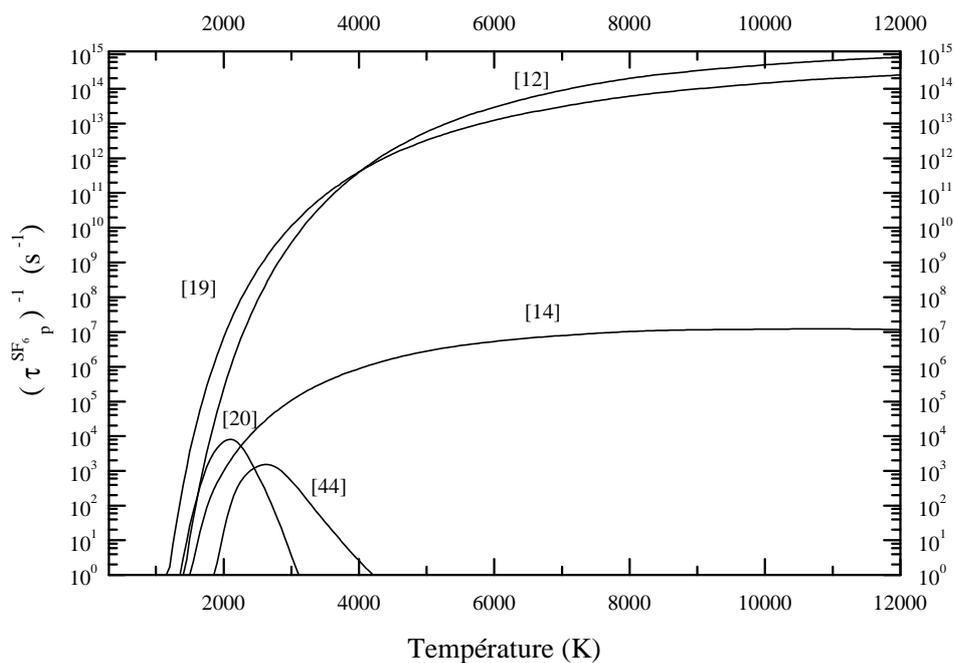


Figure 6 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF₆).

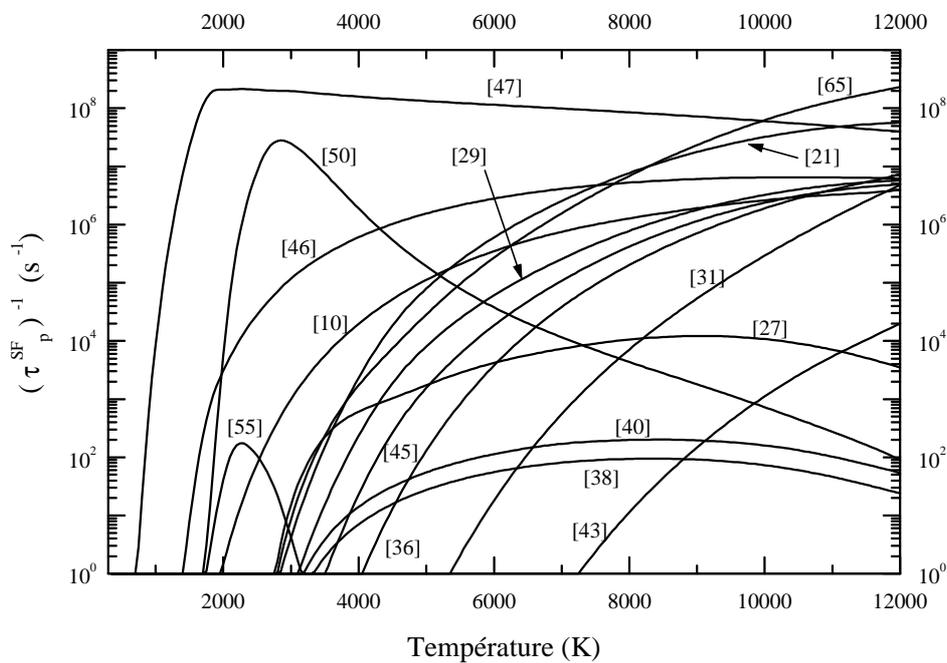


Figure 7 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF).

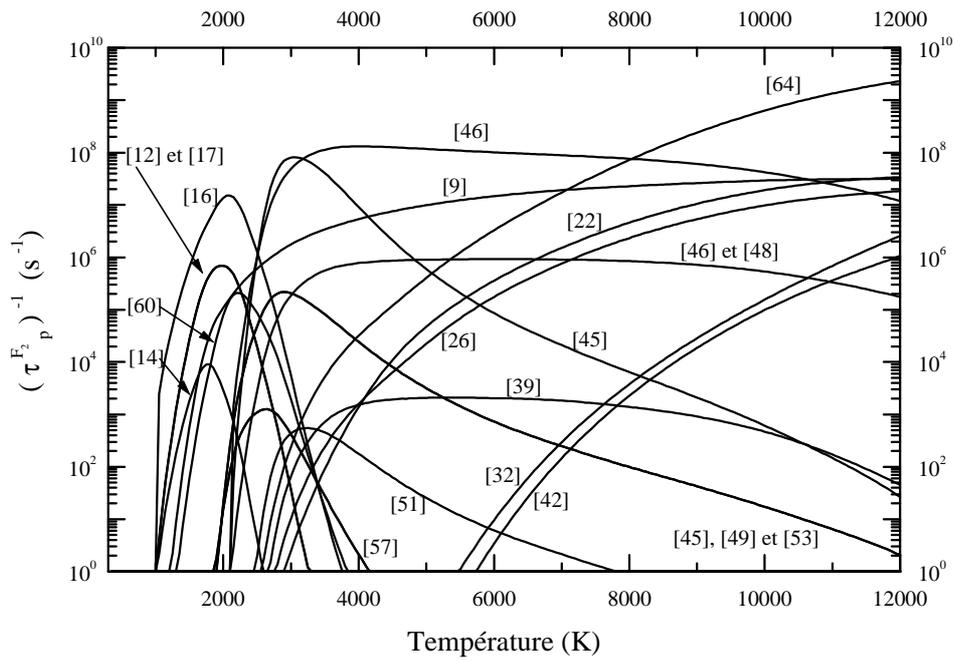


Figure 8 : Fréquences de disparition en fonction de la température (F_2).

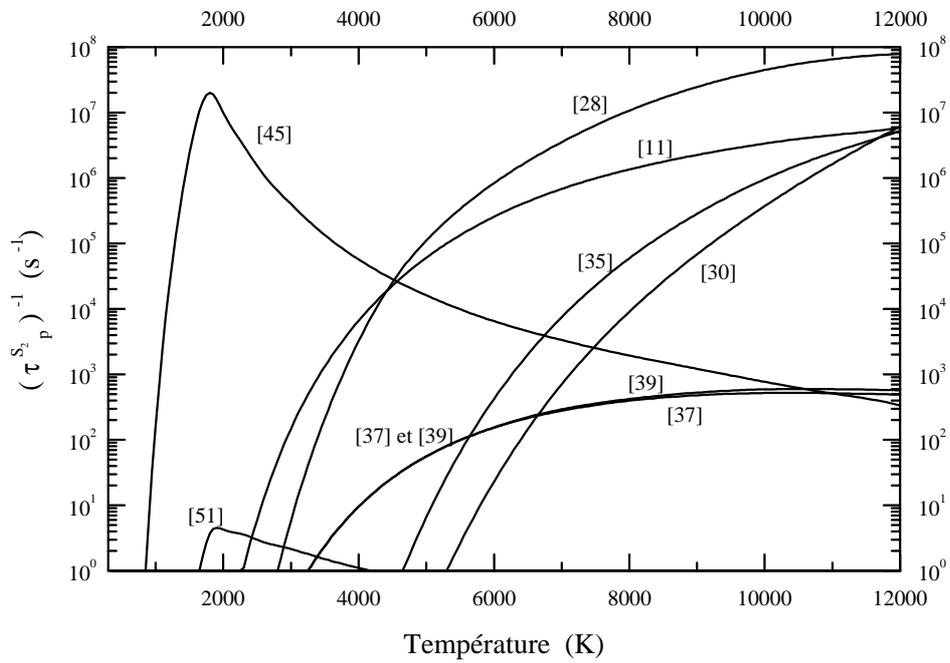


Figure 9 : Fréquences de disparition en fonction de la température (S_2).

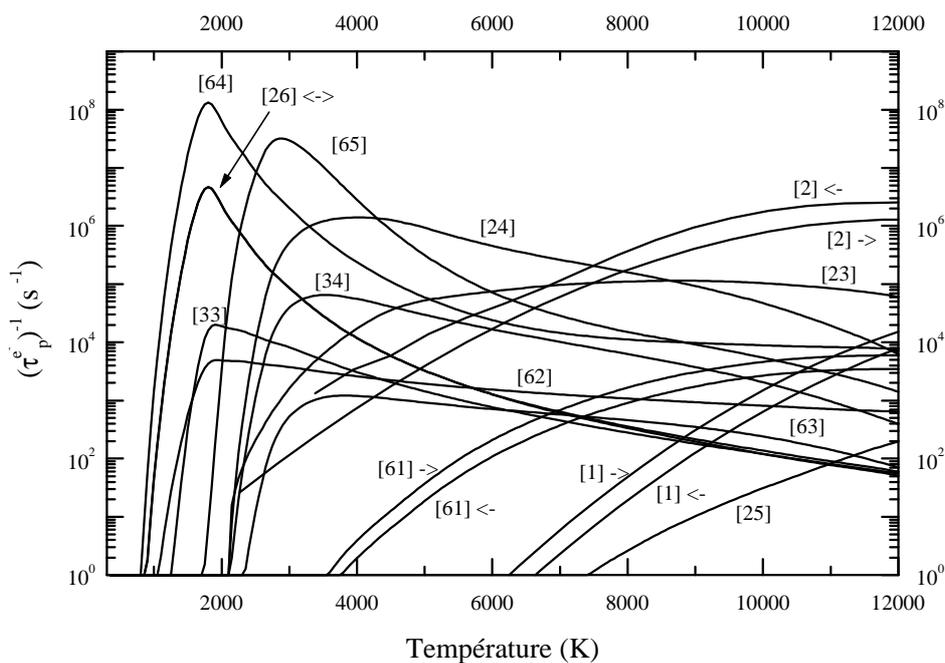


Figure 10 : Fréquences de disparition en fonction de la température (électron).

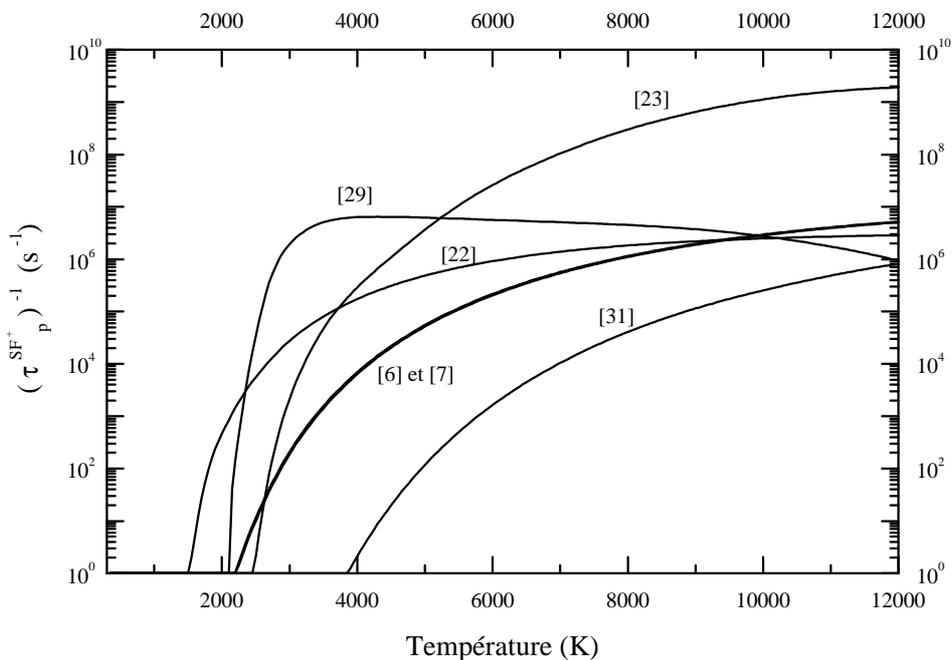


Figure 11 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF⁺).

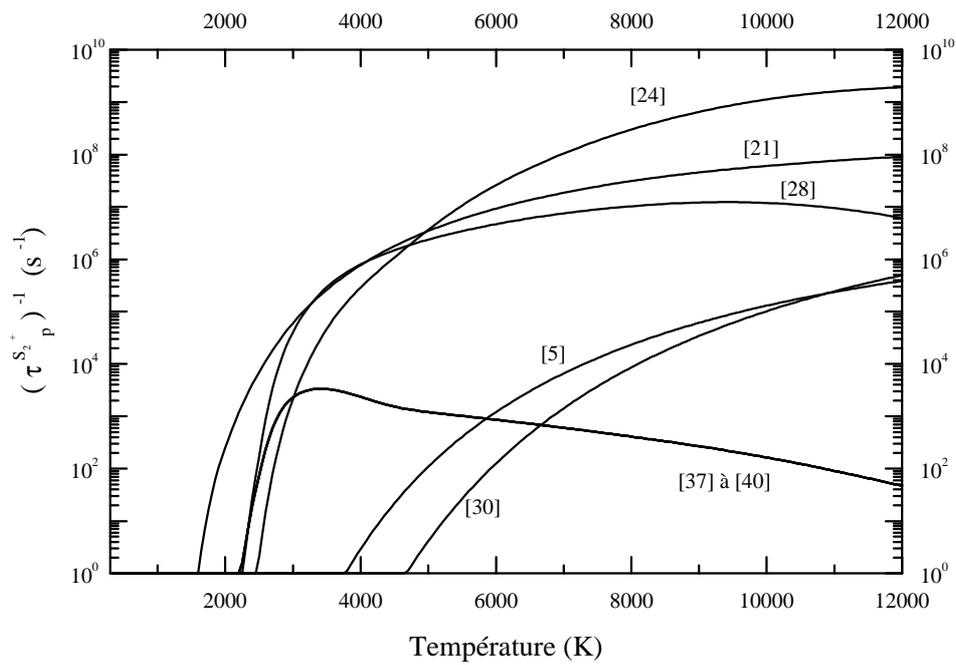


Figure 12 : Fréquences de disparition en fonction de la température (S_2^+).

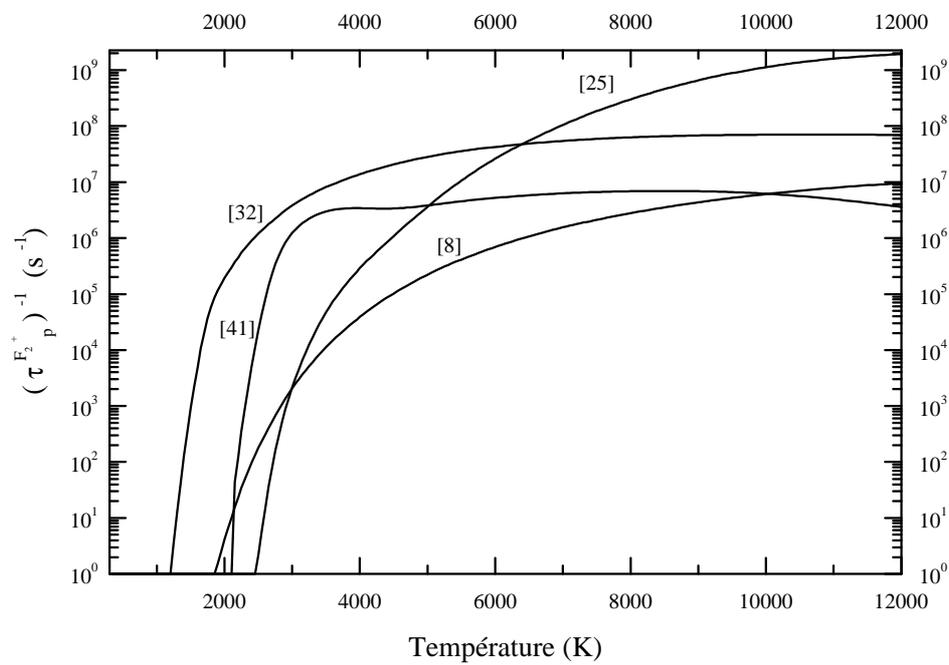


Figure 13 : Fréquences de disparition en fonction de la température (F_2^+).

I-3-5. Calcul des portées

Nous avons tracé sur la figure 14 la distance 'd' (équation I-43) en fonction de la température pour une vitesse égale à 10 m.s⁻¹ (ordre de grandeur de la vitesse radiale dans les arcs stabilisé par parois) pour les espèces moléculaires (SF_X, X=2,6) et pour les espèces diatomiques.

Pour les espèces moléculaires, l'augmentation de la température entraîne une forte diminution de 'd'. A 2500 K les valeurs de 'd' sont comprises entre 10⁻⁸ et 10⁻⁷ m, traduisant une forte dissociation de ces espèces et donc une faible probabilité de les trouver. De même, nous voyons que pour le SF₆, la pénétration dans les régions où la température est supérieure à 2000 K est très faible, puisqu'elle n'est déjà que d'environ de 10⁻⁹ m à 3000 K. Les calculs de composition à l'équilibre montrent que la région de température où la densité électronique n'est pas négligeable par rapport à celle des densités des autres particules chargées se situe au-dessus de 3000 K. Les résultats de la figure 14 montrent que les molécules polyatomiques (SF₂ jusqu'à SF₆) ont peu de chance de pénétrer significativement dans ces régions, même si dans un disjoncteur, les vitesses de convection sont très supérieures à la valeur considérée ici (10 m.s⁻¹). En effet, même en prenant une valeur de 10³ m.s⁻¹, les distances de pénétration de ces espèces dans les régions chaudes sont inférieures à, ou de l'ordre de 10⁻⁵ m. La conséquence de ces résultats est que les densités des molécules polyatomiques auront des valeurs très proches de la composition d'équilibre, ce qui permettra à l'avenir de simplifier le modèle cinétique en ne résolvant pas, en première approximation, les équations de conservation de ces espèces.

Les résultats relatifs aux espèces diatomiques révèlent plusieurs commentaires : la courbe de SF décroît fortement entre 1000 K et 1500 K et atteint son minimum (10⁻⁷ m) à T = 1700 K. La courbe de F₂ présente deux extrêmes, un maximum situé à 2450 K pour une valeur de 'd' égale 5 10⁻⁶ m et un minimum à 2080 K (8 10⁻⁷ m). A haute température la portée reste faible (inférieure à 10⁻⁷ m), les molécules de F₂ sont fortement dissociées en F. A partir de 8100 K l'augmentation de la densité électronique entraîne la disparition de F₂ par attachement dissociatif. La courbe de S₂ montre qu'il existe deux extrêmes, un minimum à 1440 K et un maximum à 4190 K, à cette température la portée est supérieure à 10⁻⁴ m. La réaction, qui dominait entre 300 K et 4400 K (SF + SF ↔ F₂ + S₂), tend à diminuer, ce qui est favorisé par une baisse de F₂. A partir de 4400 K, la réaction qui domine, tend à créer l'ion S₂⁺. A haute température la portée de S₂ reste supérieure à celles des molécules F₂ et SF, à 12000 K la portée est d'environ 10⁻⁶ m. Nous pouvons expliquer ce résultat à

partir de l'analyse des processus réactionnels de disparition de ces espèces. En effet le tableau 3 montre que pour une température comprise entre 3000 K et 8000 K les mécanismes de disparition des espèces SF et F₂ qui entrent en jeu (respectivement les équations [47] et [46]) font intervenir des espèces majoritaires (F et S) et des espèces appartenant à la chaîne directe de dissociation du SF₆ (SF₂). La conséquence est que les espèces SF et F₂ resteront de préférence en équilibre stoechiométrique avec les espèces F, S et SF₂. Pour l'espèce S₂, les réactions qui dominent la disparition font intervenir des espèces dérivées qui sont minoritaires devant F et qui n'appartiennent pas à la chaîne de dissociation du SF₆. Ce résultat explique le fait qu'il existe une zone où la fréquence de disparition maximale de toutes les fréquences de disparition de S₂ (figure 9) atteint un minimum à 4540 K. Ce minimum correspond au maximum que nous avons sur la figure 14.

Ces résultats montrent que les portées des espèces diatomiques (S₂, SF et F₂), nettement plus stables à haute température, sont très supérieures à celles des molécules polyatomiques. Si l'effet de convection sur la densité électronique se manifeste, c'est à travers les molécules diatomiques qu'il aura lieu et en particulier à travers l'espèce S₂ qui présente une portée bien supérieure aux portées de SF et de F₂ dans la région où la température est comprise entre 3000 K et 7000 K.

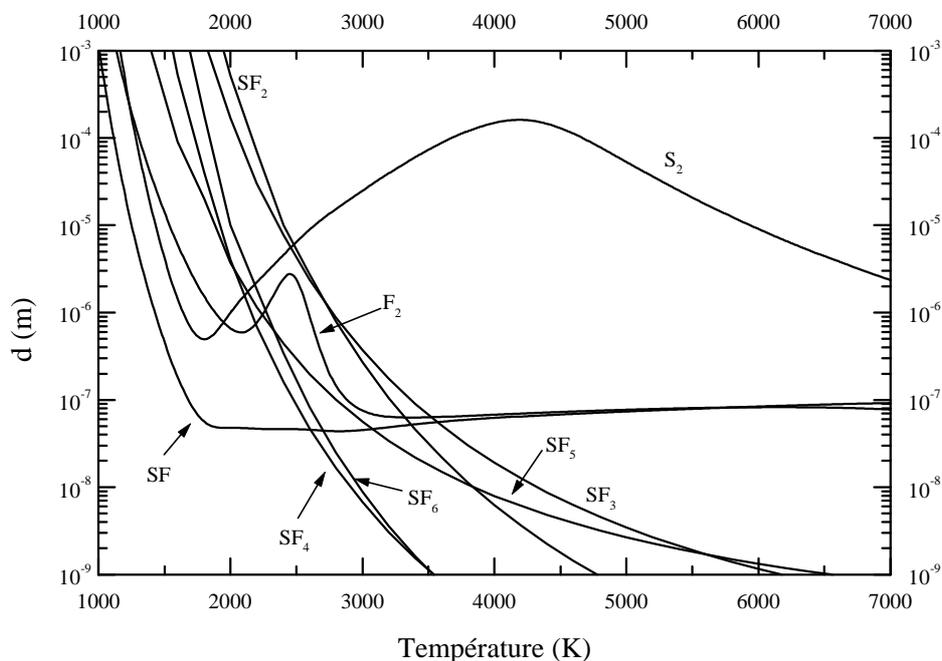


Figure 14 : Portée des espèces pour une vitesse égale à 10 m.s⁻¹.

I-4. CONCLUSION

Dans ce premier chapitre nous avons posé les bases du modèle cinétique du plasma d'arc en régime stationnaire du SF₆. Nous disposons maintenant d'un modèle réactionnel qui nous a permis dans un premier temps de calculer la composition du plasma à partir des taux de réactions directs et inverses, et dans un second temps d'écarter les espèces minoritaires F₂⁻, SF₄⁻, SF₅⁻, et SF₆⁻. Ce modèle, validé en régime stationnaire, servira de base pour développer un modèle cinétique en régime transitoire, la composition à l'équilibre permettra d'une part à initialiser le modèle transitoire et d'autre part à étudier les écarts à l'équilibre lors de l'extinction de l'arc.

Les calculs des vitesses de réaction ainsi que des portées des espèces, développés dans ce chapitre, ont permis d'une part de confirmer le rôle peu important des molécules polyatomiques pour la capture électronique, ce qui est confirmé par leurs faibles probabilités de pénétrer dans les régions chaudes du plasma. D'autre part nous avons mis en évidence le processus de capture des électrons pour des températures comprises entre 5000 K et 7000 K. Les électrons sont essentiellement capturés par attachement dissociatif avec S₂⁺. L'espèce S₂⁺ est produite par échange de charge entre S⁺ et S₂.

CHAPITRE II

MODELISATION MATHEMATIQUE ET METHODE NUMERIQUE

CHAPITRE II- MODELISATION MATHEMATIQUE ET

METHODE NUMERIQUE

II-1. GENERALITES

La réalisation du modèle de l'arc électrique est faite avec les hypothèses simplificatrices suivantes :

- Le plasma est établi dans un milieu de SF₆ pur en équilibre thermodynamique local (ETL). L'ETL est réalisé lorsque le nombre de désexcitations par transitions radiatives est négligeable devant le nombre d'excitations ou de désexcitations d'un niveau par collisions électroniques quel que soit le niveau considéré. Le plasma est alors constitué par la juxtaposition de volumes élémentaires suffisamment petits pour que l'on puisse considérer une unique température ($T = T_e = T_i = T_g$). Cette hypothèse n'englobe pas le fait qu'un écart à la composition chimique puisse exister.

- Le plasma présente une symétrie de révolution autour de l'axe x et nous utiliserons une représentation en coordonnées cylindriques (r, x).

- Nous supposons que le fluide est caractérisé par un écoulement laminaire.

- Les calculs de composition chimique ont été faits dans l'hypothèse de l'ETL. A partir de cette composition les propriétés thermodynamiques et les coefficients de transport intervenant dans les codes ne sont fonction que de la température T et de la pression p.

- La diffusion des espèces ainsi que les phénomènes de démixion sont négligeables. La vitesse de chaque espèce est donc égale à la vitesse du mouvement d'ensemble du fluide.

Nous présentons dans ce chapitre un bref rappel des bases hydrodynamiques que nous allons utiliser pour modéliser l'arc en extinction. Le modèle mathématique est constitué par un groupe d'équations d'évolution macroscopique aux dérivées partielles. Les grandeurs à calculer sont la température, l'enthalpie, les vitesses et les densités ; celles-ci, en coordonnées cylindriques sont fonctions des variables locales r (distance radiale) et x (distance axiale) et de la variable temporelle t. Ces équations sont toutes déterminées de la même manière, en définissant des équations microscopiques relatives à chaque particule à partir de l'équation statistique de Boltzmann. Nous détaillerons, dans ce chapitre, uniquement le passage de l'équation de conservation de continuité des espèces à l'équation de conservation de la masse. Nous rappellerons la méthode que nous avons

utilisée pour discrétiser les équations macroscopiques et plus particulièrement nous approfondirons la discrétisation de l'équation de conservation des espèces.

II-2. EQUATIONS

II-2-1. L'équation de conservation de la masse

Quand on traite le plasma en tant que fluide on peut écrire les équations de transport macroscopiques à partir des équations microscopiques, le plasma est alors considéré comme un fluide conducteur. L'équation de conservation de la masse peut être alors déterminée à partir de l'équation de continuité des espèces (équation I-2), en sommant sur chaque type de particule (électrons, ions, neutres).

Les équations élémentaires de conservation de la masse sont directement obtenues des équations de continuité des densités multipliées par la masse de l'espèce correspondante.

$$\frac{\partial}{\partial t} (m_i n_i) + \text{div} (m_i n_i \vec{v}_i) = m_i S_i \quad (\text{II-1})$$

Soit - la densité de masse totale :

$$\rho = \sum_i n_i m_i \quad (\text{II-2})$$

- la vitesse moyenne dirigée de toutes les espèces :

$$\vec{v} = \frac{\sum_i n_i m_i \vec{v}_i}{\sum_i n_i m_i} \quad (\text{II-3})$$

En sommant les équations élémentaires de conservation de la masse sur toutes les espèces et sachant que la sommation du terme source est nulle on retrouve l'équation de continuité macroscopique associée aux grandeurs ρ et \vec{v} :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0 \quad (\text{II-4})$$

II-2-2. L'équation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation différentielle gouvernant la conservation de la quantité de mouvement s'écrit pour un fluide newtonien sous la forme :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}(\vec{v}) + \rho \left(\vec{v} \cdot \text{grad} \right) \vec{v} = - \text{grad} p + \text{div} \bar{\tau} + \vec{j} \wedge \vec{B} + \rho \vec{g} + e(n_i - n_e) \vec{E} \quad (\text{II-5})$$

Où la force de gravité $\rho \vec{g}$ est généralement considérée comme négligeable ainsi que la force électrique $e(n_i - n_e) \vec{E}$, du fait de la neutralité globale du plasma. Le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\tau}$, pour un fluide newtonien, s'exprime sous la forme suivante :

$$\bar{\tau} = \left(-\frac{2}{3} \mu \text{div} \vec{u} \right) \bar{I} + \mu \cdot \left(\overline{\text{grad} \vec{u}} + \overline{\text{grad}_t \vec{u}} \right) \quad (\text{II-6})$$

où \bar{I} représente la matrice unité et $\overline{\text{grad}_t}$ l'opérateur transposé de l'opérateur gradient.

II-2-3. L'équation de l'énergie

L'équation générale du bilan d'énergie s'écrit :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t}(h) + \rho \left(\vec{v} \cdot \text{grad} \right) h = \frac{\partial p}{\partial t} - \text{div} \vec{Q} + \vec{u} \cdot \text{grad} p + \bar{\tau} \cdot \overline{\text{grad} \vec{u}} + \vec{j} \cdot \vec{E} - u_R \quad (\text{II-7})$$

Le terme de dissipation visqueuse $\bar{\tau} \cdot \overline{\text{grad} \vec{u}}$ et le terme instationnaire de pression $\partial p / \partial t$ sont négligés. Le flux de conduction thermique \vec{Q} est donné par la loi de Fourier :

$$\vec{Q} = -K \vec{\text{grad}} T \quad (\text{II-8})$$

A pression constante l'enthalpie et la température sont liées par la relation suivante :

$$C_p = \frac{\partial h}{\partial T} \quad (\text{II-9})$$

II-2-4. Equations électromagnétiques

La loi d'Ohm sert au calcul de l'intensité. Par définition I correspond à l'intensité totale du courant électrique traversant une surface fermée quelconque (S) s'appuyant sur un contour (C), celle-ci est reliée à la densité de courant par :

$$I = \iint_{(S)} \vec{j} \cdot \vec{n} \, ds \quad (\text{II-10})$$

Dans le cas d'un arc axisymétrique I s'écrit :

$$I = \int_0^R j_x 2\pi r \, dr \quad (\text{II-11})$$

La densité du courant est reliée directement au champ électrique :

$$j_x = \sigma E_x \quad (\text{II-12})$$

Le champ électrique étant supposé constant radialement, il peut être sorti de l'intégrale, et l'intensité s'exprime en fonction de la conductance G par :

$$I = E_x \times G \quad (\text{II-13})$$

avec

$$G = 2\pi \int_0^R \sigma r \, dr \quad (\text{II-14})$$

soit
$$I = 2\pi E_x \int_0^R \sigma r dr \quad (\text{II-15})$$

Dans la colonne d'arc axisymétrique, le champ magnétique induit par la densité de courant \vec{j} est déterminé à partir du théorème de Maxwell-Ampère :

$$\oint_{(C)} \left(\frac{\vec{B}}{\mu_0} \right) d\vec{l} - \iint_{(S)} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_0 \vec{E}) \cdot \vec{n} dS = I \quad (\text{II-16})$$

Dans notre géométrie bidimensionnelle associée au repère (r,x) axisymétrique, on suppose que le champ magnétique n'a qu'une composante azimutale ; à l'état stationnaire on a :

$$B_\theta = \frac{\mu_0}{r} \int_0^r j_x \xi d\xi \quad (\text{II-17})$$

II-2-5. Les équations de couplage

Les équations qui couplent les grandeurs microscopiques aux grandeurs macroscopiques sont l'équation (II-2) et la loi des gaz parfaits (II-18).

$$\rho = \sum_i n_i m_i \quad (\text{II-2})$$

$$p = \sum_i n_i k_b T \quad (\text{II-18})$$

II-3. METHODE DE DISCRETISATION

II-3-1. Principe

Le plasma est gouverné par un système d'équations différentielles non linéaires ; ces équations sont résolues par la méthode des volumes finis de Patankar [Pa-1]. Le traitement numérique des phénomènes physiques tels que le transfert de chaleur, l'écoulement de fluides ou tout autre processus similaire, peut être entrepris dès lors que les équations continues régissant ces processus physiques ont été exprimées sous forme d'équations discrétisées. Les équations de conservation peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho\bar{u}\phi) = \text{div}\left(\Gamma \vec{\text{grad}}\phi\right) + S \quad (\text{II-19})$$

Où ϕ représente une variable fonction du temps et des trois coordonnées d'espace et Γ le coefficient de diffusion associé à la grandeur ϕ . Cette équation de bilan fait intervenir quatre termes : un terme instationnaire (ou transitoire), un autre représentant la convection, le troisième la diffusion et S le terme source.

ϕ	Γ	Equation de conservation de
1	0	la masse
\bar{u}	μ	la quantité de mouvement
h	K/C_p	de l'énergie

Tableau 5 : Variables de l'équation de conservation généralisée.

II-3-2. Volume de contrôle

Le domaine étudié est défini par maillage de points discrètement espacés sur lesquels sont centrés les volumes de contrôle. On intègre les équations différentielles sur chaque volume de contrôle, ces volumes étant indépendants entre eux. Le maillage au point P est représenté sur la figure 15. Par analogie avec les points cardinaux, le point P est entouré des points N, S, W et E. Les points N et S indiquent les côtes Nord et Sud respectivement, ceux-ci définissent la direction axiale de la décharge. Les points W et E indiquent les côtés Ouest et Est et définissent la direction radiale. Les points n, s, w et e qui se situent au milieu des segments PN, SP, WP et PE indiquent la position des interfaces. L'équation est alors discrétisée sur le volume de contrôle qui, en coordonnées cylindriques, s'écrit : $2 \pi r \Delta r \Delta x$.

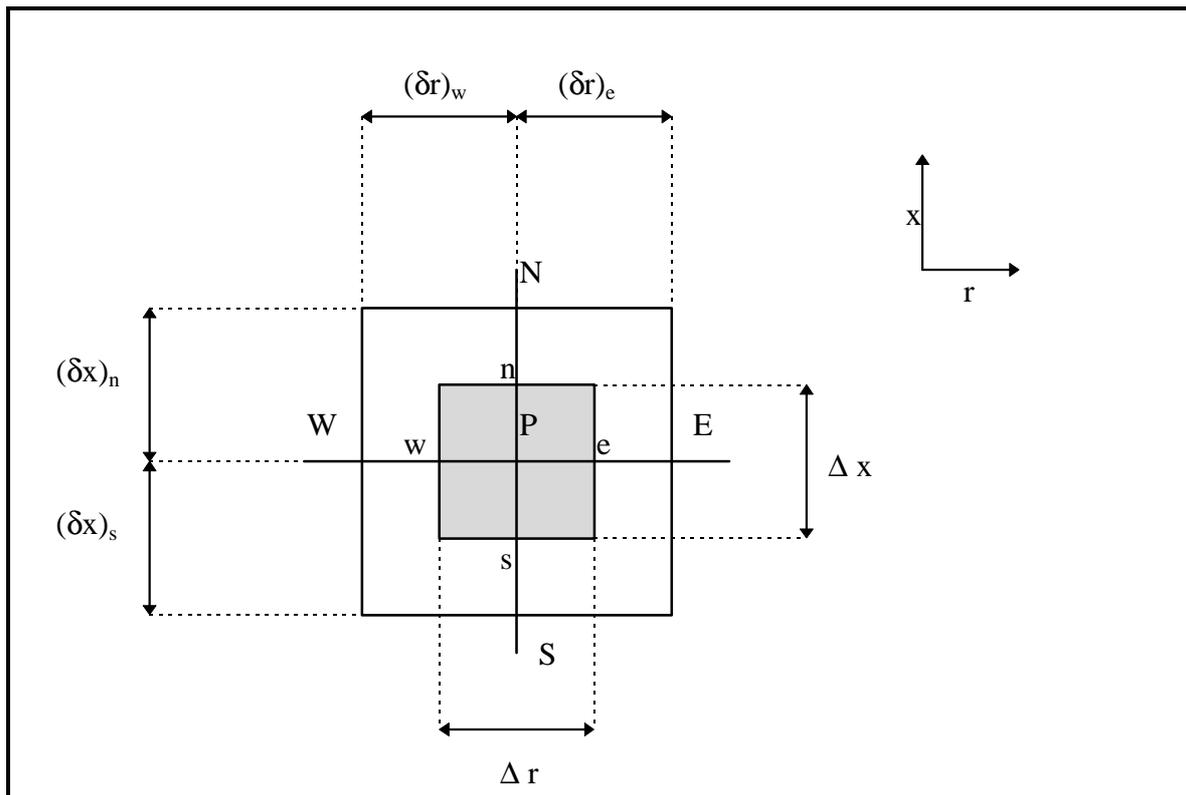


Figure 15 : Volume de contrôle autour du point P.

II-3-3. Discrétisation de l'équation générale

Dans notre géométrie bidimensionnelle associée au repère (r, x) l'équation générale (II-19) s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(\Gamma r \frac{\partial\phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x}\right) + S \quad (\text{II-20})$$

$$\text{Soit } J_r = r\left(\rho v\phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial r}\right) \quad \text{et} \quad J_x = \rho u\phi - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \quad (\text{II-21})$$

L'équation (II-20) s'écrit sous une forme plus simple :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(J_r) + \frac{\partial}{\partial x}(J_x) = S \quad (\text{II-22})$$

En intégrant sur les volumes de contrôles $[w, e]$, $[n, s]$ et sur le temps $[t, t+\Delta t]$ on obtient :

$$\frac{\left(\rho_p \phi_p - \overset{\circ}{\rho}_p \overset{\circ}{\phi}_p\right)}{\Delta t} r_p \Delta r \Delta x + (J_{re} - J_{rw}) + (J_{xn} - J_{xs}) = S_p r_p \Delta r \Delta x \quad (\text{II-23})$$

Les quantités J_{xn} et J_{xs} représentent les flux dus à la convection et à la diffusion axiale, de même que les quantités J_{re} et J_{rw} les flux dus à la convection et à la diffusion radiale (II-24).

$$J_{re} = \left(\int J_r dx\right)_e \quad J_{rw} = \left(\int J_r dx\right)_w \quad J_{xn} = \left(\int J_x r dr\right)_n \quad J_{xs} = \left(\int J_x r dr\right)_s \quad (\text{II-24})$$

En posant $\phi = 1$ et le terme source $S = 0$ l'équation de conservation de la masse discrétisée s'écrit :

$$\frac{\left(\rho_p - \overset{\circ}{\rho}_p\right)}{\Delta t} r_p \Delta r \Delta x + (F_{re} - F_{rw}) + (F_{xn} - F_{xs}) = 0 \quad (\text{II-25})$$

Les quantités F_{xn} et F_{xs} représentent les flux dus à la convection axiale, de même que les quantités F_{re} et F_{rw} les flux dus à la convection radiale (II-26).

$$F_{re} = \left(\int F_r dx \right)_e \quad F_{rw} = \left(\int F_r dx \right)_w \quad F_{xn} = \left(\int F_x r dr \right)_n \quad F_{xs} = \left(\int F_x r dr \right)_s \quad (\text{II-26})$$

$$\text{avec } F_r = r \rho v \quad \text{et} \quad F_x = \rho u \quad (\text{II-27})$$

En multipliant l'équation (II-25) par ϕ_p et en faisant la différence avec l'équation (II-23) on obtient la discrétisation de l'équation de conservation associée à la variable ϕ :

$$\frac{\rho_p (\phi_p - \overset{\circ}{\phi}_p)}{\Delta t} r_p \Delta r \Delta x + (J_{re} - F_{re} \phi_p) - (J_{rw} - F_{rw} \phi_p) + (J_{xn} - F_{xn} \phi_p) - (J_{xs} - F_{xs} \phi_p) = S_p r_p \Delta r \Delta x \quad (\text{II-28})$$

En posant :

$$\left. \begin{aligned} J_{re} - F_{re} \phi_p &= a_E (\phi_p - \phi_E) & J_{rw} - F_{rw} \phi_p &= a_W (\phi_W - \phi_p) \\ J_{xn} - F_{xn} \phi_p &= a_N (\phi_p - \phi_E) & J_{xs} - F_{xs} \phi_p &= a_S (\phi_S - \phi_p) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-29})$$

Finalement nous obtenons pour l'équation (II-28) :

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (\text{II-30})$$

avec

$$\left. \begin{aligned} a_p &= a_E + a_W + a_N + a_S + \overset{\circ}{a}_p - S_p r_p \Delta r \Delta x \\ b &= S_C r_p \Delta r \Delta x + \overset{\circ}{a}_p \overset{\circ}{\phi}_p \\ \overset{\circ}{a}_p &= \frac{\rho_p r_p \Delta r \Delta x}{\Delta t} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-31})$$

$$\left. \begin{aligned} a_E &= D_e A(|P_e|) + \|-F_e, 0\| & a_W &= D_w A(|P_w|) + \|F_w, 0\| \\ a_N &= D_n A(|P_n|) + \|F_n, 0\| & a_S &= D_s A(|P_s|) + \|-F_s, 0\| \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-32})$$

$$\left. \begin{aligned} D_e &= \frac{\Gamma_e r_e \Delta x}{\Delta r} & F_e &= (\rho r v)_e \Delta x & P_e &= \frac{F_e}{D_e} \\ D_w &= \frac{\Gamma_w r_w \Delta x}{\Delta r} & F_w &= (\rho r v)_w \Delta x & P_w &= \frac{F_w}{D_w} \\ D_n &= \frac{\Gamma_n r_p \Delta r}{\Delta x} & F_n &= (\rho u)_n r_p \Delta r & P_n &= \frac{F_n}{D_n} \\ D_s &= \frac{\Gamma_s r_p \Delta r}{\Delta x} & F_s &= (\rho u)_s r_p \Delta r & P_s &= \frac{F_s}{D_s} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-33})$$

Cette algorithme est obtenu en prenant en compte la linéarisation du terme source (cf. II-3-4). Les grandeurs avec l'exposant $^\circ$ sont prises au pas de temps précédent, la fonction $\| A, B \|$ est égale à la valeur maximale entre les deux nombres A et B. La fonction $A(|P|)$ représente la forme de discrétisation des termes élémentaires. Par exemple si une grandeur est définie sur le maillage principal (W, E, S, N) et est utilisée sur le volume de contrôle (w, e, s, n) il faut être capable d'estimer les valeurs aux interfaces w, e, s, n en fonction des valeurs calculées aux faces W, E, S, N. Pour cela Patankar définit plusieurs formes de discrétisations. Par exemple la forme de discrétisation 'naturelle' est celle de la moyenne arithmétique ou schéma des 'différences centrales', celle-ci est utilisée pour calculer la température ou la conductivité thermique aux interfaces (équation II-34).

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (\text{II-34})$$

Patankar à montré que cette discrétisation n'est pas la plus réaliste. En effet il existe d'autres schémas de discrétisation qui généralement prennent en compte certains phénomènes physiques. Par exemple, le schéma 'amont' prend en compte le sens de l'écoulement. Dans le cas de la discrétisation des équations générales faisant intervenir les phénomènes de convection et de diffusion nous utiliserons le schéma en 'loi de puissance' (équation II-35), celui-ci jauge l'importance relative des phénomènes de convection et de diffusion. Ce schéma fait intervenir le nombre de Peclet (équation II-36) qui par définition est le rapport entre les forces de convection et celle de diffusion sur une distance L.

$$A(|P|) = \left\| 0, (1 - 0.1|P|)^5 \right\| \quad (\text{II-35})$$

$$P = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (\text{II-36})$$

La discrétisation des équations de conservation selon le principe de Patankar respecte quatre règles de base pour que la solution soit physiquement réaliste et pour que le système ne soit pas divergent, ces règles sont :

1- Pour deux volumes de contrôle voisins le flux de la face commune doit avoir une expression identique dans les équations discrétisées pour les deux volumes de contrôle. Il doit y avoir conservation du flux à cette face.

2- Les coefficients du point central a_p et les coefficients voisins du point central a_E, a_W, a_N, a_S et a^o_p doivent être de même signe, arbitrairement positif.

3- Le terme S_c du terme source linéarisé (cf. II-3-4) doit être inférieur ou égal à zéro, pour éviter que le coefficient du point central a_p soit négatif.

4- Le coefficient du point central a_p doit être égal à la somme des coefficients des points voisins (hors termes sources) :

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (\text{II-37})$$

II-3-4. Linéarisation du terme source

D'après l'équation (II-30) on s'aperçoit que a_p peut devenir négatif si S_p est positif et ne pas respecter la règle numéro trois énoncée au paragraphe (II-3-3), on s'affranchit de cet inconvénient si S_p est négatif. En effet si S_p était positif, cela voudrait dire que lorsque la grandeur ϕ augmente, le terme source augmente aussi. A l'itération suivante cela va faire augmenter ϕ , puis le terme source et ainsi de suite. Il y a donc un risque d'instabilités de la solution ou même d'obtention de solution non réaliste ; il faut donc rendre S_p négatif.

$$S = S_C + S_P \phi_P \quad (\text{II-38})$$

avec

$$S_C = \frac{S^* \tilde{\phi}_P}{\phi_P - \phi_P^*} \quad S_P = - \frac{S^*}{\phi_P - \phi_P^*} \quad (\text{II-39})$$

où S^* est la valeur calculée de S pour la grandeur ϕ_P^* , les grandeurs avec l'exposant * sont prises à l'itération précédente.

$\tilde{\phi}_p$ est la borne supérieure de la grandeur correspondant au maximum qui peut être atteint pour la configuration envisagée.

II-3-5. La correction de pression

En régime stationnaire le calcul à deux dimensions (r et x) des grandeurs hydrodynamiques (vitesses, énergie) et des densités est découplé. Les densités sont calculées à partir du modèle de cinétique chimique (cf. chapitre I) et les grandeurs hydrodynamiques sont calculées en résolvant les équations de conservation de mouvement et de l'énergie. Le système hydrodynamique est fermé puisque nous avons trois grandeurs à calculer v , u et h pour trois équations de conservation (deux de quantité de mouvement plus celle de l'énergie). Or pour que le système soit physiquement acceptable il faut que l'équation de conservation de la masse soit satisfaite. Une solution simple consisterait à remplacer une des équations de quantité de mouvement par l'équation de conservation de la masse pour calculer une des deux vitesses (en général v). L'originalité de la méthode de Patankar consiste à utiliser l'équation de conservation de la masse pour calculer une différence de pression qui va corriger les vitesses qui sont estimées à partir des deux équations de quantité de mouvement. Si par exemple, nous exprimons le terme ∇p de l'équation de quantité de mouvement suivant l'axe x , la contribution Δp de ce terme peut s'écrire :

$$p_s - p_n = \frac{p_s + p_p}{2} - \frac{p_p + p_n}{2} = \frac{p_s - p_n}{2} \quad (\text{II-40})$$

L'équation de quantité de mouvement contient la différence de pression entre deux points non consécutifs du maillage, ce qui peut conduire à un calcul erroné de la pression. Ce problème peut être résolu en discrétisant les équations de conservation de la quantité de mouvement sur un maillage déplacé. Ce déplacement est fonction de la composante de la vitesse étudiée et est effectué, de telle manière que les vitesses soient définis aux interfaces du maillage principal (figure 16). Pour un calcul utilisant une méthode itérative cette correction tend vers une valeur nulle au cours des itérations.

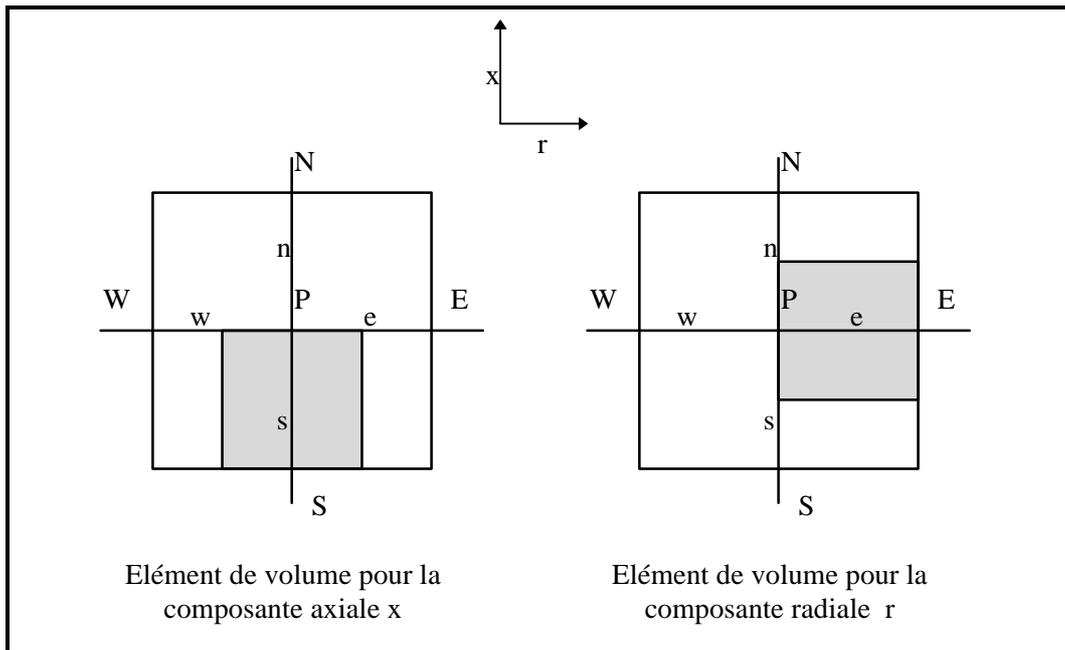


Figure 16 : Eléments de volume pour les composantes axiale et radiale de la quantité de mouvement.

En régime transitoire les grandeurs hydrodynamiques et cinétiques sont calculées en considérant les équations de conservation de quantité de mouvement et de l'énergie ainsi que les N équations de conservation des espèces. Le calcul est couplé avec les relations définies au paragraphe (II-2-5). L'équation de continuité possède une structure identique à l'équation de conservation de la masse. Mais dans notre cas elle nous sert uniquement à calculer les densités, les vitesses étant supposées connues et calculées à partir des équations de quantité de mouvement. De ce fait la résolution de l'équation de la masse est inutile puisque celle-ci est intrinsèquement résolue à partir des N équations de continuité. Il est donc inutile d'estimer la correction de pression et de corriger les vitesses puisque la pression est calculée à partir des densités. La correction de pression ne sera donc pas utilisée pour ce type de calcul.

II-3-6. Cas particulier de l'équation de continuité

Dans notre géométrie bidimensionnelle associée au repère (r, x) l'équation de continuité pour l'espèce 'i' (équation I-2) s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_i) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r n_i v) + \frac{\partial}{\partial x}(n_i u) = S_i = Ca_i - Da_i n_i \quad (\text{II-41})$$

Nous rappelons que la vitesse d'un type de particule est égale à la vitesse du fluide du fait que la diffusion des espèces est négligeable. Pour ne pas alourdir les notations nous supposons pour la suite que les grandeurs n_i , S_i , Ca_i et Da_i sont spécifiques à l'espèce 'i', nous supprimerons donc l'indice 'i'. En intégrant sur les volumes de contrôles $[w, e]$, $[n, s]$ et sur le temps $[t, t+\Delta t]$ les quatre termes discrétisés sont :

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial t}(n) r dr dx dt &= (n_p - n_p^\circ) r_p \Delta r \Delta x \quad \text{avec} \quad n_p = n_p(t+\Delta t) \quad n_p^\circ = n_p(t) \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{1}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r}(r n v) \right] r dr dx dt &= [(r n v)_e - (r n v)_w] \Delta x \Delta t \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial x}(n u) r dr dx dt &= [(n u)_n - (n u)_s] r_p \Delta r \Delta t \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S r dr dx dt &= S_p r_p \Delta r \Delta x \Delta t = (Ca - n Da)_p r_p \Delta r \Delta x \Delta t \end{aligned}$$

En portant les termes discrétisés dans l'équation de continuité et en divisant par l'élément de volume $r_p \Delta r \Delta x$ on obtient la relation suivante :

$$n_p - n_p^\circ = [(r n v)_w - (r n v)_e] \frac{\Delta t}{r_p \Delta r} + [(n u)_s - (n u)_n] \frac{\Delta t}{\Delta x} + (Ca - n Da)_p \Delta t \quad (\text{II-42})$$

On s'aperçoit, dans cette expression que les termes de convection font apparaître les valeurs des densités aux interfaces w , e , s et n où les vitesses sont définies. Nous avons essayé plusieurs types de discrétisation pour exprimer les valeurs de ces densités en fonction des valeurs définies aux points W , E , S et N . Le schéma des 'différences centrales' (cf. II-3-3) s'est révélé peu efficace. En réalité il faut considérer le sens de l'écoulement dans la discrétisation de ces termes. Une des façons de tenir compte de cette propriété est d'utiliser un schéma dans lequel on suppose que la densité à l'interface est égale à la densité de la face d'entrée du gaz. Par exemple si on considère l'interface 'w' et les faces W et P (figure 17) suivant le sens de la vitesse v_w nous allons imposer la densité n_w telle que :

$$n_w = n_W \quad \text{si la vitesse } v_w \text{ est positive}$$

$$n_w = n_P \quad \text{si la vitesse } v_w \text{ est négative}$$

Soit en utilisant le formalisme défini en II-3-3 :

$$n_w v_w = n_W \|v_w, 0\| - n_P \|-v_w, 0\| \quad (\text{II-43})$$

$$\text{avec } \|A, B\| = |A| \quad \text{si } A > B$$

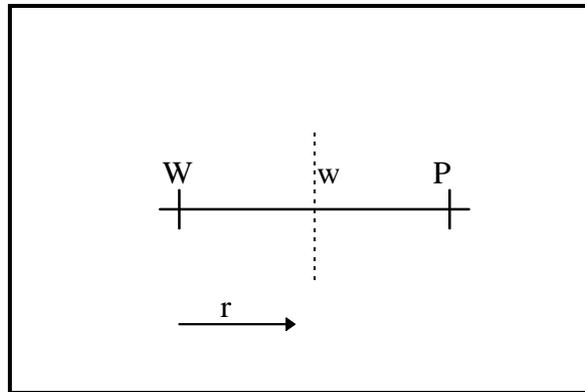


Figure 17 : Volume de contrôle autour du point w.

Pour les points e, s et n la même démarche est utilisée. En portant ce schéma de discrétisation dans l'équation (II-42) nous obtenons une relation analogue a celle définie en (II-3-3) (équation II-28) :

$$a_P n_P = a_E n_E + a_W n_W + a_N n_N + a_S n_S + b \quad (\text{II-44})$$

avec

$$a_E = \|-v_e, 0\| \frac{\Delta t}{r_p \Delta r} \quad a_W = \|v_w, 0\| \frac{\Delta t}{r_p \Delta r}$$

$$a_N = \|-u_n, 0\| \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad a_S = \|u_s, 0\| \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$$a_P = 1 + \left(\|v_e, 0\| + \|-v_w, 0\| \right) \frac{\Delta t}{r_p \Delta r} + \left(\|u_n, 0\| + \|-u_s, 0\| \right) \frac{\Delta t}{\Delta x} + Da \Delta t$$

$$b = n_p^\circ + Ca \Delta t$$

On s'aperçoit que les termes a_n ($n = E, W, N, S$) ne respectent pas la quatrième loi définie précédemment au paragraphe II-3-3. En réalité il faut savoir que la quantité qui entre en jeu dans ces coefficients est une quantité vectorielle (\bar{v}) et que l'équation de conservation des espèces est purement convective. Cette équation est le reflet de l'équation de conservation de la masse, la densité de masse jouant le rôle de la densité de l'espèce. L'équation de conservation de la masse est en général utilisée soit pour calculer une vitesse, soit pour estimer une différence de pression et donc pour corriger les vitesses (cf. II-3-5). Dans les deux cas cette équation est discrétisée suivant un maillage décalé et la variable à estimer est la vitesse et les coefficients a_n sont fonctions de la densité de masse. Dans le cas de l'équation cinétique la variable à estimer est la densité des espèces et les coefficients s'expriment en fonction des vitesses, la discrétisation de l'équation de conservation des espèces est donc une discrétisation inversée. Les trois grandeurs hydrodynamiques (T, v, u) étant calculées par les équations de quantité de mouvement et l'équation de l'énergie, le système hydrodynamique est donc fermé, le rôle de l'équation cinétique est uniquement limité à estimer les densités à partir des vitesses.

II-3-7. Méthode de résolution

L'ensemble des équations de discrétisation forme un système d'équations algébriques de forme linéaire et tridiagonale que l'on peut résoudre par l'algorithme TDMA (Tri Diagonal Matrix Algorithm). Cette méthode permet d'explicitier les équations discrétisées. Dans le cas unidimensionnel les équations de discrétisation peuvent se mettre sous la forme :

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i \quad (\text{II-45})$$

$$\text{Soit une solution telle que} \quad \phi_i = P_i \phi_{i+1} + Q_i \quad (\text{II-46})$$

$$\text{ou encore} \quad \phi_{i-1} = P_{i-1} \phi_i + Q_{i-1} \quad (\text{II-47})$$

Si on injecte la solution (II-47) dans l'expression (II-45) on obtient :

$$\left. \begin{aligned} P_i &= \frac{b_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \\ Q_i &= \frac{c_i Q_{i-1} + d_i}{a_i - c_i P_{i-1}} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-48})$$

1 et N étant les points limites, l'indice 1 est affecté à l'axe et l'indice N au bord de la géométrie, on doit avoir (d'après II-47) :

$c_1=0$ $b_n=0$ ce qui conduit à

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= \frac{b_1}{a_1} & Q_1 &= \frac{d_1}{a_1} \\ \phi_N &= Q_N \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-49})$$

On peut donc calculer les valeurs de ϕ_i par un double balayage grâce à l'algorithme suivant :

- 1- Calcul de P_1 et de Q_1 (équations II-49).
- 2- Calcul des P_i et des Q_i (équations II-48), premier balayage.
- 3- Connaissant Q_N on en déduit ϕ_N (équation II-49).
- 4- Connaissant ϕ_N grâce à l'équation (II-46) on détermine les ϕ_i de ϕ_{N-1} à ϕ_1 , deuxième balayage.

Cet algorithme est très avantageux dès lors que les équations peuvent se mettre sous la forme de l'équation (II-46).

II-4. ESTIMATION DU PAS MAXIMAL D'AVANCEMENT SUR LE TEMPS ΔT A PARTIR DE LA CINÉTIQUE

Dans ce paragraphe nous allons estimer le pas maximal d'avancement sur le temps à partir de l'équation de conservation des espèces. En effet suivant la nature de l'espèce considérée la constante de temps qui entre en jeu dans l'évolution de l'espèce peut être très petite et donc bien inférieure à une constante de temps hydrodynamique. C'est donc la cinétique chimique qui va estimer le maximum que peut avoir le pas d'intégration sur le temps et donc faciliter la mise au point du couplage entre les codes cinétique et hydrodynamique.

Pour un milieu à N espèces la connaissance de chaque densité nécessite de résoudre les N équations de continuité. En général ces équations sont couplées au niveau du terme source, ce terme dépend des densités de toutes les espèces et varie en fonction de la température. Il est possible de

résoudre analytiquement l'équation de continuité dans un cas simple en posant deux hypothèses simplificatrices :

- On considère que le terme de convection est négligeable.
- On considère que les termes Ca et Da du terme source sont constants.

A partir de ces hypothèses l'équation de continuité des espèces (I-2) s'écrit :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = Ca_i - n_i Da_i \quad (\text{II-50})$$

En intégrant l'équation on obtient la densité de l'espèce i en fonction du temps :

$$n(t) = n_\infty + (n_0 - n_\infty) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (\text{II-51})$$

avec

$$\tau = \frac{1}{Da} \quad n_\infty = \frac{Ca}{Da} = Ca \tau \quad (\text{II-52})$$

Où τ est la constante de temps de disparition de l'espèce considérée et n_0 est la densité initiale à $t=0$. La constante Da traduit la rapidité avec laquelle la densité numérique $n(t)$ atteint la valeur d'équilibre n_∞ . Suivant la nature de l'espèce, cette expression analytique peut donner deux types d'évolution des densités (figures 18 et 19). Le premier type correspond à une évolution croissante de la densité ($n_\infty > n_0$), le deuxième type correspond à une évolution décroissante de la densité ($n_\infty < n_0$).

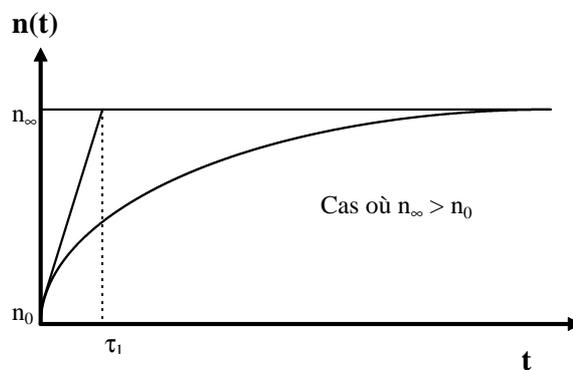


Figure 18 : Evolution croissante.

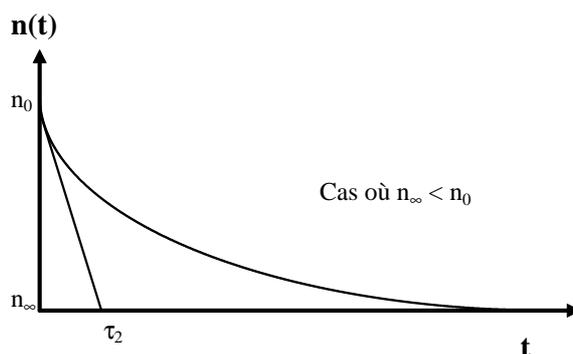


Figure 19 : Evolution décroissante.

En général, dans les problèmes physiques faisant intervenir la cinétique des réactions chimiques, la constante de temps τ diffère d'une espèce à l'autre parfois de plusieurs ordres de grandeur. De plus, pour une espèce A, s'il existe plusieurs réactions (p), dont les temps de relaxation respectifs sont τ_p^A , la constante de temps est égale au temps de relaxation global τ^A (cf. I-3-2). De ce fait, la résolution du système d'équations différentielles couplées se heurte à des difficultés dues essentiellement à l'instabilité des solutions à cause du pas d'intégration, lorsque celui-ci n'est pas correctement choisi. Si la densité d'une espèce est faible pour une valeur fixée de la température, cela veut dire que le taux de destruction de cette espèce est très important et donc que le temps de relaxation relatif à cette espèce est très petit. L'espèce qui possédera un fort taux de destruction mettra moins de temps à atteindre l'équilibre, le pas d'intégration choisi sera le plus petit des temps de relaxation de toutes les espèces sur tout le domaine. Or celui-ci doit être choisi dans des proportions raisonnables. En effet, pour des espèces minoritaires comme par exemple les molécules SF_X ($X=2,6$) à haute température, le temps de relaxation peut atteindre les 10^{-16} s, ces espèces reviennent instantanément à l'équilibre, il n'est donc pas nécessaire de calculer leurs densités à l'extinction (cf. I-3-4).

Sur les figures 20 à 23 nous avons tracé les évolutions des taux de destruction (Da) calculés à partir de la composition du plasma en fonction de la température pour une pression fixée à 0.1 MPa (figures 20 et 21) ainsi que pour une pression de 0.4 MPa (figures 22 et 23). On remarque principalement que les taux de destruction supérieurs à 10^9 s^{-1} sont relatifs aux espèces moléculaires SF_X ($X=2,6$) pour une température supérieure à 300 K et à l'ion F^+ pour une température inférieure à 4200 K. Cela revient à dire que les constantes de temps de destruction des molécules polyatomiques ainsi que la constante de temps de destruction de l'ion F^+ sont très courtes (taux de destruction importants) devant celles des espèces ionisées et des espèces diatomiques. Les résultats

des figures 20 et 21 permettent de quantifier cette remarque assez triviale. L'espèce F^+ présente la plus forte variation de taux de destruction entre le bord et le centre de la décharge.

En prenant en compte ces résultats nous avons introduit des simplifications pour que le calcul à l'extinction soit possible. En effet si on inclut les espèces moléculaires dans notre calcul il nous faut imposer un pas d'intégration extrêmement faible (inférieure à 10^{-16}), ce qui augmente considérablement le temps de calcul. Les simplifications apportées à notre modèle sont :

- i - Les densités des espèces SF_2 , SF_3 , SF_4 , SF_5 et SF_6 sont calculées à l'équilibre.
- ii - La densité de l'espèce F^+ est calculée à l'équilibre pour une température inférieure à 5000

K.

En considérant ces simplifications, le choix du pas d'intégration cinétique s'est porté sur une valeur comprise entre 10^{-10} s et 10^{-9} s. Cette gamme de pas d'intégration est un bon compromis entre les calculs incluant la cinétique du SF_6 et les limitations des stations de travail. Au début du calcul nous imposerons un pas faible (de l'ordre de 10^{-15} s), ce pas sera augmenté graduellement jusqu'à la valeur maximale dt que nous avons définie précédemment. Ce procédé permet de réduire les erreurs d'initialisation pour le calcul des densités des espèces SF^+ , S_2^+ , F_2^+ et F_2 qui présentent un temps caractéristique proche de dt (figure 20). Les figures 22 et 23 relatives à 0.4 MPa montrent que les allures des courbes sont sensiblement identiques à celles des courbes obtenues à 0.1 MPa et confirme la valeur du pas d'intégration que nous avons choisie. Il faut remarquer que le choix du pas d'intégration cinétique s'est effectué sur un calcul cinétique à l'état stationnaire et en supposant que la constante de temps de l'évolution est approximativement l'inverse du taux de disparition ; or ce calcul n'en reste pas moins grossier et il ne faudra pas perdre de vue que les taux de disparition sont fonction du temps et des phénomènes de diffusion et de convection et que le pas de temps imposé lors des calculs à l'extinction peut s'avérer trop élevé pour certaines conditions.

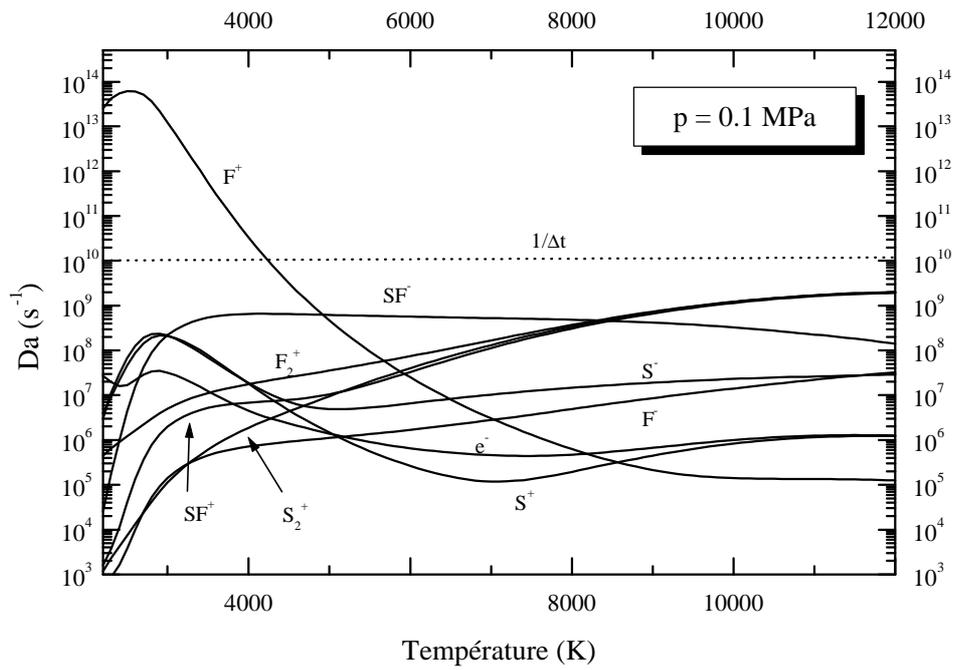


Figure 20 : Taux de destructions des espèces ionisées ($p = 0.1 \text{ MPa}$).

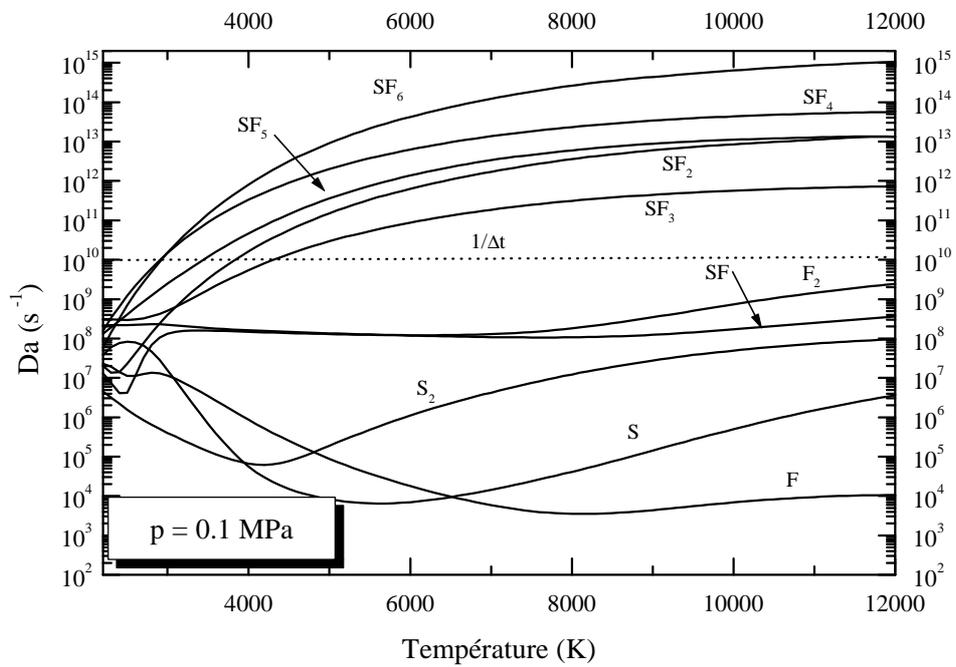


Figure 21 : Taux de destructions des espèces atomiques et moléculaires ($p = 0.1 \text{ MPa}$).

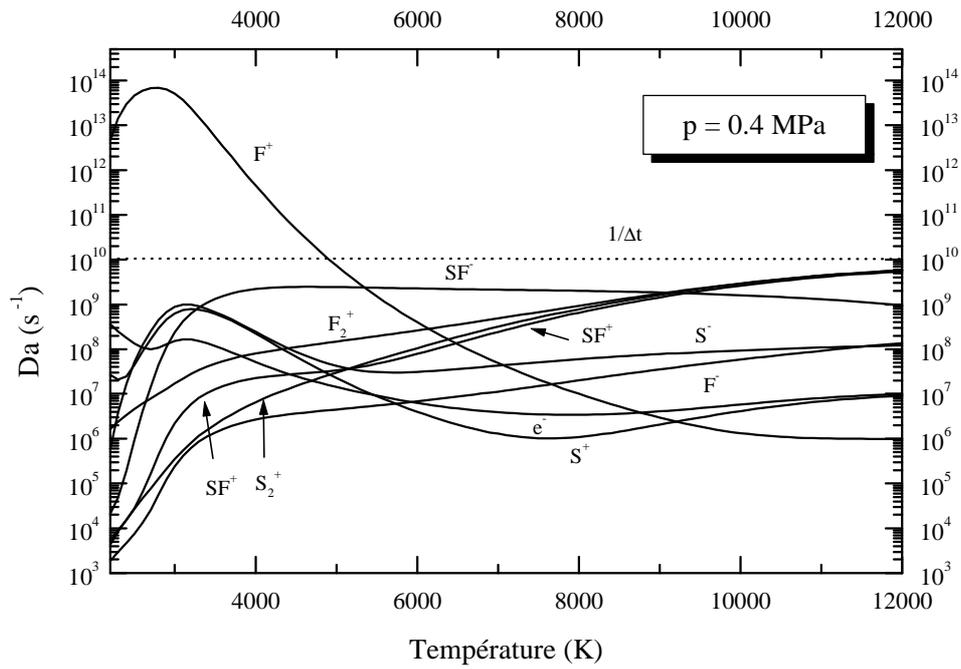


Figure 22 : Taux de destructions des espèces ionisées ($p = 0.4$ MPa).

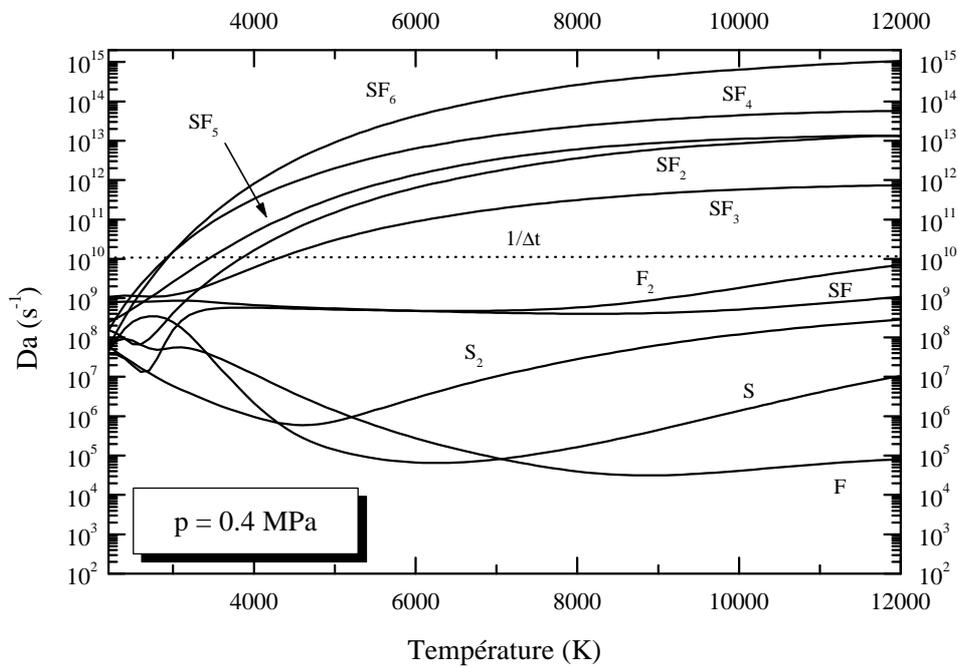


Figure 23 : Taux de destructions des espèces atomiques et moléculaires ($p = 0.4$ MPa).

II-5. COEFFICIENTS DE TRANSPORT

Deux types de fonctions matérielles sont requises : les coefficients de transport tels que les conductivités électrique et thermique et la viscosité ; d'autres grandeurs telles que la chaleur spécifique, la densité de masse et le coefficient d'émission nette.

Le premier a été calculé par la méthode classique de Chapman et Enskog pour les plasmas SF₆ et SF₆-Cu [Ch-1]. On considère, pour cette méthode, un plasma idéal en équilibre thermodynamique local. Tous les composés chimiques sont pris à l'état gazeux. On associe les équations de Saha, Guldberg-Waage et de Dalton avec les lois de la neutralité électrique et de la conservation de l'équilibre stoechiométrique ce qui permet de calculer les densités de particules en fonction de la température, de la pression et du rapport stoechiométrique. Les corrections de la pression et l'abaissement du potentiel d'ionisation sont pris en compte. Les fonctions de partition interne pour chaque espèce sont déterminées différemment en accord avec leur structure. La densité de masse est directement obtenue à partir de la composition. L'étude théorique des coefficients de transports est basée sur la résolution de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann fondée sur la méthode de Chapman-Enskog. On utilise l'approximation d'ordre trois pour cette méthode, l'expression de la conductivité électrique représente la composante électronique et la contribution du courant due aux ions est négligée. La conductivité thermique est égale à la somme de plusieurs composantes qui sont la conductivité thermique de translation, la conductivité interne et la conductivité de réaction. Dans les expressions des coefficients de transports, des fonctions spéciales appelées intégrales de collisions sont introduites. Leurs calculs diffèrent suivant le type d'interaction considéré et différentes méthodes sont utilisées ; celles-ci sont données par Chervy [Ch-1]. Toutes les expressions et toutes les données (énergies de réactions, constantes moléculaires, potentielles d'interactions, rayon ...) utilisées dans ces calculs sont rapportées par Chervy [Ch-1]. A titre d'exemple nous présentons sur les figures 24 à 26 respectivement les profils de la densité de masse, de la conductivité thermique et de la conductivité électrique en fonction de la température pour le SF₆ pur et pour des pressions de 0.1 et 0.4 MPa. Bien que les coefficients de transport utilisent les valeurs des densités calculées par une méthode différente de la nôtre (cf. I-2) nous avons vérifié que nos profils de densités des espèces et de densité de masse étaient identiques. Sur la figure 25, le tracé de la conductivité thermique montre trois pics centrés autour des valeurs de température égale à 1800, 2200 et 2800 K, ceux-ci correspondent respectivement à la dissociation du SF₆, du SF₄ et du SF₂.

L'énergie radiative a été calculée à partir du coefficient d'émission nette pour le SF₆ en supposant un plasma cylindrique homogène et isotherme ayant un rayon donné Rp. La méthode, décrite par Gleizes [Gl-8], prend en compte l'émission et l'absorption des radiations dues au continuum et aux raies. L'auto-absorption de chaque raie est calculée au moyen d'un facteur de fuite. Sur la figure 27 nous avons tracé le coefficient d'émission nette pour une pression de 0.1 MPa et de 0.4 MPa et pour un rayon de plasma Rp égal à 2 mm.

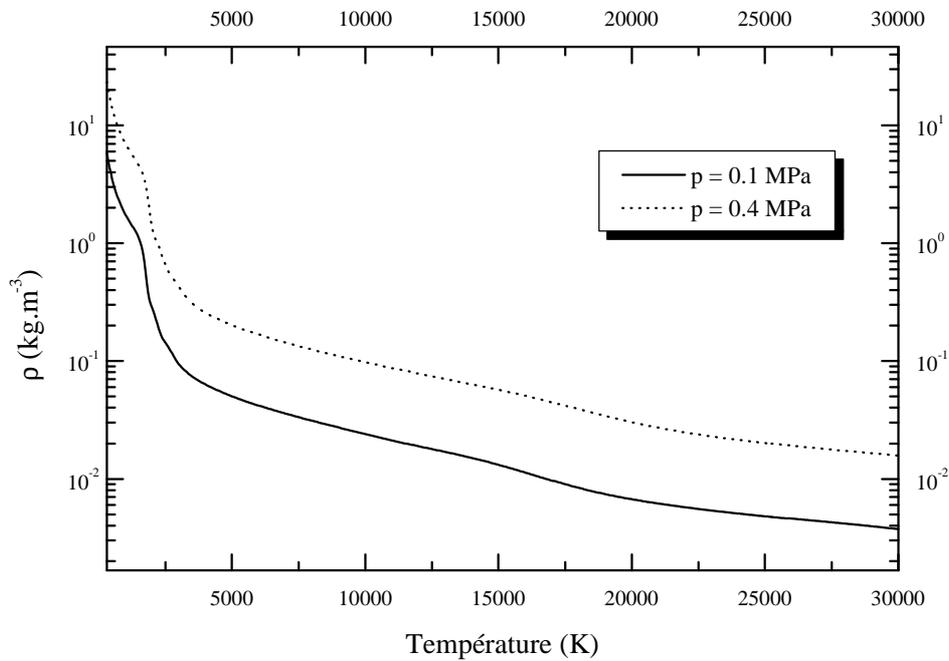


Figure 24 : Densité de masse du SF₆ pur.

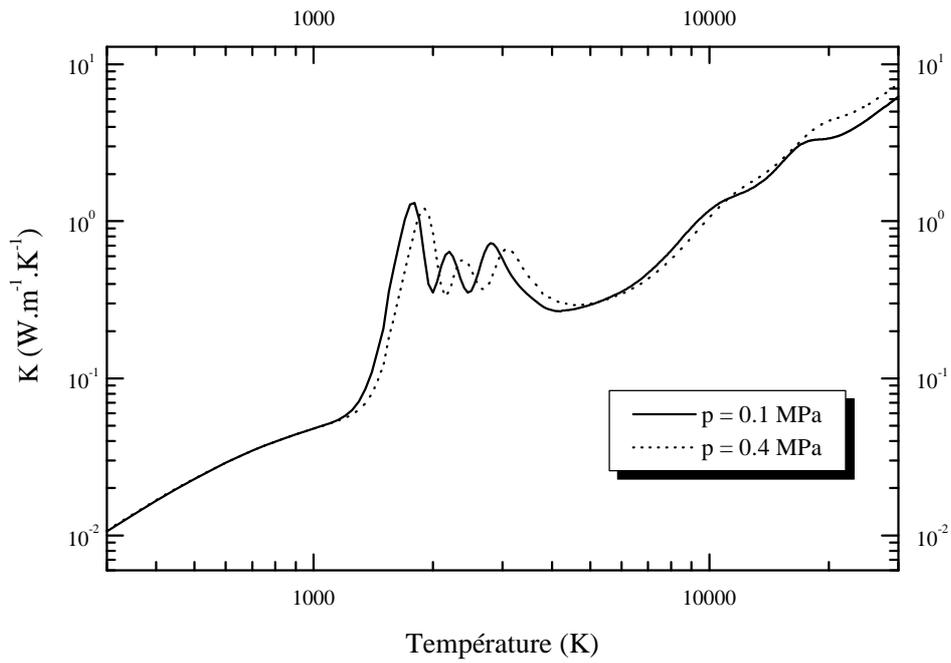


Figure 25 : Conductivité thermique du SF_6 pur.

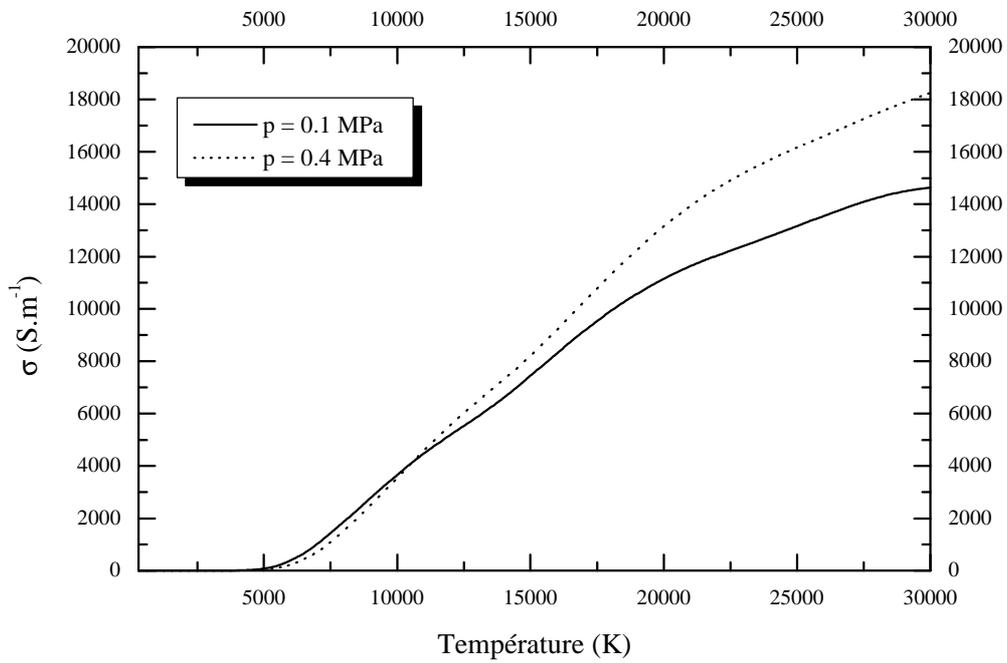


Figure 26 : Conductivité électrique du SF_6 pur.

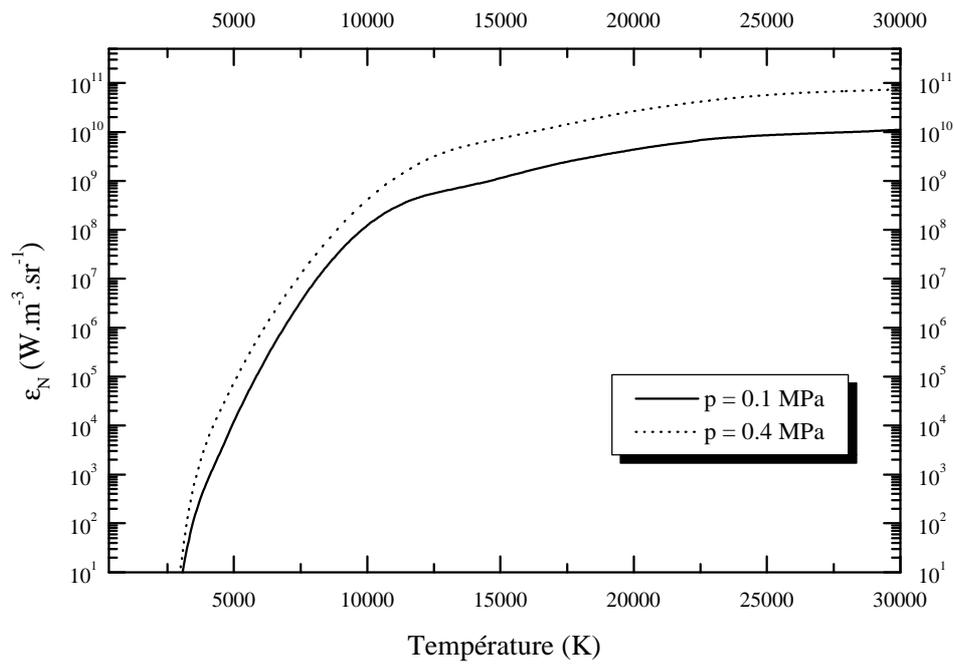


Figure 27 : Coefficient d'émission nette du SF_6 pur ($R_p = 2$ mm).

CHAPITRE III

MODELES A UNE DIMENSION

CHAPITRE III- MODELES A UNE DIMENSION

III-1. INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré à l'étude de l'arc stabilisé par parois. Cette simulation est une étape essentielle dans l'étude générale d'un arc de disjoncteur en présence d'un écoulement. Dans un premier temps nous calculerons le profil de température de l'arc stabilisé par parois en régime stationnaire, ce profil nous permettra essentiellement d'initialiser les calculs des différents modèles d'extinction.

Dans un deuxième temps nous aborderons l'extinction de l'arc pour un cas simple. Ensuite nous évoquerons un cas plus complexe d'un modèle d'arc en extinction incluant un module cinétique couplé avec le module hydrodynamique. L'intérêt de cette étude est double : d'une part, elle permet de mettre au point le couplage entre les deux modules qui servira ensuite dans des modèles plus sophistiqués ; d'autre part elle permettra de présenter et d'analyser l'influence de la cinétique et le comportement des différentes espèces pour un cas simple.

III-2. MODELISATION D'UN ARC STABILISE PAR PAROIS EN REGIME STATIONNAIRE

III-2-1. Equation de bilan d'énergie

Nous allons nous placer dans le cas d'une décharge d'arc stationnaire gainée par une chambre cylindrique qui expérimentalement est caractérisée par un empilement de disques dont les parois sont refroidies par une circulation d'eau. Pour cette modélisation nous considérons un plasma à symétrie cylindrique en ETL. La pression est fixée et reste constante à l'intérieure de la décharge. Nous supposons que l'arc fonctionne sans flux de gaz. On considère aussi que le champ électrique est constant et uniforme radialement et que le courant est constant. Le rayon de la décharge est alors imposé par celui de la chambre. En prenant en compte toutes ces hypothèses, les termes dépendant du temps sont nuls puisque l'arc est stationnaire, la vitesse moyenne d'entraînement du gaz est nulle, les échanges d'énergie dans le milieu se font donc uniquement par conduction électrique,

conduction thermique et rayonnement. Le profil de température peut être calculé par le bilan d'énergie (équation II-7), qui prend la forme de l'équation III-1, couplée avec la loi d'Ohm (équations II-13 et II-14). En coordonnées cylindriques cette équation s'écrit :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \sigma E^2 - u_R = 0 \quad (\text{III-1})$$

$$\text{avec } u_R = 4 \pi \epsilon_N \quad (\text{III-2})$$

Les conditions aux limites sont $\left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=0} = 0$ et $T_p = 300 \text{ K}$, T_p est la température de paroi ($r = R$). Le profil $T(r)$ calculé est initialisé à l'aide d'un profil parabolique de température arbitraire.

III-2-2. Influence du pas Δr

En régime stationnaire l'influence du pas Δr (ou du nombre de points N , $\Delta r = R/N+1$) est directement corrélée au temps de calcul et à la précision que l'on peut avoir sur les gradients de température. A l'extinction, le nombre de points est celui du profil initial de température calculé en régime stationnaire ; en conséquence nous devons choisir un pas Δr le plus grand possible pour éviter de trop longs calculs, sans pour autant diminuer la précision.

Dans l'intention d'améliorer le calcul tout en diminuant le pas nous avons effectué des essais intermédiaires. Tout d'abord nous avons essayé d'affiner le maillage dans la zone où existe le fort gradient de température pour améliorer le calcul de l'intégrale de la conductance. Ce procédé c'est révélé complexe à installer, les résultats obtenus ne nous ont pas satisfait. Dans un deuxième temps nous avons affiné les tables des propriétés du plasma (tabulation tous les 50 K). Nous présentons à titre d'exemple deux séries de résultats pour $I = 100 \text{ A}$ (figure 28) et 50 A (figure 29) et pour 300, 1000 et 2500 points, la température de paroi étant égale à 300 K, la pression est fixée à 0.1 Mpa. Sur le tableau 6 nous avons reporté les valeurs de la température axiale $T(0)$ ainsi que les valeurs du champ électrique pour les différents profils. La figure 28 ($I = 100 \text{ A}$) montre qu'il existe des différences de température non négligeables entre le profil comportant 300 points et les profils comportant 1000 et 2500 points, ces derniers sont relativement proches sur tout le rayon de la décharge. L'écart maximal entre le profil à 300 points et le profil à 1000 points peut atteindre 2500 K dans la zone où existe le fort gradient de température. Ces différences se traduisent aussi par un écart de la température axiale d'environ 465 K et un écart du champ électrique de 80 V.m^{-1} . Sur la

figure 29 ($I = 50$ A), les trois profils sont proches sur tout le rayon de la décharge. Les profils à 300 points et à 1000 points sont identiques, ce qui est confirmé par les valeurs du champ électrique ($\Delta E = 12 \text{ V.m}^{-1}$) et de la température axiale ($\Delta T \cong 30 \text{ K}$).

I (A)	N	300	1000	2500
50	T_0 (K)	11321	11353	11522
50	E (V.m^{-1})	1346	1358	1346
100	T_0 (K)	13220	13570	13685
100	E (V.m^{-1})	1502	1569	1580

Tableau 6 : Influence du pas Δr .

L'évolution de la conductivité thermique du SF_6 en fonction de la température (figure 25) a montrée la présence de trois pics centrés autour de 1800, 2200 et 2800 K, correspondant respectivement à la dissociation du SF_6 , du SF_4 et du SF_2 . Lorsque le nombre de points diminue, le pas Δr augmente, la différence de température, entre deux points, augmente aussi. Pour le calcul $I = 100$ A les profils présentent un plus fort gradient de température que pour le calcul $I = 50$ A, les différences qui apparaissent entre les profils ($I = 100$ A) sont dues au fait que le ΔT entre les deux derniers points, du profil 300 points, près de la paroi est supérieur à 2200 K. Ceci implique que les deux premiers pics de conductivité thermique 1800 et 2200 K ne sont pas pris en compte, ce qui a pour effet de sous-estimer la conductivité thermique dans la zone du fort gradient de température et donc de sous-estimer les pertes par conduction thermique entraînant une augmentation de la température dans cette zone.

En conclusion sur cette étude, un nombre de points de 300 est suffisant pour décrire la décharge si la température de paroi est égale à 3000 K ou si l'intensité est égale à 50 A, par contre pour une température limite située en dessous des pics de conductivité thermique, une plus grande précision est nécessaire pour bien décrire le milieu et un pas Δr plus fin s'impose.

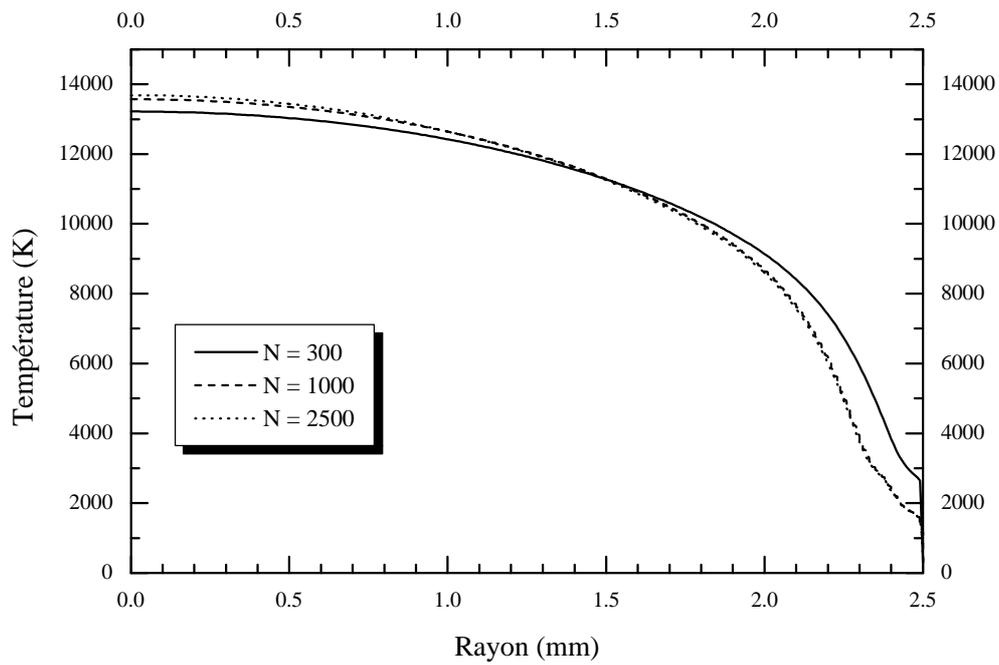


Figure 28 : Influence du pas \mathbf{Dr} ($I = 100 \text{ A}$, $p = 0.1 \text{ MPa}$).

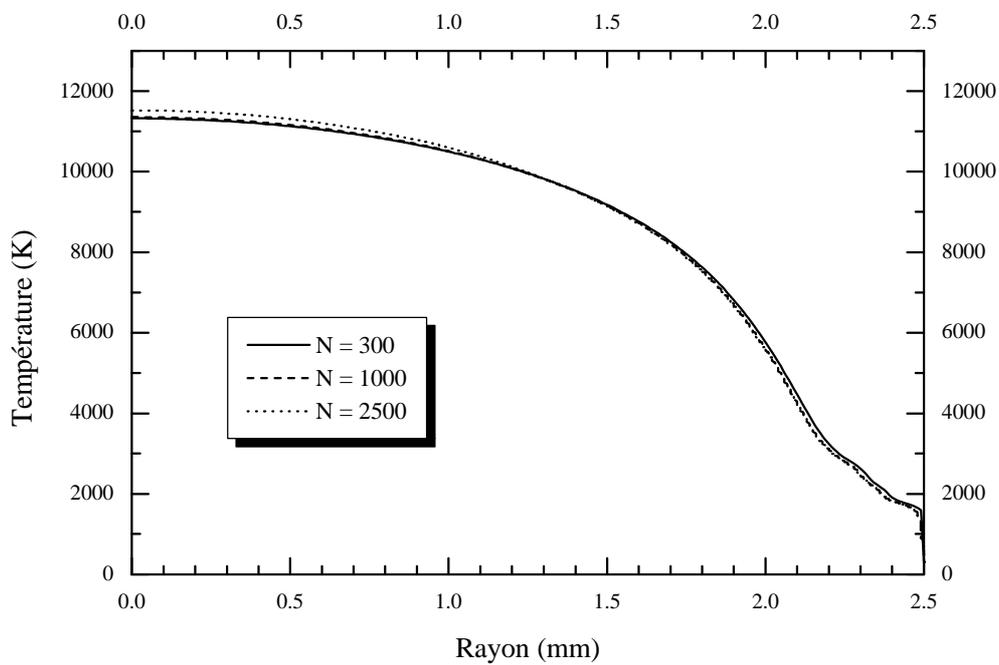


Figure 29 : Influence du pas \mathbf{Dr} ($I = 50 \text{ A}$, $p = 0.1 \text{ MPa}$).

III-2-3. Influence de l'intensité

Nous avons tracé sur la figure 30 les résultats expérimentaux obtenus par Schulz-Gulde [Sc-2] et Vaquié et *al* [Va-2] ainsi que les résultats obtenus par notre modèle pour un arc de 2.5 mm et pour une température de paroi égale à 300 K, la pression est fixée à 0.1 MPa. L'augmentation de l'intensité se traduit par une plus grande quantité d'énergie à faire passer dans les disques de stabilisation, il y a donc une hausse de la température axiale. Il existe dans la littérature des résultats expérimentaux [Ro-2] [Sa-1] donnant les variations de la température axiale en fonction de l'intensité. Nous ne détaillerons pas ici l'interprétation des différences observées, précisons seulement qu'elles proviennent essentiellement du phénomène de démixtion [Go-2].

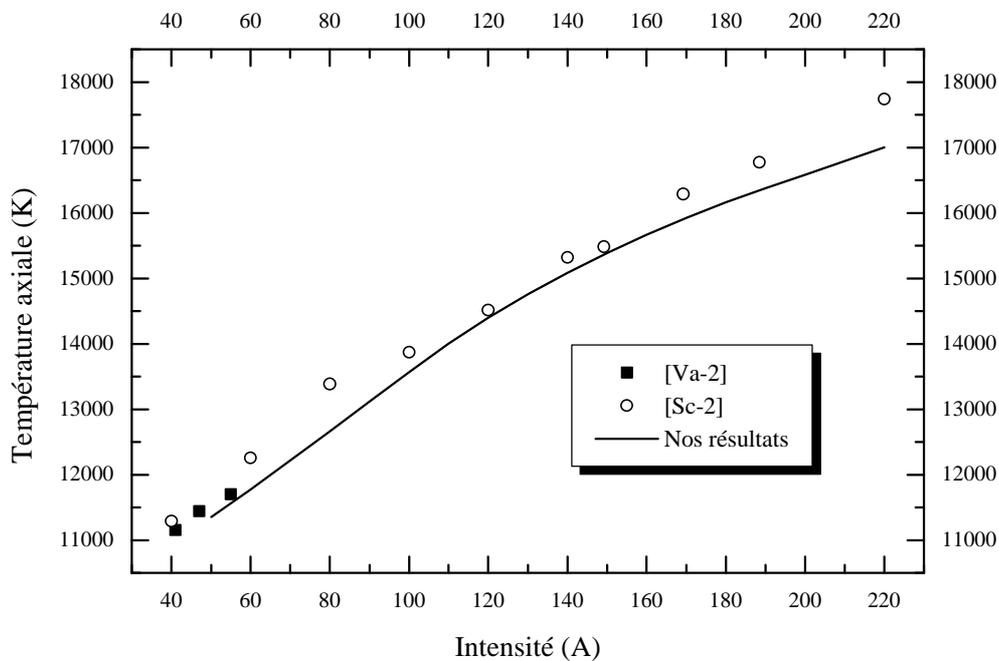


Figure 30 : Variations de la température axiale en fonction de l'intensité ($p = 0.1$ MPa).

Pour un arc de diamètre 5 mm, Schulz-Gulde et Worzyk [Sc-2] donnent les variations expérimentales du champ électrique en fonction de l'intensité. Ces valeurs sont reportées sur la figure 31 et comparées avec nos valeurs théoriques. Les principaux commentaires sont les suivants :

- L'accord entre expérience et calcul n'est pas mauvais ; les valeurs expérimentales sont en générales plus hautes que celles calculées.

- Le minimum de la courbe caractéristique $E(I)$ est observé expérimentalement pour un courant de 50 A alors que le minimum arrive à plus bas courant pour le calcul.

Trois raisons peuvent expliquer ces différences. La première est l'existence d'une incertitude expérimentale de 5 %, suivant Schulz-Gulde et Worzyk [Sc-2]. De plus la tension mesurée est celle des disques stabilisés et peut différer systématiquement selon la tension du plasma ; mais nous pensons que cette différence doit être faible. Deuxièmement, à partir de l'équation II-14, on peut voir que l'influence dans les autres régions du plasma (typiquement $6000 \text{ K} < T < 10000 \text{ K}$) de la conductance est importante, à cause du terme $r dr$ de l'intégrale. Quelques écarts à l'équilibre, qui certainement prennent place dans cette région, peuvent partiellement expliquer les différences entre expérience et calcul pour le champ électrique. Troisième point, de grandes différences peuvent survenir parce que l'arc n'est pas correctement stabilisé quand le courant est bas et quand le diamètre de stabilisation est plutôt large.

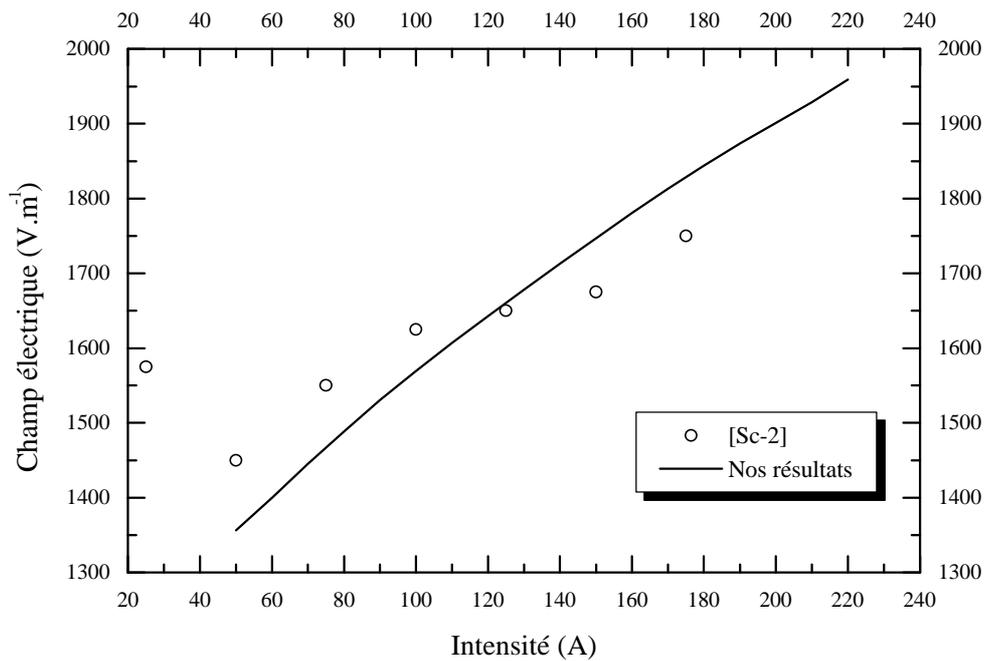


Figure 31 : Variations du champ électrique en fonction de l'intensité ($p = 0.1 \text{ MPa}$).

III-2-4. Influence de la pression

La figure 32 représente l'évolution de la température en fonction du rayon de la décharge ($R = 2.5 \text{ mm}$) pour deux valeurs de la pression 0.1 et 0.4 Mpa. L'intensité est fixée à 100 A, le nombre de points est de 1000. Lorsque la pression passe de 0.1 MPa à 0.4 MPa, la température axiale diminue. Pour expliquer ce phénomène nous avons tracé sur les figures 33 et 34 les profils radiaux du terme source (σE^2), du rayonnement (u_R) et du terme de source nette ($\sigma E^2 - u_R$), respectivement pour 0.1 MPa (figure 33) et pour 0.4 MPa (figure 34) ; nous avons reporté sur le tableau 7 ces grandeurs pour le centre de la décharge.

Pression (MPa)	$E \text{ (V.m}^{-1}\text{)}$	$T \text{ (K)}$	$\sigma E^2 \text{ (W.m}^{-3}\text{)}$	$u_R \text{ (W.m}^{-3}\text{)}$	$\sigma E^2 - u_R \text{ (W.m}^{-3}\text{)}$
0.1	1509	13570	$1.96 \cdot 10^{10}$	$1.88 \cdot 10^{10}$	$8.73 \cdot 10^8$
0.4	1989	11383	$1.54 \cdot 10^{10}$	$9.34 \cdot 10^9$	$6.11 \cdot 10^9$

Tableau 7 : Influence de la pression.

On constate que le terme de source nette est du même ordre de grandeur au bord de la décharge, par contre une différence apparaît au centre pour $r < 1.5 \text{ mm}$, le terme de source nette pour 0.4 MPa est inférieur à celui de 0.1 MPa. Cette diminution peut être expliquée par une augmentation d'un facteur quatre du rayonnement quand la pression passe de 0.1 à 0.4 MPa, bien que le terme source σE^2 augmente significativement de 25 % sur l'axe. Une hausse de la pression conduit donc à augmenter les pertes radiatives, et donc à baisser la température axiale.

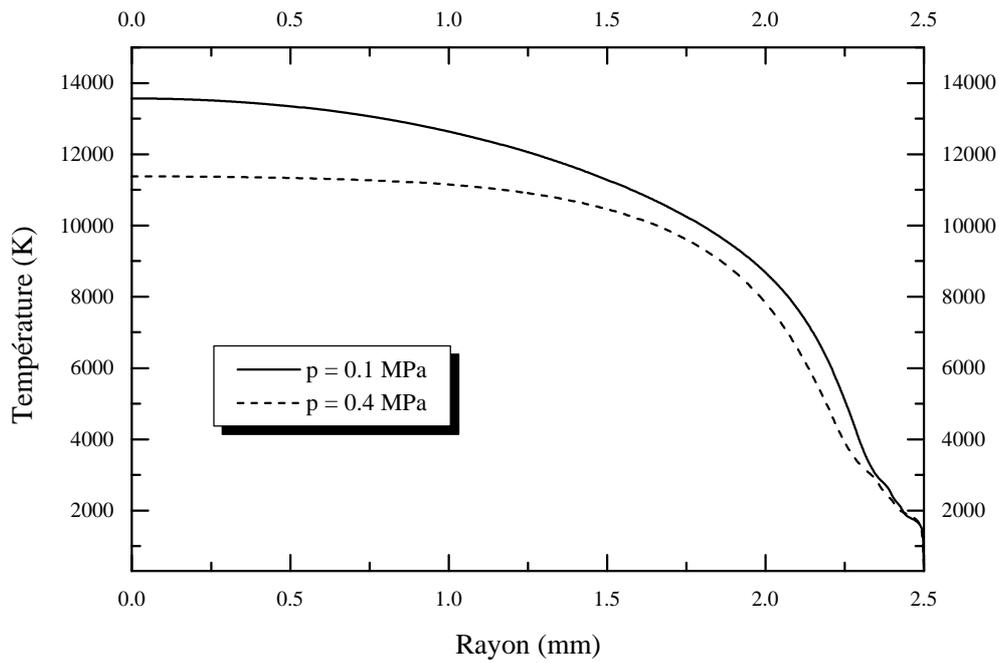


Figure 32 : Influence de la pression ($I = 100 \text{ A}$).

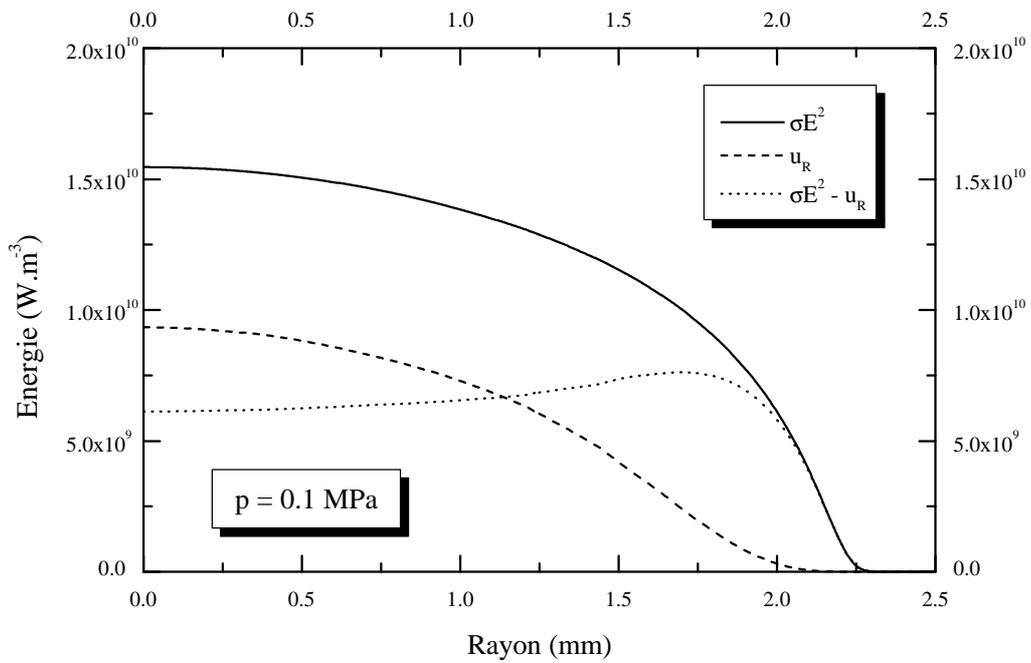


Figure 33 : Termes d'énergies ($p = 0.1 \text{ MPa}$).

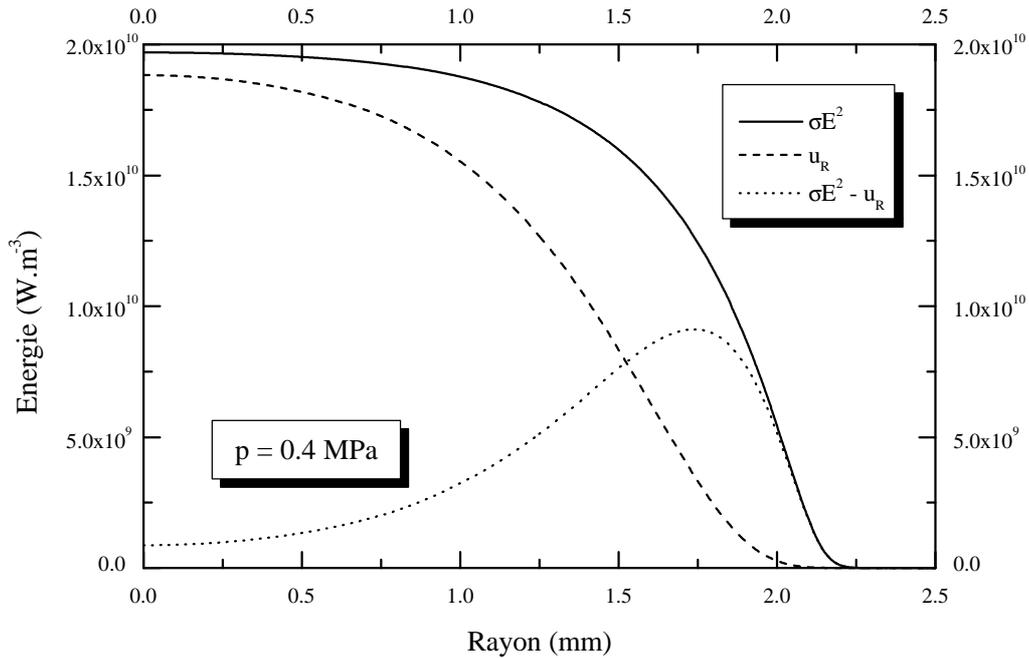


Figure 34 : Termes d'énergies ($p = 0.4 \text{ MPa}$).

III-3. EXTINCTION DE L'ARC STABILISE PAR PAROIS

III-3-1. Généralités

En régime transitoire les termes de conduction ainsi que les termes de convection interviennent dans le plasma ; toutefois la convection axiale est supposée négligeable. La pression est fixée à 0.1 MPa et reste constante à l'intérieur de la décharge pendant l'extinction. A l'extinction nous supposons que le champ E est nul. Ces hypothèses correspondent assez bien aux conditions d'extinction d'un arc stabilisé par parois [Lo-2]. Les inconnues à résoudre sont la vitesse radiale $v(t,r)$ ainsi que la température $T(t,r)$, celles-ci dépendent de deux variables : le temps et la coordonnées radiale. Nous faisons intervenir les équations de conservation de la masse (équation II-4) et celle de l'énergie (équation II-7). En coordonnées cylindriques, ces équations s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v) = 0 \tag{III-3}$$

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_P v \frac{\partial T}{\partial r} = -u_R + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (\text{III-4})$$

Dans cette deuxième équation les termes à gauche de l'égalité ont été rajoutés par rapport à l'équation du modèle stationnaire ; nous trouvons successivement le terme temporel et un terme de 'convection naturelle' provenant de la réduction du rayon d'arc. Nous initialisons le calcul ($t = 0$) à l'aide du profil de température calculé en régime stationnaire, la vitesse radiale est alors nulle. Pour ce modèle, l'équation de conservation de la quantité de mouvement n'est pas utilisée car la pression est constante suivant le rayon de la décharge.

III-3-2. Influence du pas Δt

Nous avons regardé l'influence du pas d'avancement en temps sur l'évolution du profil de température et du profil de vitesse radiale pour trois pas $\Delta t = 10^{-9}s, 10^{-7}s, 5 \cdot 10^{-7}s$. Les résultats montrent qu'un pas de $10^{-7}s$ est suffisant pour décrire l'extinction de la décharge. En effet les profils calculés pour un pas de temps de $10^{-9}s$ sont identiques à ceux obtenus pour un pas de $10^{-7}s$. D'autre part nous avons constaté que les profils calculés pour un pas supérieur à $10^{-7}s$ n'ont pas convergé. Pour les modèles à une dimension nous utiliserons donc un pas d'avancement sur le temps de $10^{-7}s$ pour la résolution des équations hydrodynamiques.

III-3-3. Résultats et commentaires

Nous présentons sur les figures 35 à 38 deux séries de résultats pour les 200 premières micro-secondes, le pas d'avancement étant de $10^{-7}s$, le rayon de la décharge est fixé à 2.5 mm et l'intensité initiale est de 100 A. La première série de résultats concerne un calcul dont le profil de température initial est caractérisé par une température de paroi de 300 K et un nombre de 1000 points. Sur les figures 35 et 36 nous avons représenté respectivement l'évolution des profils radiaux de la température et de la vitesse toutes les 5 μs . On observe sur toutes les courbes $T(r,t)$ une atténuation du gradient (deux sauts) pour des températures voisines de 1500 K et 3000 K. Ce phénomène se produit pour les valeurs correspondant aux pics de la conductivité thermique. Intéressons nous maintenant à l'évolution des profils de vitesse. A l'instant initial nous initialisons le calcul avec un profil de vitesse radiale nulle, on constate que dans la région où existe le fort

gradient de température la vitesse est maximale, ce maximum se déplace vers le centre de la décharge à mesure que le temps augmente. Le refroidissement de l'arc entraîne un phénomène de pompage : lorsque la température baisse, la densité de masse augmente ce qui se traduit par l'arrivée d'une certaine quantité de gaz froid venant de la paroi et se dirigeant vers le centre de la décharge. A mesure que la température augmente la viscosité du gaz augmente ; dans la zone où existe le fort gradient de température la vitesse du gaz diminue.

La deuxième série de résultats est relative à un calcul dont le profil de température initial est calculé en imposant une température de paroi de 3000 K. Ce profil ne comporte que 300 points car les pics de conductivité thermique ne sont pas présents (cf. III-2-4) dans la zone de température [300 K - 3000 K]. Pour cette série de résultat nous donnons uniquement les évolutions de la température axiale et de la conductance en fonction du temps. Sur la figure 37 nous avons tracé l'évolution de la température axiale en fonction du temps, cette dernière est représentative de la vitesse de refroidissement du plasma. Durant les 100 premières micro-secondes, la décroissance est rapide, la variation de la température axiale est pratiquement linéaire avec une pente de -10^8 K.s^{-1} dans le cas où la température de paroi est fixée à 300 K, ce qui est en accord avec les valeurs de la littérature [Mb-1]. La température sur l'axe décroît jusqu'à 4000 K environ. A partir de cet instant la décroissance est plus lente -10^7 K.s^{-1} . L'évolution de la température axiale, dans le cas où la température de paroi est fixée à 3000 K, décroît plus lentement que la précédente. L'absence des pics de conductivité thermique entre 300 K et 3000 K est responsable de ce phénomène, l'énergie de la décharge à du mal à s'évacuer ce qui se traduit par une vitesse de refroidissement plus lente.

La figure 38 montre les évolutions de la conductance en fonction du temps. Cette grandeur est le reflet du rayon d'arc (équation II-14) et permet de préjuger la capacité d'un gaz à retrouver sa rigidité diélectrique dans un laps de temps donné. Nous avons tracé les valeurs expérimentales obtenues par Hertz [He-5] ainsi que les calculs théoriques de Lowke [Lo-3] et les calculs effectués dans notre groupe [Gl-3]. Durant les 70 premières micro-secondes, la courbe relative au calcul où la température de paroi est de 300 K, présente une décroissance rapide, la conductance chute d'un facteur de 1000. A partir de $75 \mu\text{s}$ la pente diminue, l'évolution de la conductance devenant linéaire. Bien que les valeurs que nous ayons obtenues soient inférieures aux valeurs expérimentales de Hertz on remarque que cette courbe conserve la même allure générale que celle de Hertz. Les valeurs relatives au calcul, où la température de paroi est fixée à 3000 K, sont au dessus des valeurs expérimentales. En effet la vitesse de refroidissement est moins importante que pour le précédent calcul ce qui implique une augmentation de la résistivité du milieu.

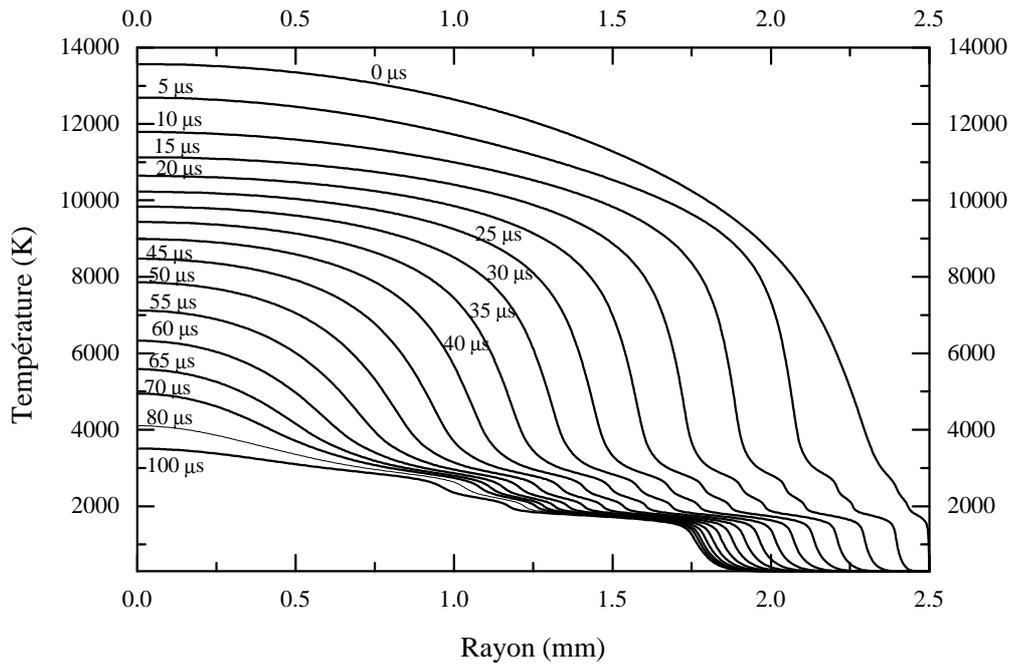


Figure 35 : Evolution du profil de température.

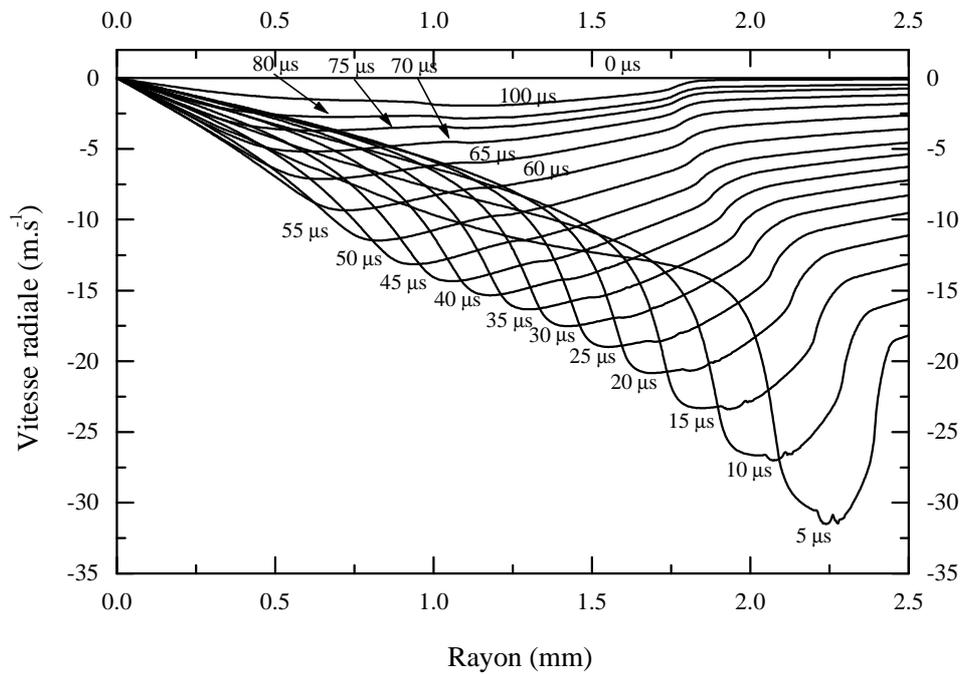


Figure 36 : Evolution du profil de vitesse radiale.

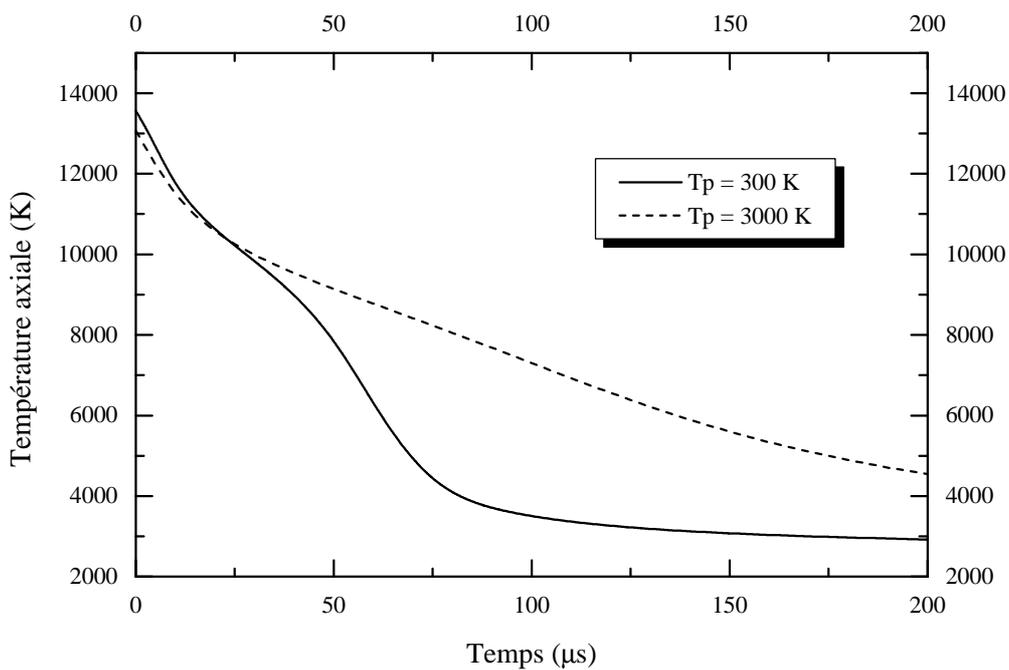


Figure 37 : Evolution de la température axiale.

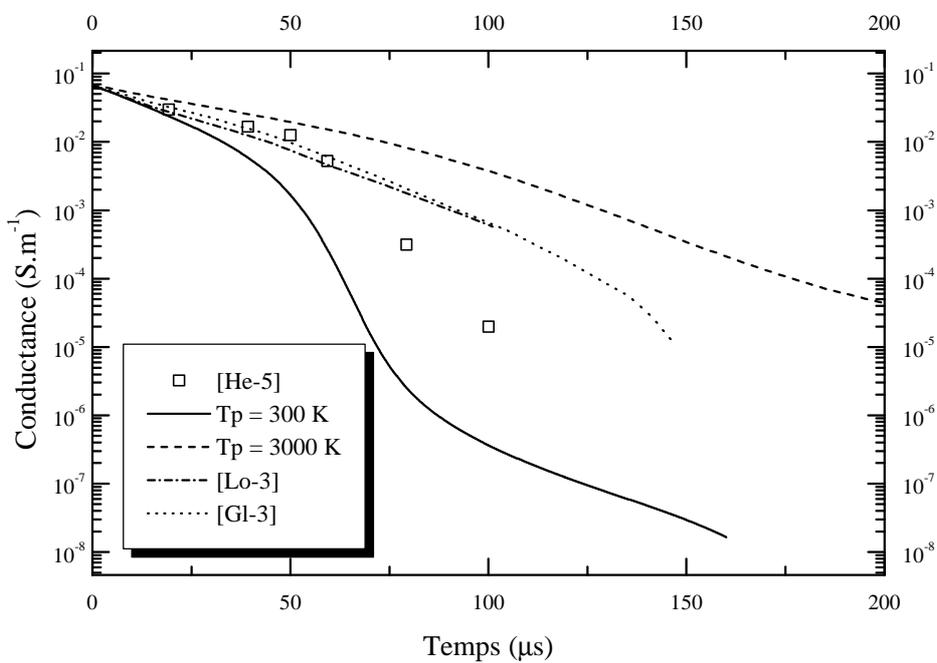


Figure 38 : Evolution de la conductance.

III-4. EXTINCTION DE L'ARC STABILISE PAR PAROIS, COUPLAGE HYDRO-CINETIQUE

III-4-1. Généralités

Cette partie décrit la phase d'extinction de l'arc et la finalité est de calculer l'évolution des profils de température et de vitesse ainsi que les évolutions des profils des densités des espèces. Dans un premier temps nous avons développé un modèle de cinétique chimique à couplage indirect. Ce modèle calcule les évolutions des profils des densités des espèces chimiques et utilise, sous forme de table, les profils de température et de vitesse calculés à partir d'un modèle hydrodynamique transitoire. Les problèmes de couplage survenus lors de l'élaboration de ce modèle nous ont obligés à développer un modèle couplant directement les calculs hydrodynamique et cinétique.

III-4-2. Choix des espèces

En régime stationnaire nous avons résolu le système en séparant la gamme de température (12000 K - 300 K) en trois sous-gammes ayant chacune un nombre limité d'espèces (cf. chapitre I). A l'extinction la température en un point donnée peut balayer plusieurs gammes. A chaque transition de gamme la chimie change et des problèmes, comme les conditions aux limites entre chaque sous-gamme, peuvent apparaître. Pour éviter les problèmes de condition aux limites nous avons choisi de résoudre les équations dans la gamme de température (12000 K - 2100 K) qui est constituée de 19 espèces (e^- , S, S^- , S^+ , S_2 , S_2^+ , SF^- , F^- , F^+ , SF^+ , F_2^+ , SF, F, F_2 , SF_2 , SF_3 , SF_4 , SF_5 , SF_6 cf. chapitre I). Cette première simplification impose une limite sur la valeur de la température de paroi qui ne peut pas être inférieure à 2100 K.

III-4-3. Calcul du profil initial de température

Le calcul du profil de température initial est important, car il va imposer les limites en température pour le modèle en extinction. Comme le but de cette étude est essentiellement d'établir

un premier modèle couplant l'hydrodynamique à la cinétique nous avons calculé un profil de température initial en apportant quelques simplifications qui sont :

- L'arc est stabilisé en imposant une température de paroi égale à 3000 K.
- Les codes cinétiques que nous utilisons calculent les densités des espèces uniquement pour une valeur maximale de la température de 12000 K, par conséquent nous choisirons une intensité, typiquement 50 A, telle que la température axiale calculée soit inférieure à 12000 K.
- Pour limiter le temps de calcul nous avons imposé un nombre de points suivant le profil radial égal à 300, les résultats paramétriques du modèle stationnaire (cf. III-2-2) confirme que ce nombre de points est suffisant.

Sur la figure 39 nous avons tracé le profil initial de température ; les caractéristiques ainsi que les principaux résultats du calcul sont donnés dans le tableau 8 ci-dessous.

R (mm)	I (A)	T_p (K)	$T(r=0)$ (K)	E ($V.m^{-1}$)
2.5	50	3000	10903	1193

Tableau 8 : Caractéristique du profil de température initial.

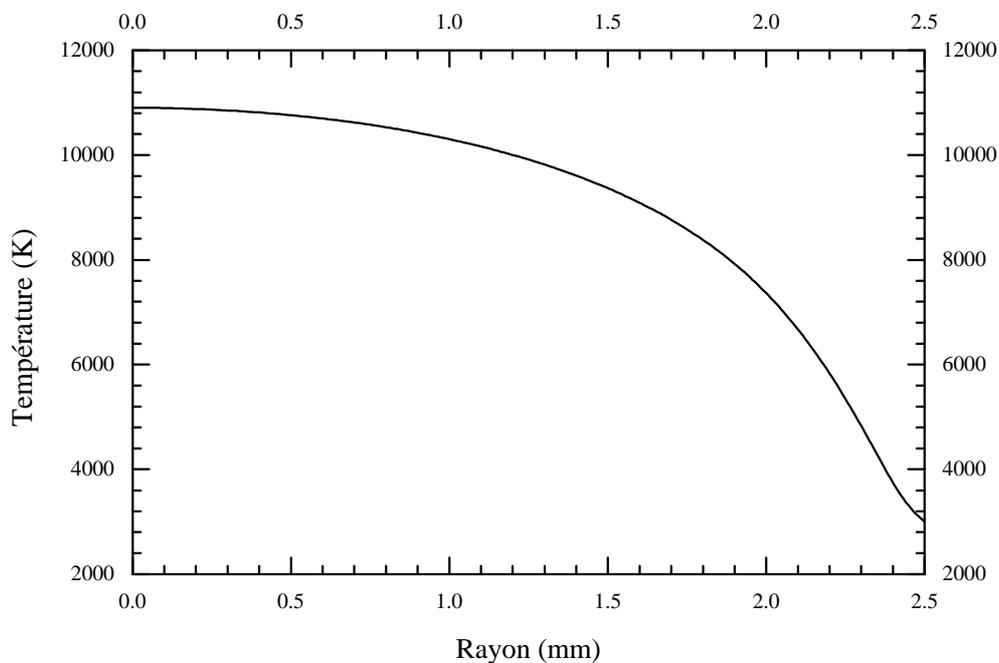


Figure 39 : Profil de température initial ($I = 50$ A, $p = 0.1$ MPa).

III-4-4. Equations

La pression moyenne est fixée à 0.1 MPa et reste pratiquement constante à l'intérieur de la décharge pendant l'extinction. La pression est calculée à partir de la loi des gaz parfaits (équation II-18) et est fonction des densités calculées. La dépression créée par le refroidissement et par la recombinaison des atomes en molécules est compensée par les termes convectifs de peuplement d'espèces. Les inconnues sont la température $T(r,t)$, la vitesse radiale $v(r,t)$, ainsi que les N densités des espèces $n_i(r,t)$. Nous résolvons les équations de conservation de la quantité de mouvement radiale, de conservation de l'énergie et des N équations de conservation des espèces. Les problèmes d'initialisation du calcul à l'extinction nous ont amenés à remplacer l'équation de conservation de la masse par l'équation de conservation de la quantité de mouvement radiale. Nous utilisons l'équation de la conservation de la neutralité électrique pour remplacer localement l'espèce chargée la plus importante. En coordonnées cylindriques, ces équations s'écrivent :

⇒ Conservation de la quantité de mouvement radiale

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho v \frac{\partial v}{\partial r} = \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu v r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{2\mu v}{r^2} \quad (\text{III-5})$$

⇒ Conservation de l'énergie

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p v \frac{\partial T}{\partial r} = -u_R + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (\text{III-6})$$

⇒ Equation de continuité des espèces

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r n_i v) = Ca_i - n_i Da_i \quad (\text{III-7})$$

⇒ Conservation de la charge

$$\sum_i q_i n_i = 0 \quad (\text{III-8})$$

Le tableau 9 présente les différentes conditions aux limites utilisées.

r	T	v	n
0	$\left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_{r=0} = 0$	$v(0) = 0$	$\left(\frac{\partial n_i}{\partial r}\right)_{r=0} = 0$
R	T_p	$\left(\frac{\partial \rho v}{\partial r}\right)_{r=R} = 0$	n_i ETL

Tableau 9 : Conditions aux limites.

III-4-5. Résolution

La résolution en régime transitoire débute par l'initialisation des profils de densités à partir du profil de température et de la composition, calculés en régime stationnaire. Pour chaque pas de temps 'dt' nous calculons les profils de densités de toutes les espèces, la densité électronique est calculée à partir de la relation de neutralité (équation III-8), les autres espèces sont calculées classiquement suivant le modèle cinétique.

Pour gagner du temps de calcul nous calculons les profils de température et de vitesse pour un pas d'avancement sur le temps hydrodynamique supérieure à celui de la cinétique chimique (cf. II-4). La densité de masse et la pression sont calculées à l'aide des relations (équations II-2 et II-18) qui couplent la partie cinétique à la partie hydrodynamique. Le critère de convergence repose sur la variation de la somme des termes sources entre deux itérations.

III-4-6. Modèle de référence

Dans l'intention de confirmer les calculs du modèle hydro-cinétique à une dimension nous avons simulé l'extinction de l'arc en considérant les hypothèses du modèle hydrodynamique sans cinétique présenté au paragraphe (III-3) Les figures 40 et 41 représentent respectivement les évolutions des profils radiaux de la température et de la vitesse toutes les 20 μ s.

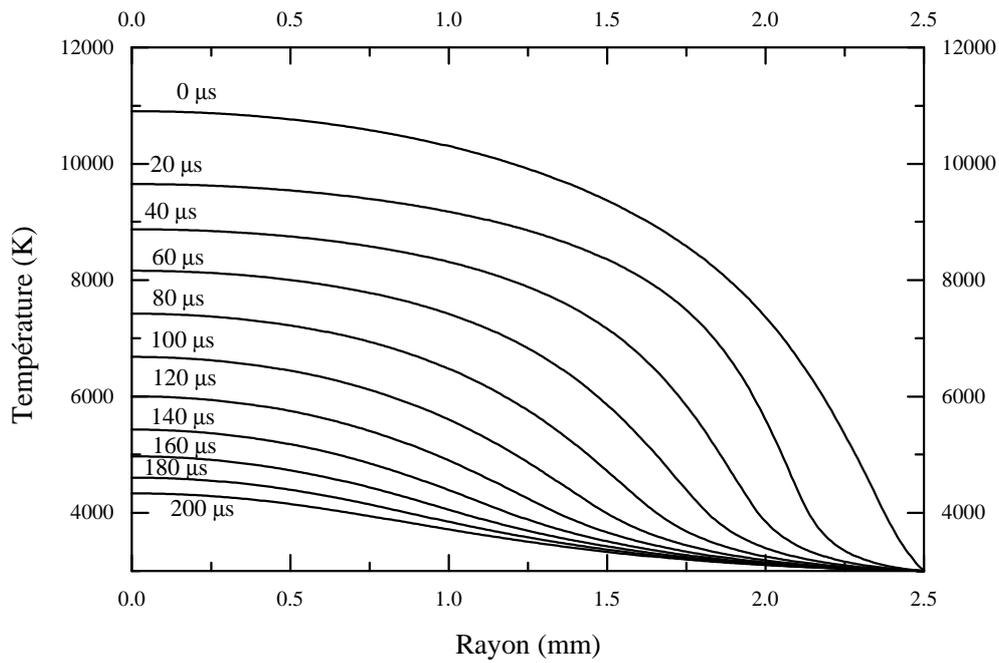


Figure 40 : Evolution du profil de température (modèle de référence).

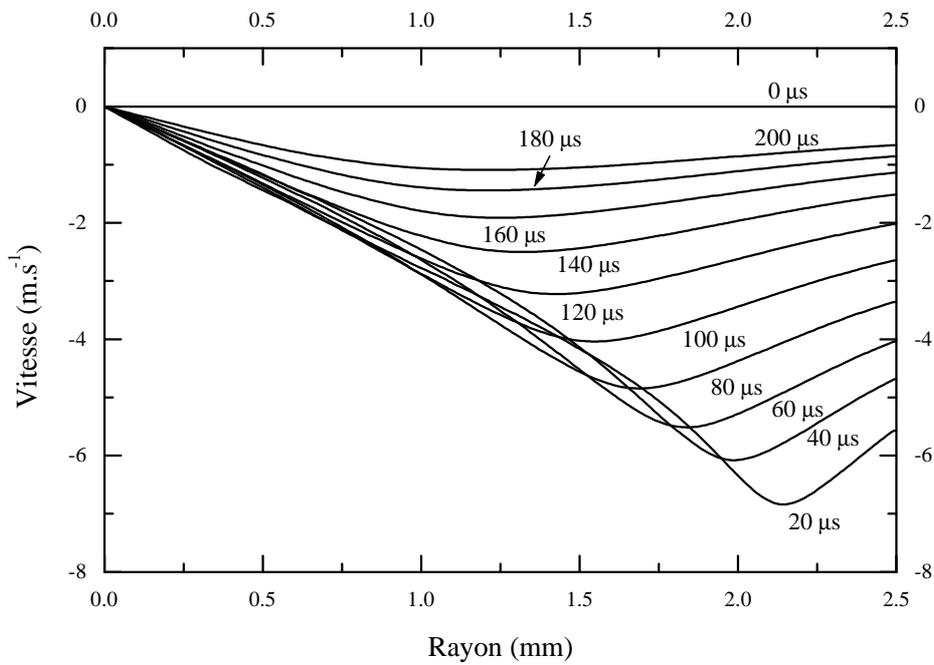


Figure 41 : Evolution du profil de vitesse radiale (modèle de référence).

III-4-7. Résultats et commentaires

Nous présentons sur les figures 42 à 51 une série de résultats pour les 200 premières microsecondes, le pas d'avancement étant de 10^{-9} s pour la cinétique et de 10^{-8} s pour le calcul de la température et de la vitesse.

III-4-7-1. Profils de température et de vitesse

Sur les figures 42 et 43 nous avons tracé les évolutions des profils radiaux de la température et de la vitesse toutes les 20 μ s. Le premier profil de température correspond au profil calculé à l'instant initial. A l'extinction nous avons obtenu une vitesse de refroidissement d'environ $-4 \cdot 10^7$ K.s⁻¹ sur l'axe. Cette valeur est inférieure à la valeur expérimentale [Mb-1] (qui est d'environ -10^8 K.s⁻¹) ; nous pouvons justifier cette différence par le fait que les pics de conductivité thermique situés à 1800 K et à 2200 K ne sont pas pris en compte puisque la température de paroi est imposée 3000 K, ce qui ne permet pas un refroidissement rapide. On constate que l'évolution du profil de température concorde avec l'évolution du profil de température calculé dans le cas où la cinétique n'est pas prise en compte (figure 40).

Intéressons-nous maintenant à l'évolution des profils de vitesse (figure 43). A l'instant initial nous initialisons le calcul avec un profil de vitesse radiale nulle ; dans la région où existe le fort gradient de température la vitesse est maximale, ce maximum est atteint en moins de 20 μ s et se déplace vers le centre de la décharge à mesure que le temps augmente. Il faut noter qu'au début de l'extinction les vitesses calculées fluctuent jusqu'à 100 μ s (figure 44) et peuvent être positives dans la région centrale de l'arc, durant les premières microsecondes. Il faut considérer dans la réalité que l'extinction de l'arc entraîne une certaine dépression dans le milieu. Le modèle calcule la température et la vitesse pour une pression fixée à 0.1 MPa, le terme de convection ne pouvant pas compenser cette dépression nous obtenons des vitesses positives. Les profils à l'extinction sont comparables avec les profils calculés dans la configuration où la cinétique n'est pas prise en compte (figure 41).

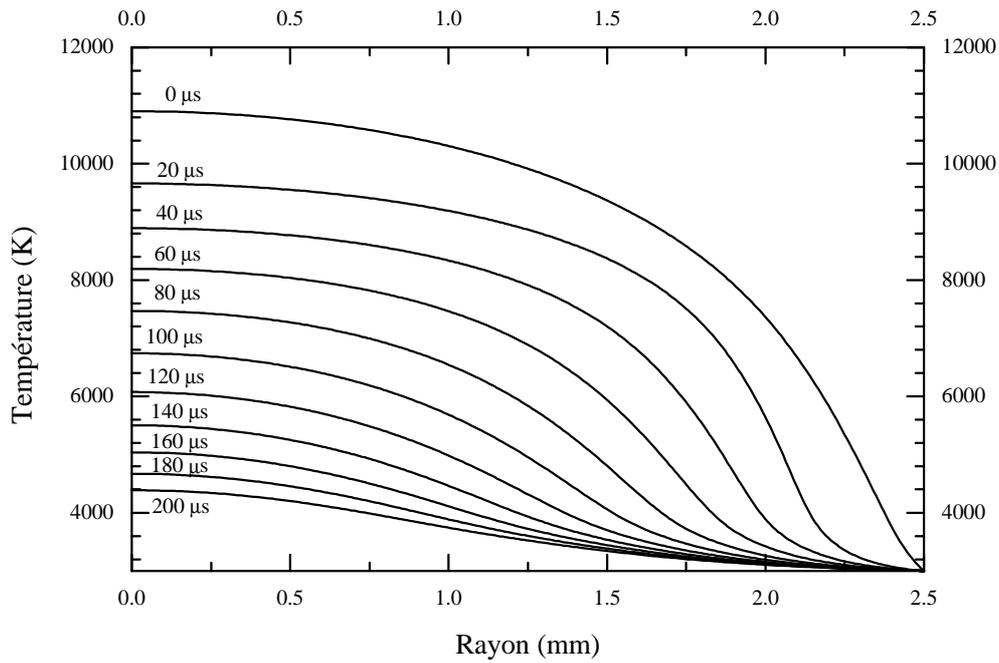


Figure 42 : Evolution du profil de température.

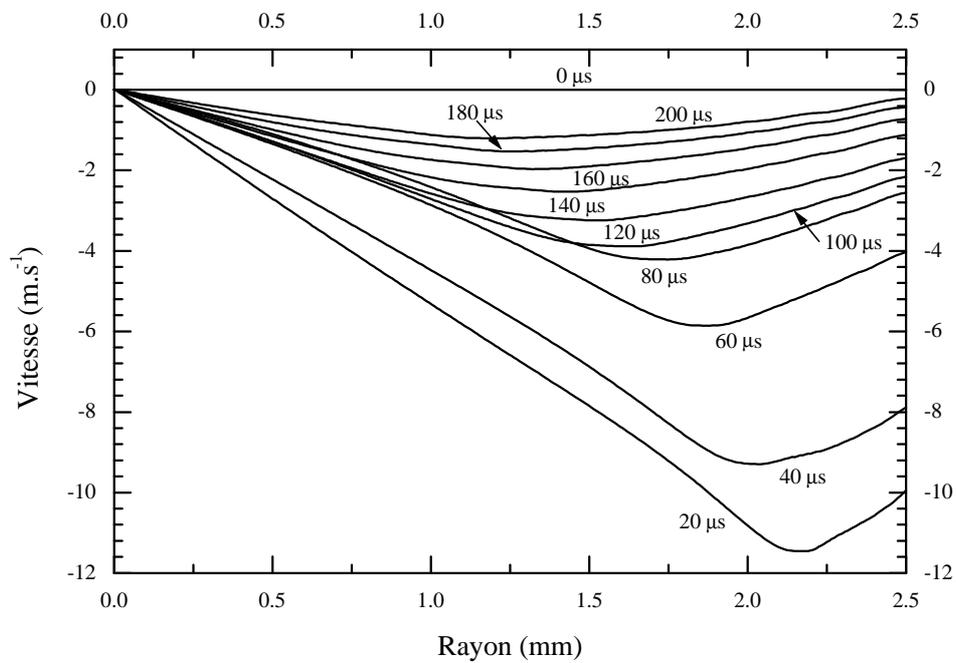


Figure 43 : Evolution du profil de vitesse radiale.

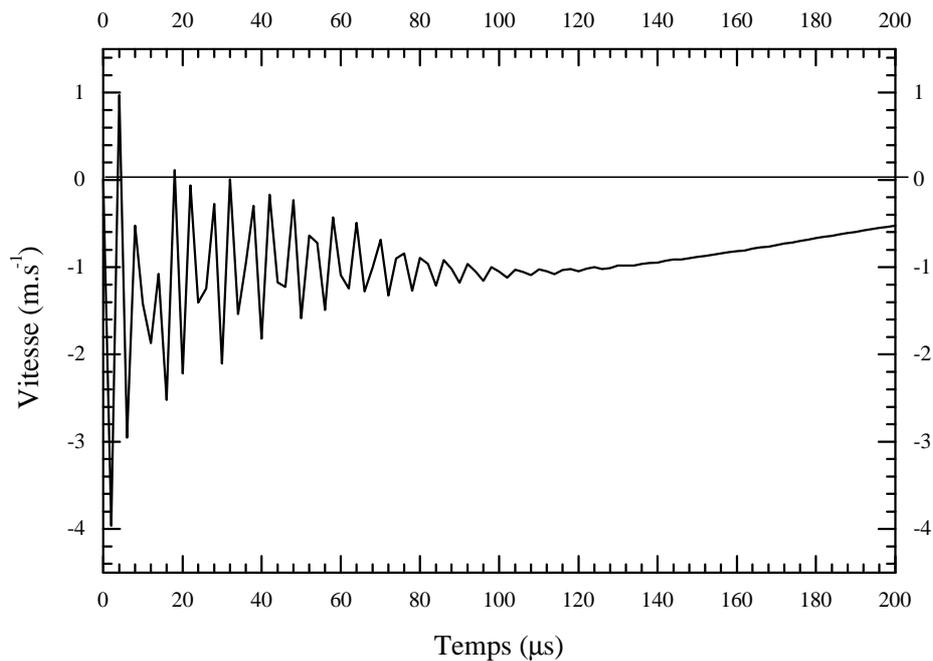


Figure 44 : Evolution de la vitesse radiale proche de l'axe ($r = 0.4$ mm).

III-4-7-2. Etude sur l'axe

Sur les figures 45 et 47 nous avons tracé les évolutions des densités au centre de la décharge en fonction du temps. Ces figures montrent que les espèces F et S sont majoritaires, celles-ci sont caractérisées par une faible variation durant l'extinction. Pour les espèces ioniques (figure 45) la densité de F^+ décroît fortement, les électrons et les ions S^+ présentent la même évolution ; à partir de $190 \mu s$ ($T = 4500$ K) les électrons cessent d'être majoritaires au profit des ions F^- .

Intéressons nous maintenant aux évolutions des densités normalisées à l'équilibre (figures 46 et 48). Les densités d'équilibre sont données par la composition du plasma à l'équilibre. Durant les 50 premières micro-secondes la densité de F^+ s'écarte le plus de la valeur calculée à l'équilibre. De même, on voit distinctement qu'il existe deux familles d'évolution, la première est composée des espèces e^- , SF^- , S^- et S^+ , la seconde est composée des espèces S_2^+ , F_2^+ et SF^+ , l'ion F^+ rejoint cette famille à partir de $100 \mu s$. Le maximum d'écart entre les deux familles se situe à $100 \mu s$, soit pour une température axiale égale à 6650 K. Les espèces neutres (figure 48) s'écartent très peu de l'équilibre, seule l'espèce S_2 présente une forte variation. Les fluctuations pendant les 50 premières micro-secondes sont dues aux fluctuations des vitesses.

III-4-7-3. Ecart à l'équilibre

Sur les figures 49 et 50 nous avons tracé respectivement les profils radiaux des densités ainsi que les profils normalisés des espèces ionisées et de SF à $t = 100 \mu\text{s}$. Nous retrouvons les deux familles d'évolution définies au paragraphe précédent (III-4-7-2). La première famille est composée d'espèces dont le rapport n / n_{ETL} est supérieur à 1 dans la partie axiale de la décharge (électron, S^- , S^+ , SF^- et F^-). La seconde famille est composée d'espèces dont le rapport n / n_{ETL} est inférieur à 1 dans la partie axiale de la décharge (F^+ , SF^+ , S_2^+ et F_2^+). Ces résultats montrent principalement que les électrons sont en surpopulation par rapport à l'équilibre dans la région centrale, ce qui est vérifié à tous les instants (figure 51). Il faut toutefois remarquer que sur les bords de l'arc, les résultats du modèle indiquent une légère sous population électronique par rapport à la composition d'équilibre. Cet effet, bien que très léger, va dans le sens de ce qu'on souhaite mettre en évidence, à savoir que la convection de gaz froid peut entraîner, par attachement électronique sur les molécules, une diminution de la densité des électrons. Cette tendance existe mais reste, dans nos conditions d'étude actuelles, très faible.

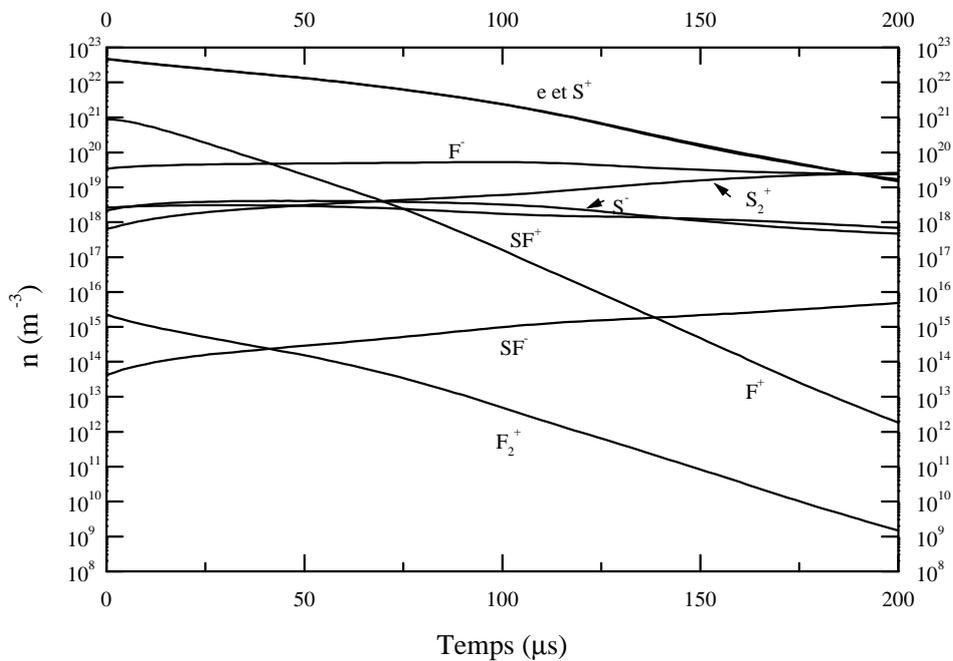


Figure 45 : Evolutions de la densité des espèces ionisées ($r = 0$).

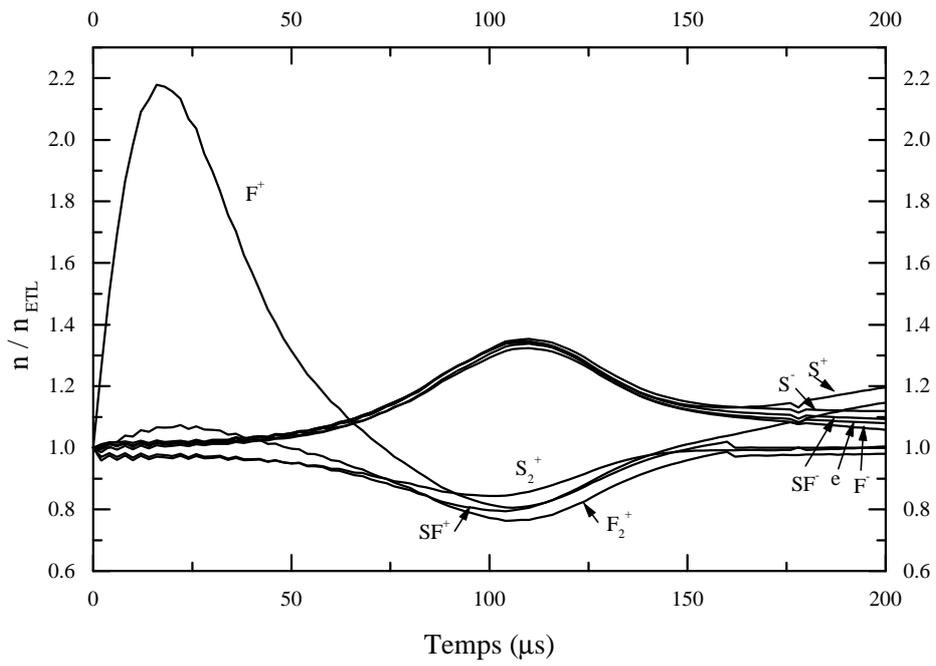


Figure 46 : Evolutions du rapport n / n_{ETL} des espèces ionisées ($r = 0$).

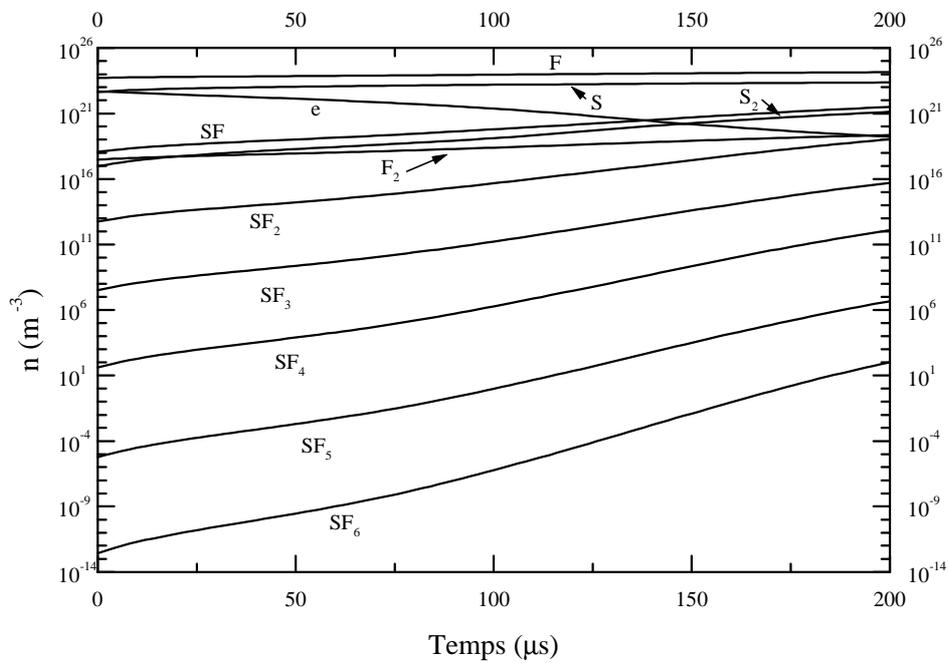


Figure 47 : Evolutions de la densité des espèces neutre ($r = 0$).

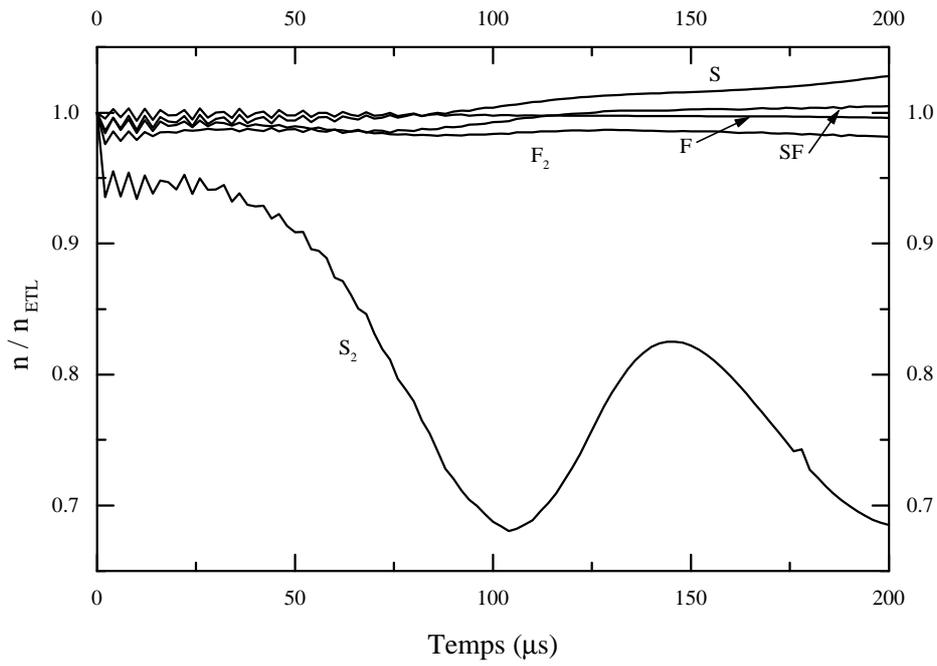


Figure 48 : Evolutions du rapport n/n_{ETL} des espèces neutres ($r=0$).

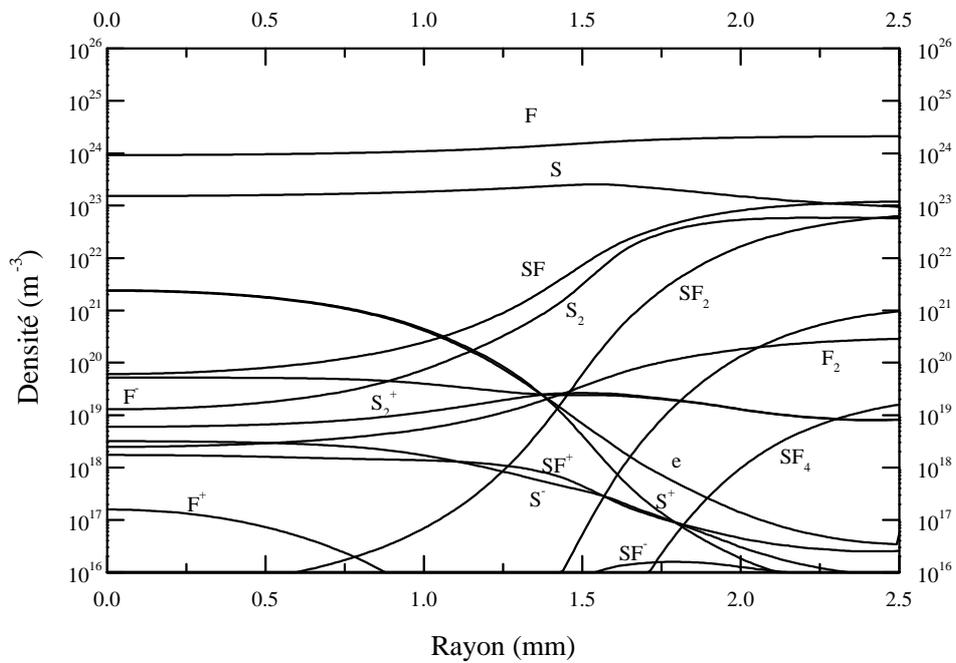


Figure 49 : Profils radiaux des densités ($t=100 ns$).

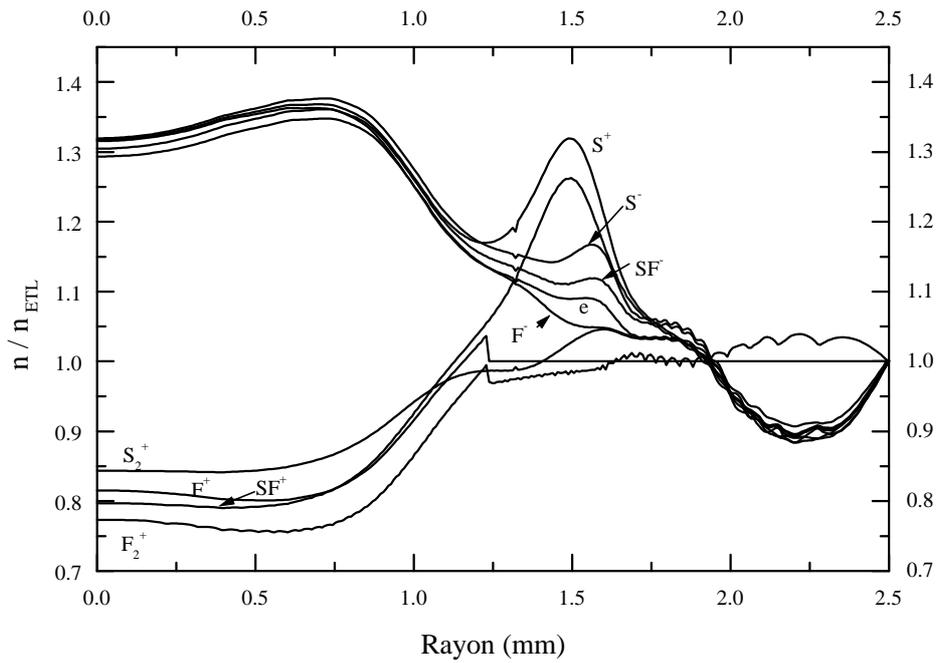


Figure 50 : Profils radiaux des densités normalisées à l'équilibre ($t = 100 \text{ ns}$).

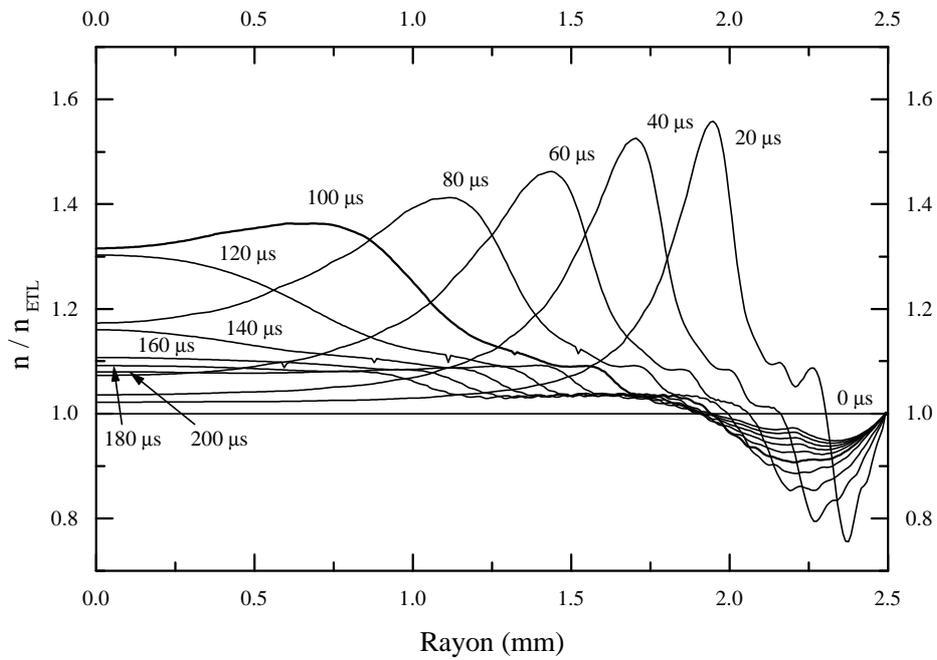


Figure 51 : Evolutions du profil radial de la densité électronique normalisées à l'équilibre.

III-5. CONCLUSION

Le couplage entre un modèle hydrodynamique simplifié d'un arc de SF₆ en extinction avec un modèle cinétique a été réalisé au cours de ce chapitre. Ce travail a été rendu difficile par la durée d'exécution du code et par les instabilités qui peuvent être engendrées sur les profils de vitesse et d'évolution de la pression lors du couplage entre les deux modèles. Le pas en temps doit être soigneusement optimisé.

Les objectifs attendus sur l'étude du modèle à une dimension ont tous été atteints. Les principaux résultats peuvent être résumés ainsi :

- le couplage entre les modules hydrodynamique et cinétique est réalisé avec la densité de masse et la conservation de la pression.
- il est important de ne garder dans le modèle cinétique que les espèces pouvant jouer un rôle dans les écarts à l'équilibre.
- nos résultats montrent que les espèces polyatomiques de type SF_X (avec $2 \leq X \leq 6$) se dissocient très rapidement dès que la température est supérieure à 3000 K et ne sauraient constituer un moyen de faire disparaître les électrons dans les circonstances étudiées ici. Rappelons que notre étude tient compte d'une convection régulière et que l'éventuel caractère turbulent de l'écoulement n'est pas pris en compte dans la simulation des mouvements réels du fluide, tels que des tourbillons par exemple.
- les résultats montrent que sur les bords du plasma la densité électronique tend à devenir légèrement inférieure à la concentration d'équilibre. Ce phénomène semble être dû à la pénétration d'espèces diatomiques dans le plasma, mais l'effet dans nos conditions d'étude reste faible.

CHAPITRE IV

MODELES A DEUX DIMENSIONS

CHAPITRE IV- MODELES A DEUX DIMENSIONS

IV-1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous présentons l'étude d'une modélisation d'un arc de disjoncteur pour une géométrie bidimensionnelle simplifiée. Nous présentons deux types de modèles. Le premier est relatif à l'étude de l'arc en régime stationnaire, le deuxième concerne l'extinction de l'arc. Les résultats du modèle en régime stationnaire, nous serviront à initialiser le modèle en régime transitoire. Nous étudions l'influence de certains paramètres physiques, tout d'abord l'influence du débit d'entrée ensuite l'influence de la pression. Une analyse systématique nous permet alors d'expliquer les caractéristiques physiques observées dans le plasma.

L'objectif de cette modélisation est de mettre en évidence les mécanismes qui régissent les écarts à l'équilibre chimique lors de l'extinction et leur influence éventuelle sur l'évolution de la conductance de l'arc. Nous avons choisi pour cela une géométrie simplifiée (par rapport à une géométrie réelle du disjoncteur).

IV-2. DOMAINE DE CALCUL

La géométrie employée est schématisée sur la figure 52 dans une représentation cylindrique. Le tableau 10 présente les différentes conditions aux limites utilisées. Les conditions aux limites sur les densités ne s'appliquent que pour le régime transitoire. Les dimensions du domaine de calcul sont respectivement de 3 cm pour la direction axiale et de 0.5 cm pour la direction radiale. Le domaine est découpé en deux zones. La première zone (ACHJ) délimite le domaine où l'arc va s'établir. La seconde zone (JHDG) correspond à un caisson où le gaz se détend et s'évacue en (EF).

La section (AB) délimite l'électrode amont, le profil de température que nous imposons à l'électrode est calculé avec le modèle à une dimension dans le cas stationnaire (cf. IV-1). Pour le régime transitoire, la solution sur l'électrode est obtenue par la résolution des équations (III-3) et (III-4).

L'étude réalisée au paragraphe (II-4) a montré que les écarts à la composition d'équilibre pour $T < 3000$ K sont minimes, à cause du très petit temps de relaxation des espèces polyatomiques. De ce fait les densités de ces espèces peuvent être considérées comme étant à l'équilibre chimique. La zone de température comprise entre 2100 K et 3000 K (figure 1) correspond à une zone de transition où les espèces diatomiques se recombinaient en espèces polyatomiques. Or ce brusque changement de population entre espèces diatomiques et espèces polyatomiques peut provoquer des instabilités numériques pour notre modèle. Pour s'affranchir de ce problème nous avons imposé une température de paroi (BCD) égale à 3000 K. Pour notre étude, la valeur de la température de paroi a peu d'influence sur le déséquilibre chimique des électrons. En effet en dessous de 3000 K la densité électronique est très faible.

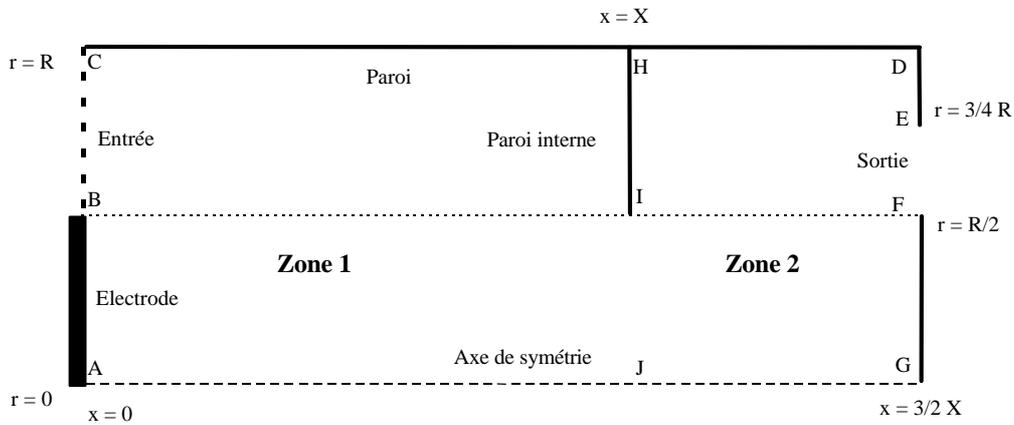


Figure 52 : Schéma de la géométrie simplifiée.

L'entrée de l'écoulement se situe de B à C. En régime stationnaire la forme du profil de la vitesse axiale $u(r)$ est parabolique ; ce profil est déterminé par la valeur du débit de gaz initiale ' D_0 ' :

$$D_0 = 2\pi \int_{R/2}^R \rho u r dr \quad (\text{IV-1})$$

A l'extinction la vitesse axiale à l'entrée (et donc le débit) est augmentée linéairement en fonction du temps, simulant l'entrée d'une quantité supplémentaire de gaz lors de l'extinction. Cette

augmentation est imposée suivant les équations (IV-2) et dépend de deux paramètres : le temps d'établissement ' τ_d ' et la valeur maximale du débit ' D_{\max} '. Ce procédé permet d'avoir une convection forte lors de l'extinction de l'arc, tout en limitant la température maximum lors du régime stationnaire.

$$\left. \begin{aligned} D(t) &= D_0 + (D_{\max} - D_0) \frac{t}{\tau_d} & 0 < t < \tau_d \\ D(t) &= D_{\max} & t > \tau_d \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV-2})$$

Sur les parois extérieures (CD, DE et FG) nous avons imposé des conditions d'adhérence, la température est fixée à 3000 K. GA représente l'axe de symétrie. HI délimite la paroi interne, les conditions imposées sont identiques à celles des parois extérieures. La section IJ, à travers l'électrode poreuse, délimite la zone d'arc de celle du jet, elle représente l'électrode creuse qui existe dans les disjoncteurs. A l'extinction les densités imposées à la sortie (EF) sont à l'équilibre.

	AB	BC	CD	DE	EF	FG	GA	HI
u	0	u(r,t)	0	0	$\frac{\partial u}{\partial x} = 0$	0	$\frac{\partial u}{\partial x} = 0$	0
v	v(1D)	0	0	0	0	0	0	0
T	T(1D)	3000 K	3000 K	3000 K	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	3000 K	$\frac{\partial T}{\partial x} = 0$	3000 K
n	n_{ETL}	n_{ETL}	$\frac{\partial n}{\partial r} = 0$	n_{ETL}	n_{ETL}	n_{ETL}	$\frac{\partial n}{\partial r} = 0$	n_{ETL}
p	p_0	p_0	$\frac{\partial p}{\partial r} = 0$	p_0	p_0	p_0	$\frac{\partial p}{\partial r} = 0$	p_0

Tableau 10 : Conditions aux limites.

La géométrie et les ouvertures du domaine ainsi définies permettent de s'approcher des conditions d'écoulement dans un disjoncteur, tout en gardant une forme très simplifiée. Ainsi fixée,

la position des électrodes induit une composante radiale de la vitesse, qui associée à l'aspiration du gaz liée au refroidissement du plasma, produit un soufflage assez efficace de la colonne d'arc.

IV-3. MODELE STATIONNAIRE

IV-3-1. Procédure de calcul

En régime stationnaire, nous supposons que le plasma est en équilibre thermodynamique local (ETL) et les grandeurs à calculer sont la température, les vitesses et la pression. Celles-ci sont fonctions des variables locales r et x . Le profil de température est initialisé à partir du modèle à une dimension sur tout le domaine. En coordonnées cylindriques les équations de conservations de la masse (équation II-4), de quantité de mouvement (équation II-5) et de l'énergie (équation II-7) prennent les formes suivantes :

Equation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v) = 0 \quad (\text{IV-3})$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement axiale :

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = - \frac{\partial p}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (\text{IV-4})$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement radiale :

$$\rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial r} = - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2 \mu v}{r^2} - J_x B_\theta \quad (\text{IV-5})$$

Equation de conservation de l'énergie :

$$\rho u \frac{\partial h}{\partial x} + \rho v \frac{\partial h}{\partial r} = + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \sigma E^2 - 4 \pi \epsilon_N + u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial r} \quad (\text{IV-6})$$

$$\text{avec } \Gamma = \frac{K}{C_p}$$

Dans nos calculs, nous considérons le champ électrique axial E_x constant sur chaque section de l'arc. Nous utilisons la loi d'Ohm pour relier le champ électrique à l'intensité de courant (équations II-13 et II-14), le champ électrique dans la deuxième zone est nul. L'équation de conservation de la masse est résolue sous forme de correction de pression (cf. II-3-5). Afin de ne pas excéder la valeur limite en température ($T = 12000$ K) des tables cinétiques du modèle transitoire, nous avons calculé le champ de température initial en fixant une intensité stationnaire initiale égale à 50 A. Le maillage est composé de 40 points suivant la direction radiale et de 60 points suivant la direction axiale.

IV-3-2. Caractéristiques générales

Nous présentons les résultats obtenus pour une intensité de 50 A et pour une pression d'entrée fixée à 0.1 MPa. Le débit imposé à l'entrée est de 0.2 g.s^{-1} pour une température de 3000 K, ce qui nous donne une vitesse d'entrée maximale de 54 m.s^{-1} . A l'électrode, nous imposons le profil de température calculé en III-4-3.

La figure 53 illustre le champ de température. La région la plus chaude du plasma se situe sur l'axe, au niveau du resserrement géométrique lié à la présence de la paroi interne. A ce niveau, le pincement de l'arc réduit la zone de conduction électrique et conduit à un échauffement sur l'axe. Nous constatons que le rayon de l'arc reste sensiblement égal à celui que nous avons imposé à l'électrode. Au niveau du caisson les isothermes ont tendance à s'écarter et à la sortie du caisson on remarque un important gradient de température sur la paroi.

Sur les figures 54 et 55 nous avons tracé respectivement le champ du vecteur vitesse de l'écoulement ainsi que le champ de la fonction courant de masse (stream). Ce dernier nous permet de visualiser rapidement la répartition de la masse qui circule. On remarque que la vitesse radiale est faible devant la vitesse axiale dans la zone inter électrode. Le champ de la fonction courant de masse montre que 70 % de la masse circule sur le bord de la décharge pour une température inférieure à 8000 K. Au niveau de la paroi interne le resserrement géométrique conduit à une augmentation importante de la vitesse axiale ce qui implique un resserrement des isocontours de la fonction courant de masse. L'augmentation de la vitesse axiale située à la sortie de la première zone est corrélée à l'augmentation de la température. En effet le gaz à l'entrée est injecté sur une couronne avec une composante axiale de la vitesse. Il ne pénètre alors que très peu dans le cœur du plasma. Sur la section IJ le gaz possède une surface de sortie plus étroite qu'à l'entrée. Les vitesses

radiales augmentent alors vers la sortie provoquant un confinement du plasma et une remontée de la température. On observe une recirculation du fluide située dans le caisson au niveau de la paroi (HD).

IV-3-3. Influence du débit

Nous allons présenter l'influence du débit d'entrée sur le comportement et les propriétés générales de l'arc. Par rapport au modèle précédent (cf. IV-3-2) le débit et la vitesse d'entrée sont divisés par 10 ($D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$, $u_0 = 5.4 \text{ m.s}^{-1}$), la pression et le maillage restent inchangés.

Les figures 56 à 58 présentent respectivement le champ de température, le champ du vecteur vitesse ainsi que la fonction courant de masse. Sur les figures 59 et 60 nous avons tracé le profil de la température (figure 59) et le profil de la vitesse axiale (figure 60) pour la côte $x = 2$. Nous avons reporté sur ces deux dernières figures les profils du cas de référence (cf. IV-3-2). Par rapport au cas précédent, le champ de température s'étale plus sur le bord de la décharge, ce qui se traduit par une baisse de la température axiale d'environ 1000 K. La baisse du débit semble moins confiner l'arc, ce qui provoque une augmentation du rayon d'arc. Les régions chaudes ($T > 10000 \text{ K}$) sont observées au niveau des électrodes. Proche de la paroi au niveau de l'électrode poreuse, la température calculée est de l'ordre de 4000 K (figure 59). Dans le caisson, nous notons un comportement identique, le champ de température s'étale et contrairement au cas à fort débit celui-ci ne s'écrase pas sur la paroi de sortie.

Le champ de vitesse (figure 57) montre un comportement similaire à celui du cas précédent, à savoir, une vitesse radiale faible devant la vitesse axiale dans la zone inter électrode et une augmentation de la vitesse au niveau du resserrement géométrique. La vitesse maximale est de 55 m.s^{-1} , celle-ci se situe après l'électrode poreuse et est neuf fois inférieure à la vitesse maximale dans le cas à fort débit. La fonction courant de masse (figure 58) présente des lignes de champ moins resserrées que dans le cas précédent, la recirculation qui existait au niveau de la sortie s'est décalée vers la paroi interne car lorsque le débit diminue, le gaz en périphérie de l'arc est moins entraîné par le mouvement d'ensemble à la sortie. Cette recirculation est moins importante que dans le cas précédent.

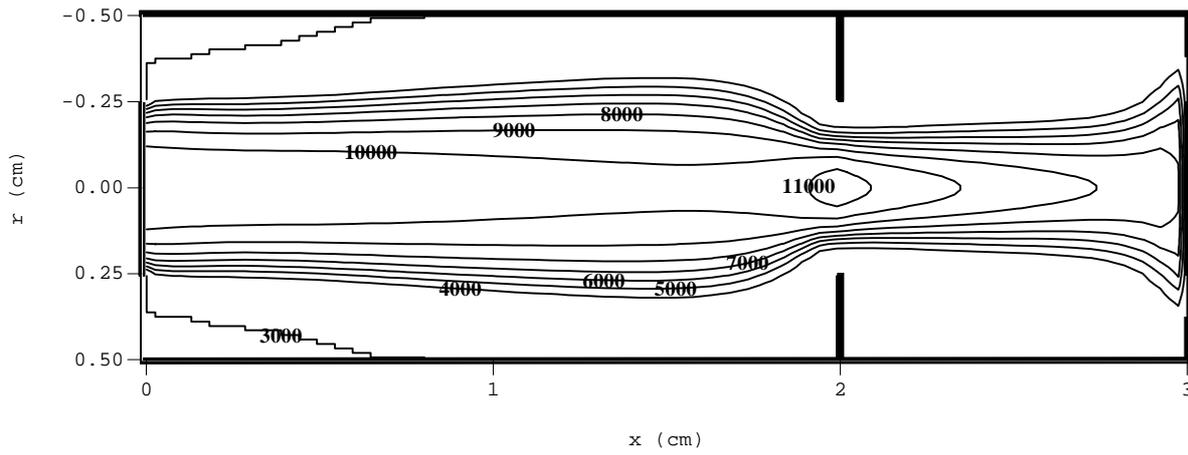


Figure 53 : Champ de température ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).

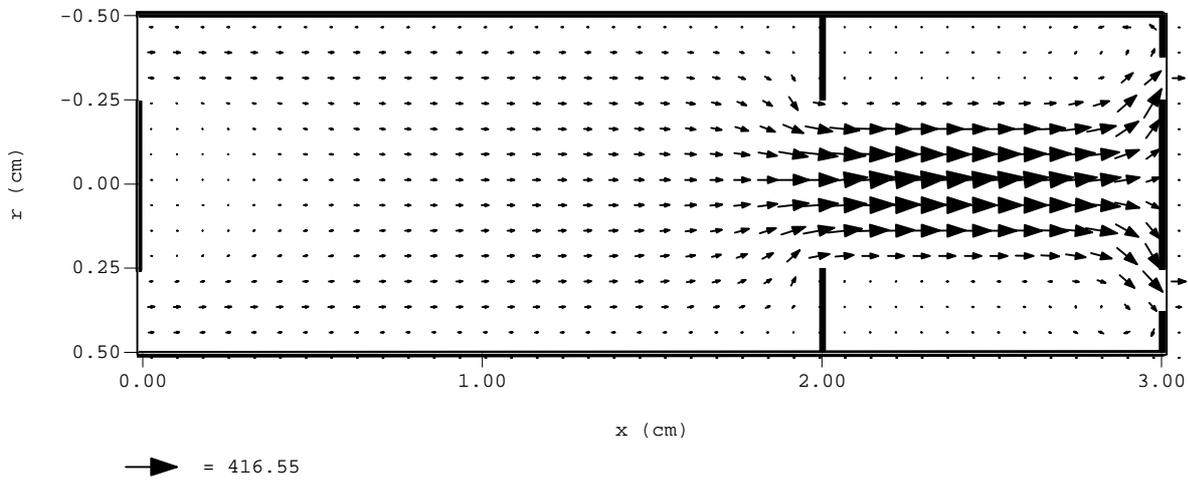


Figure 54 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).

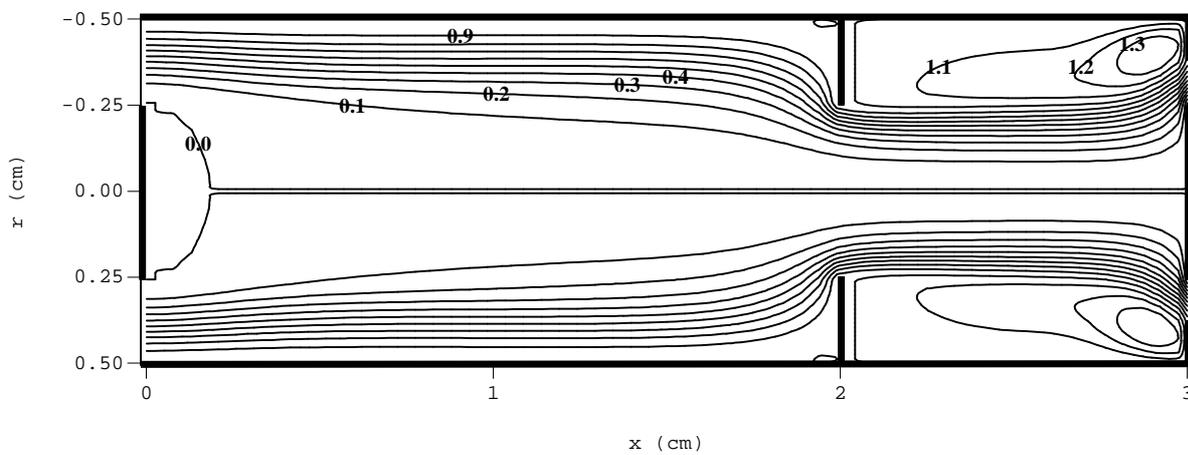


Figure 55 : Fonction courant de masse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).

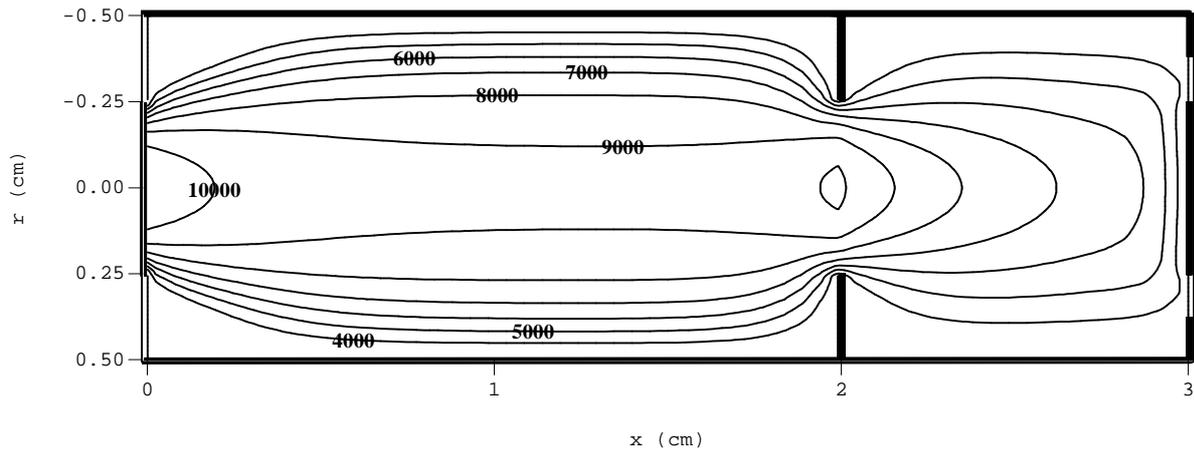


Figure 56 : Champ de température ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).

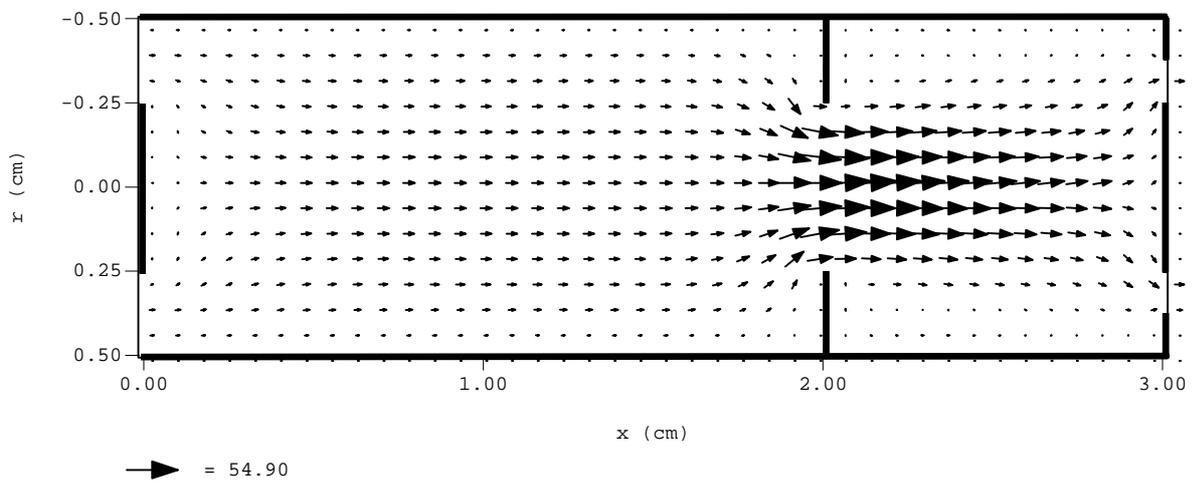


Figure 57 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).

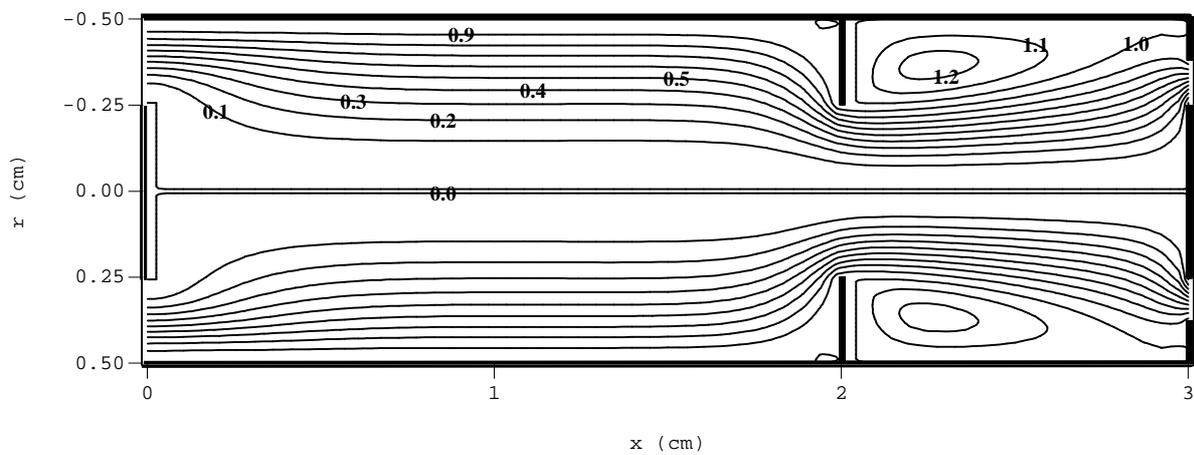


Figure 58 : Fonction courant de masse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).

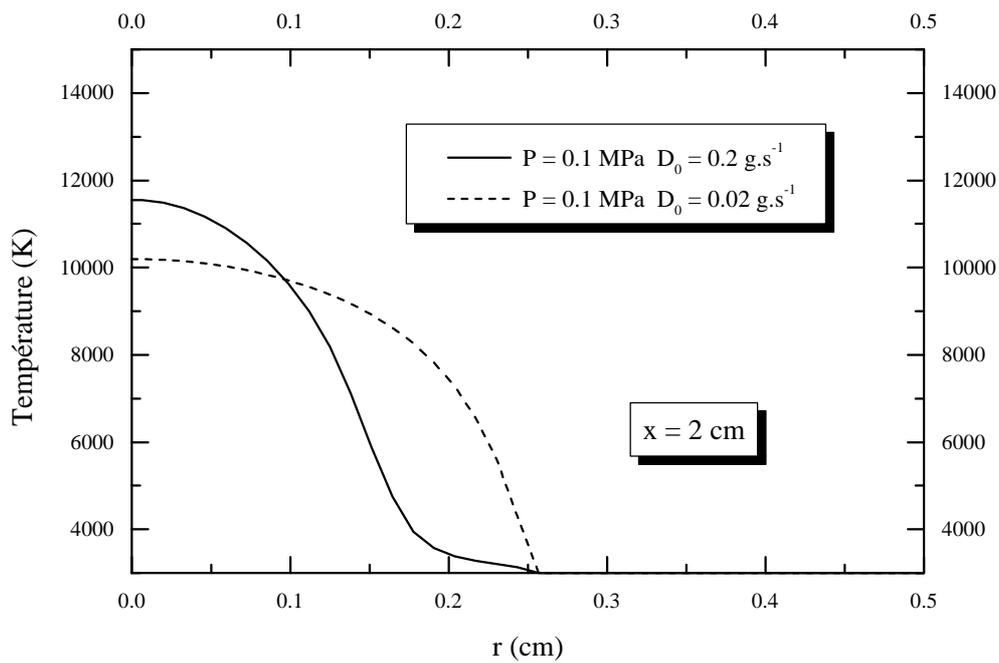


Figure 59 : Profils de température ($x = 2 \text{ cm}$).

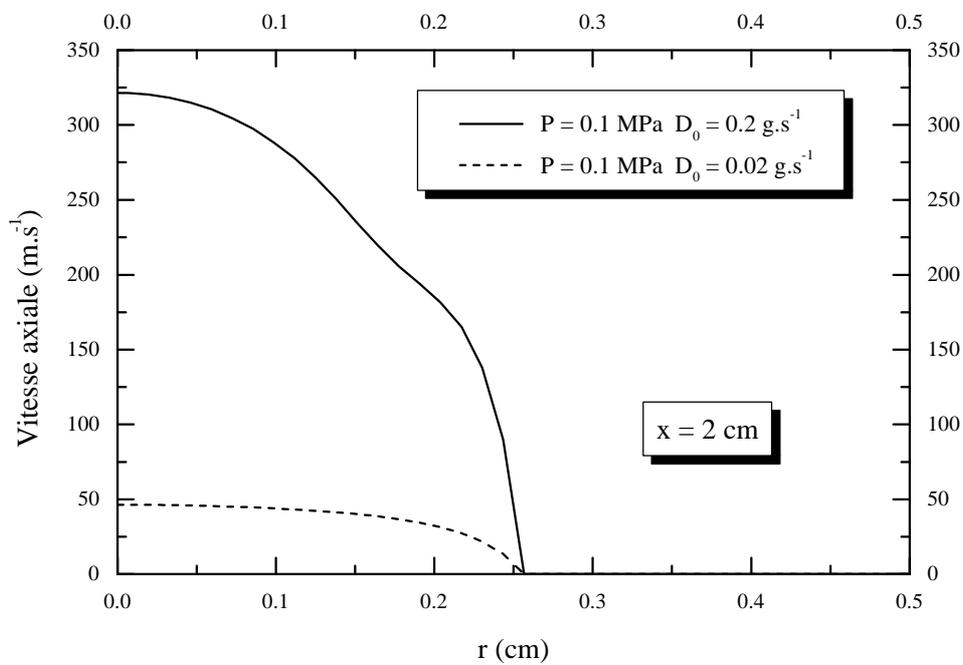


Figure 60 : Profils de la vitesse axiale ($x = 2 \text{ cm}$).

IV-3-4. Influence de la pression

Dans le chapitre précédent, l'étude de l'arc stabilisé par parois (modèle 1D) a montré que l'augmentation de la pression se traduisait par une baisse de la température axiale. Nous allons regarder dans ce paragraphe le comportement du plasma pour une pression fixée à 0.4 Mpa. Nous avons tracé sur les figures 61 et 62, les champs de température et du vecteur vitesse. Sur les figures 63 et 64 nous avons porté le profil de la température (figure 63) ainsi que le profil de la vitesse axiale (figure 64) pour la côte $x = 2$. Sur ces deux figures nous avons représenté les profils du cas de référence (cf. IV-3-2). Le profil de la vitesse axiale imposé à l'entrée est identique au profil au cas relatif à 0.1 MPa (cf. IV-3-2). Ce profil est caractérisé par une vitesse maximale de 54 m.s^{-1} , le débit d'entrée calculé pour une température de 3000 K est de 0.9 g.s^{-1} . Par rapport au cas à 0.1 MPa les lignes du champ de température sont plus resserrées, la température maximale obtenue est de l'ordre de 14000 K, celle-ci est située au niveau du resserrement géométrique. Le champ de vitesse (figure 62) montre un comportement similaire à celui de 0.1 MPa, la vitesse maximale atteint 375 m.s^{-1} et est légèrement inférieure à celle que nous avons obtenue dans le cas à basse pression. L'augmentation de la pression entraîne une augmentation du débit d'entrée (de part la dépendance de la densité de masse en fonction de la pression), l'arc est plus confiné ce qui se traduit par une diminution du rayon d'arc, cette diminution est bien mise en évidence sur la figure 63. A l'électrode poreuse, le profil de la vitesse axiale (figure 64) présente un plateau où la vitesse est constante pour une distance radiale comprise entre 0.1 cm et 0.2 cm. La température correspondant à ce plateau est inférieure à 3500 K et reste approximativement constante. Au niveau de la paroi interne, la déflexion du gaz due à l'augmentation de la vitesse radiale a pour conséquence de gagner l'arc de gaz froid ; ainsi le resserrement des isothermes entraîne d'une part une augmentation de la température et donc une diminution du rayon de l'arc et d'autre part un écoulement de gaz froid à vitesse constante entre le rayon de l'arc et la paroi interne.

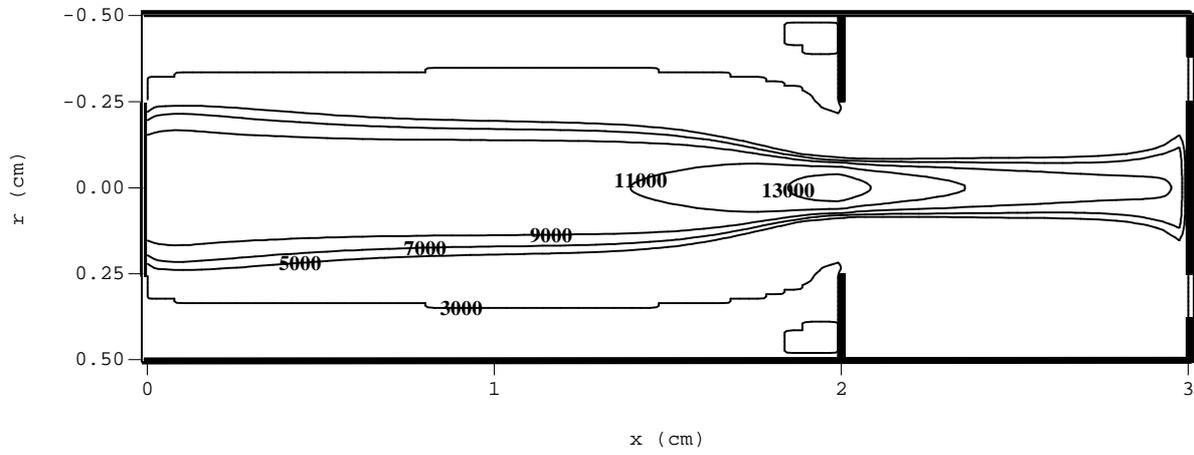


Figure 61 : Champ de température ($p = 0.4 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.9 \text{ g.s}^{-1}$).

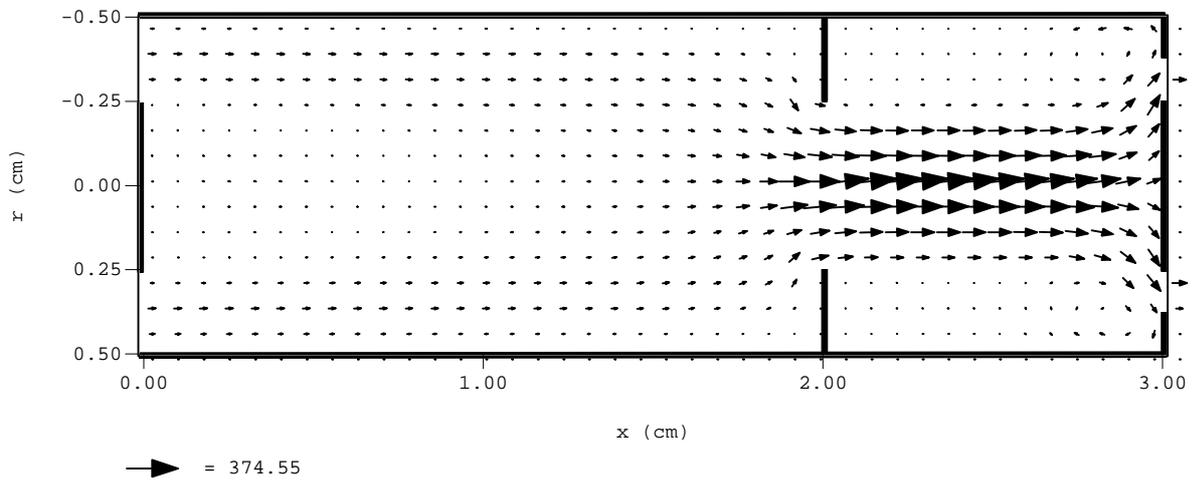


Figure 62 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.4 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.9 \text{ g.s}^{-1}$).

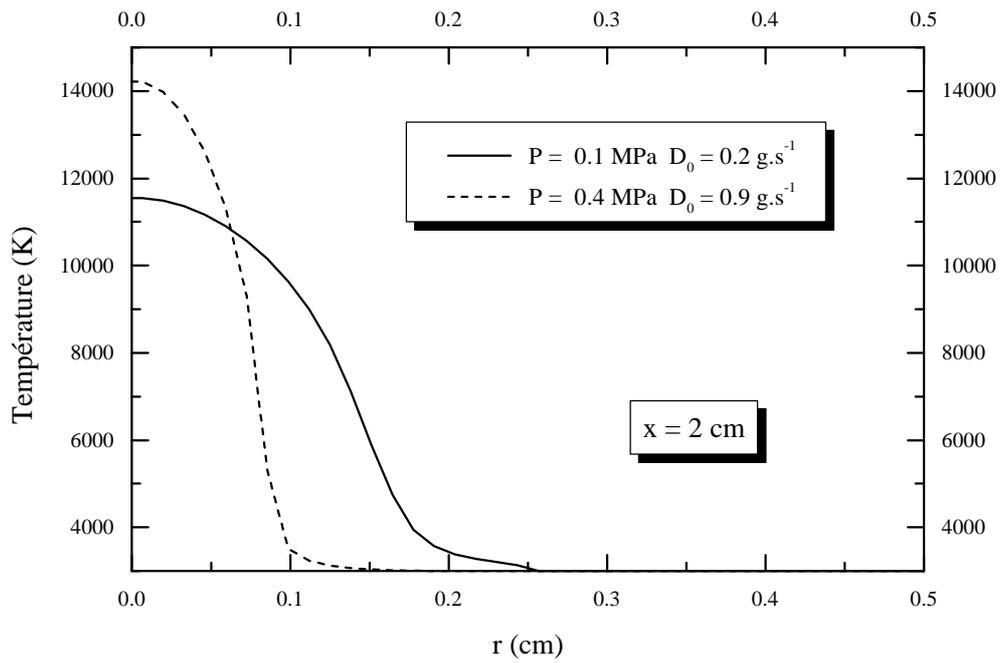


Figure 63 : Profils de température ($x = 2 \text{ cm}$).

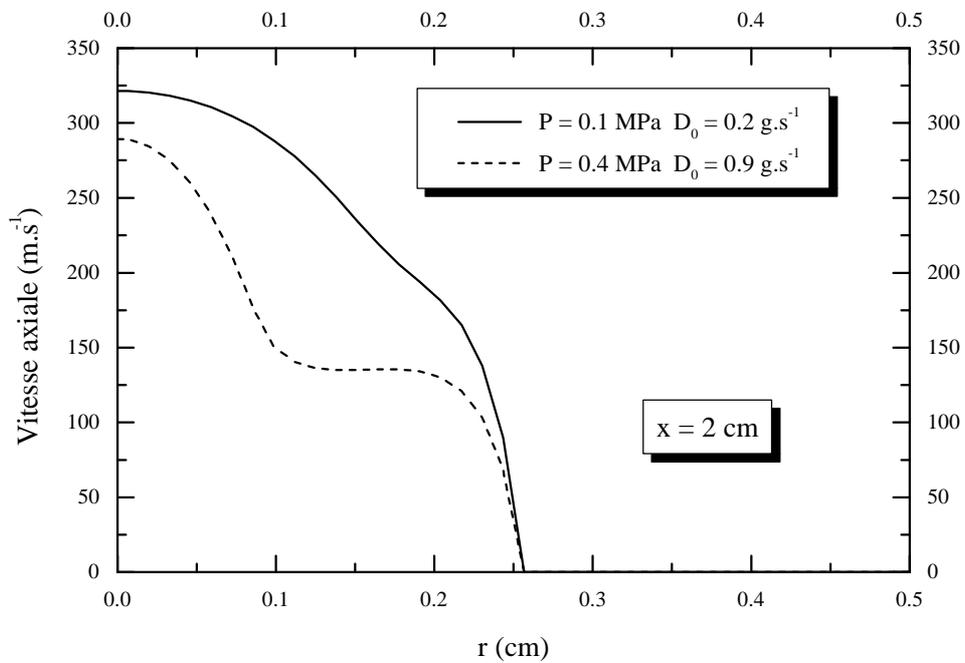


Figure 64 : Profils de vitesse axiale ($x = 2 \text{ cm}$).

IV-4. MODELE TRANSITOIRE

IV-4-1. Equations

En régime transitoire nous ajoutons à la résolution le calcul de la densité des espèces ; toutes les inconnues dépendent des deux variables : espace et temps. Le champ E est supposé nul à l'extinction. Le couplage entre le modèle de cinétique chimique (équation IV-7) et le modèle hydrodynamique (équations IV-8 à IV-10) est réalisé à travers les termes de convection (vitesses u et v) et à travers le calcul de la pression (équation II-18) et de la définition de la densité de masse (équation II-2).

Equations de continuité des espèces :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(n_i u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r n_i v) = Ca_i - n_i Da_i \quad (IV-7)$$

La diffusion des espèces est négligée.

Equation de conservation de la quantité de mouvement axiale :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = - \frac{\partial p}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (IV-8)$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement radiale :

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial r} = - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{2 \mu v}{r^2} \quad (IV-9)$$

Equation de conservation de l'énergie :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u \frac{\partial h}{\partial x} + \rho v \frac{\partial h}{\partial r} = + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \Gamma \frac{\partial h}{\partial r} \right) - 4 \pi \epsilon_N + u \frac{\partial p}{\partial x} + v \frac{\partial p}{\partial r} \quad (IV-10)$$

Equations de couplage :

$$\rho = \sum_i n_i m_i \quad (\text{II-2})$$

$$p = \sum_i n_i k_b T \quad (\text{II-18})$$

Equations de conservation de la stoechiométrie du milieu :

A l'extinction, la loi de conservation de la stoechiométrie du milieu ne remplace pas une des 19 équations de continuité comme c'est le cas en régime stationnaire (cf. I-2-5). Pour un élément de volume donné il doit y avoir conservation du nombre total d'atomes de soufre et d'atomes de fluor. Pour prendre en compte ce phénomène il faut apporter une correction au terme source de l'équation de continuité. Nous avons vu au paragraphe (II-2-1), que l'équation de bilan de la masse est directement obtenue de l'équation de continuité :

$$\frac{\partial}{\partial t} (m_i n_i) + \text{div} (n_i m_i \vec{v}_i) = m_i (Ca_i - n_i Da_i) \quad (\text{IV-11})$$

L'équation de conservation de la masse du mélange s'obtient en sommant les équations de bilan de la masse sur toutes les espèces :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} (\rho \vec{v}) = \sum_i m_i (Ca_i - n_i Da_i) \quad (\text{IV-12})$$

Le terme d'échange entre les phases vérifie l'équation de conservation de la masse (équation II-4), soit :

$$\sum_i m_i (Ca_i - n_i Da_i) = 0 \quad (\text{IV-13})$$

Pour la molécule $S_W F_X$ la masse peut être décomposée (en première approximation) en fonction des masses élémentaires du soufre m_S et du fluor m_F :

$$m_i = m_{(S_W F_X)_i} = W_i m_S + X_i m_F \quad (\text{IV-14})$$

où W_i et X_i représentent respectivement le nombre d'atome de soufre et de fluor pour la molécule i . En injectant cette relation dans l'équation (IV-13) on obtient la relation suivante :

$$\sum_i (W_i m_S + X_i m_F)(Ca_i - n_i Da_i) = 0 \quad (IV-15)$$

$$m_S \sum_i W_i (Ca_i - n_i Da_i) + m_F \sum_i X_i (Ca_i - n_i Da_i) = 0 \quad (IV-16)$$

Comme les termes m_S , m_F , W_i , X_i ainsi que l'expression (IV-14) sont toujours positifs nous avons :

$$\sum_i W_i (Ca_i - n_i Da_i) = 0 \quad (IV-17)$$

$$\sum_i X_i (Ca_i - n_i Da_i) = 0 \quad (IV-18)$$

Ces deux équations traduisent la conservation de l'équilibre stoechiométrie entre S (équation IV-17) et F (équation IV-18). Celles-ci seront utilisées pour corriger les termes de création de F et de S sous la forme des équations (IV-19) et (IV-20), ce qui évitera les dérives numériques dues aux calculs du terme source des équations de continuité.

$$Ca_S = n_S Da_S - \sum_{i \neq S} W_i (Ca_i - n_i Da_i) \quad (IV-19)$$

$$Ca_F = n_F Da_F - \sum_{i \neq F} X_i (Ca_i - n_i Da_i) \quad (IV-20)$$

La résolution débute par l'initialisation des profils de température et de vitesse calculés à partir du modèle stationnaire. Les densités initiales sont prises à l'équilibre et sont fonctions de la température et de la pression locale. Pour chaque pas de temps le code numérique résout successivement les équations de la quantité de mouvement, de l'énergie et de la continuité des espèces. L'équation de la conservation de la neutralité électrique remplace localement l'espèce chargée la plus importante. Avant de passer au temps suivant le code calcule les quantités qui couplent les équations hydrodynamiques aux équations cinétiques. Le pas d'avancement sur le temps est égal à 10^{-10} s. Cette valeur nous impose des contraintes sur le calcul des densités qui possèdent un temps caractéristique inférieur, comme nous l'avons vu au paragraphe II-4. Nous

fixons donc la densité de F^+ à l'équilibre pour une température inférieure à 5000 K ; de même, les valeurs des espèces polyatomiques SF_X ($X=2,6$) sont prises à l'équilibre quand la température est supérieure à 5000 K.

IV-4-2. Caractéristiques de l'extinction de l'arc

Les caractéristiques générales de l'extinction de l'arc sont étudiées dans ce paragraphe. Nous avons effectué plusieurs essais pour deux pressions (0.1 MPa et 0.4 MPa) et pour deux évolutions du débit. Ces deux paramètres ont une influence peu marquée sur les caractéristiques et le comportement du plasma. Précisons cependant qu'une comparaison entre ces différents cas reste délicate. En effet, pour deux cas distincts et pour un temps donné les champs de température sont différents et de ce fait il est impossible de comparer quantitativement les écarts à l'équilibre chimique entre deux conditions.

Nous présentons quelques résultats du modèle hydro-cinétique en extinction pour une pression initiale de 0.1 MPa. Les profils initiaux de température et de vitesses sont issus du calcul du modèle stationnaire décrit au paragraphe IV-3-2 ; le débit initial est de 0.2 g.s^{-1} . Sur la figure 65, nous avons tracé l'évolution du débit d'entrée en fonction du temps. Cette évolution est caractérisée par un temps d'établissement ' τ_d ' égale à $13 \mu\text{s}$ et par une valeur maximale du débit d'entrée ' D_{max} ' de 4.04 g.s^{-1} . Les profils initiaux de densités sont calculés à partir des tables cinétiques obtenues du modèle cinétique (cf. I-2).

IV-4-2-1. Champs de température et de vitesses

Sur les figures 66 à 80 nous présentons l'évolution des champs de température, du vecteur vitesse et de la pression au cours de l'extinction pour des temps de 5, 10, 20, 30 et 40 μs . Les champs initiaux de la température et du vecteur vitesse sont représentés respectivement sur les figures 53 et 54. Nous voyons sur les figures 66, 69, 72 et 75 qu'un pincement s'opère sur les profils de la température près de l'électrode amont. Lors de l'extinction, il y a augmentation des vitesses radiales vers l'axe de l'arc à cause des phénomènes de pompage qui tendent à compenser la baisse de pression liée au refroidissement et à cause de l'augmentation de la convection forcée. Nous observons alors une entrée progressive du gaz froid d'injection qui vient perturber le milieu en le

refroidissant. C'est ce qui est mis en évidence sur les figures du vecteur vitesse 67, 70, 73 et 76 où l'on voit les vitesses rentrer progressivement dans le cœur du plasma, se heurter à sa forte viscosité et créer une recirculation de gaz en sens inverse de l'écoulement. Le champ de vitesse pour 5 μ s montre une augmentation de la vitesse radiale près de l'électrode, ce qui crée une zone où la vitesse axiale est importante dans les régions chaudes proche de l'électrode. A mesure que le temps augmente, il y a augmentation de la vitesse axiale au centre de la décharge, le gaz chaud est chassé progressivement vers la sortie. On remarque qu'à mesure que le pincement s'opère, il y a un élargissement des isothermes dans la région située avant l'électrode poreuse. A ce niveau, comme dans le cas stationnaire, il existe de fortes vitesses axiales, il y a une accumulation de gaz due au resserrement géométrique. Les champs du vecteur vitesse montrent la formation de deux recirculations. La première s'établit à partir de 10 μ s, elle se situe au centre près de l'électrode amont et contribue au resserrement des lignes de champ de la température. La deuxième se situe dans le caisson dans la zone froide. Pour un temps égal à 40 μ s, les champs de température montrent que l'arc est éteint.

Sur les figures 68, 71, 74, 77 et 80 nous avons représenté le champ de pression dans tout le domaine de calcul. La pression d'entrée est fixée à 0.1 MPa. L'augmentation croissante du débit imposé à l'entrée, et la faible section de sortie, créent une surpression. En effet le gaz rentre dans la géométrie à faible température (3000 K), mais à cause des fortes températures localisées au niveau de l'électrode poreuse où les densités de masse sont plus faibles, il y a accumulation de gaz. Cette accumulation est mise en évidence par une augmentation progressive de la pression jusqu'à l'électrode poreuse. La barrière HI qui sépare la zone inter électrode du caisson entraîne une détente du gaz dans le caisson. A partir de 20 μ s les champs montrent une augmentation de la pression dans le caisson, puis une accumulation de gaz à la sortie du domaine.

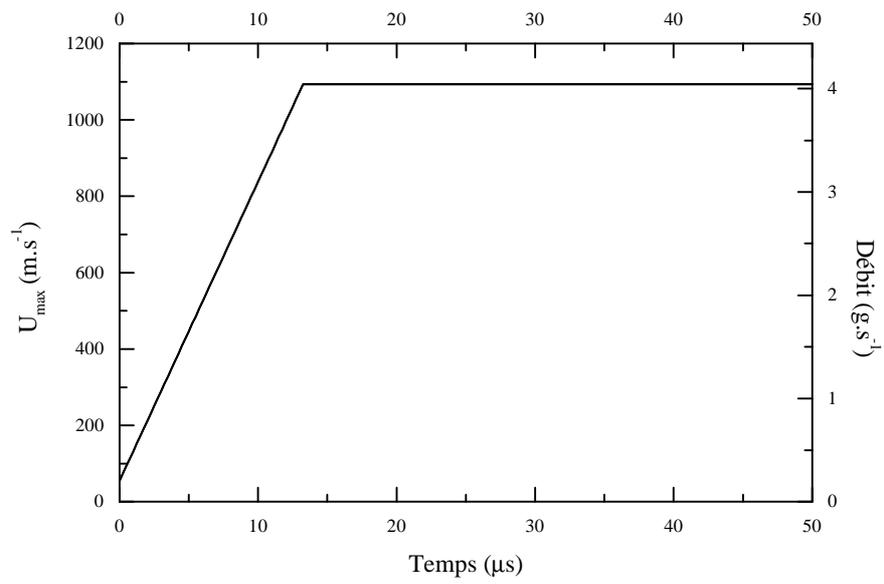


Figure 65 : Evolution de la vitesse maximale d'entrée et du débit d'entrée.

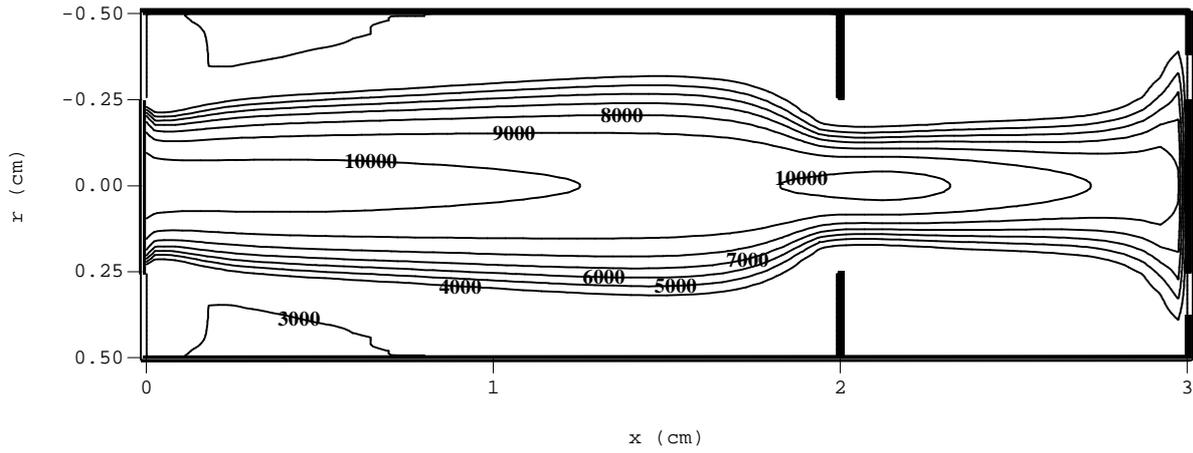


Figure 66 : Champ de température ($t = 5 \text{ m}$).

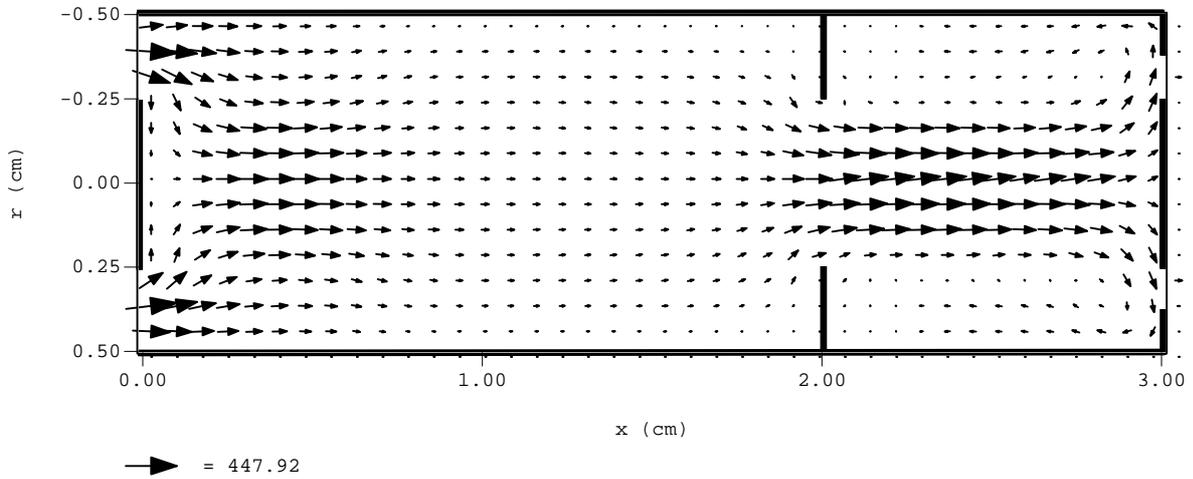


Figure 67 : Champ du vecteur vitesse ($t = 5 \text{ m}$).

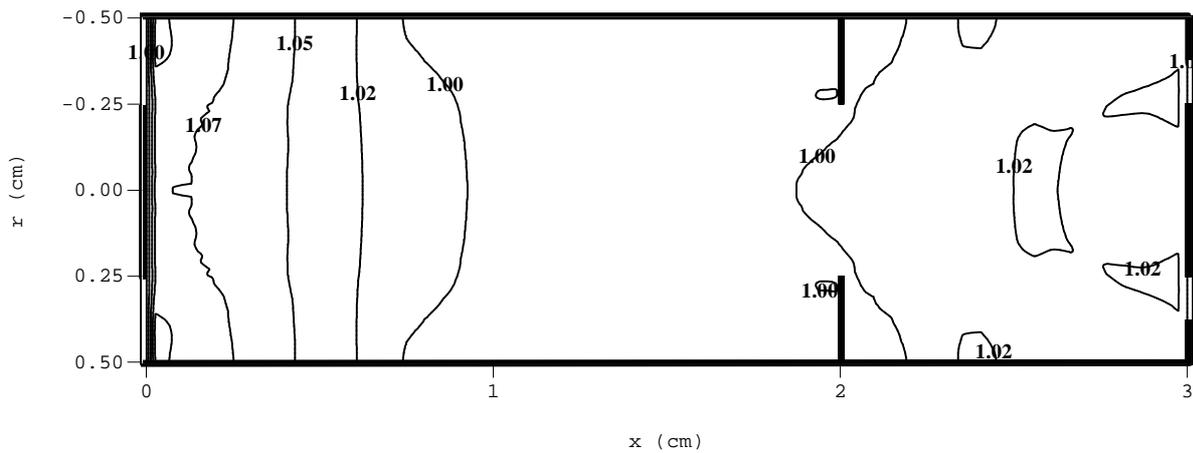


Figure 68 : Champ de pression ($t = 5 \text{ m}$).

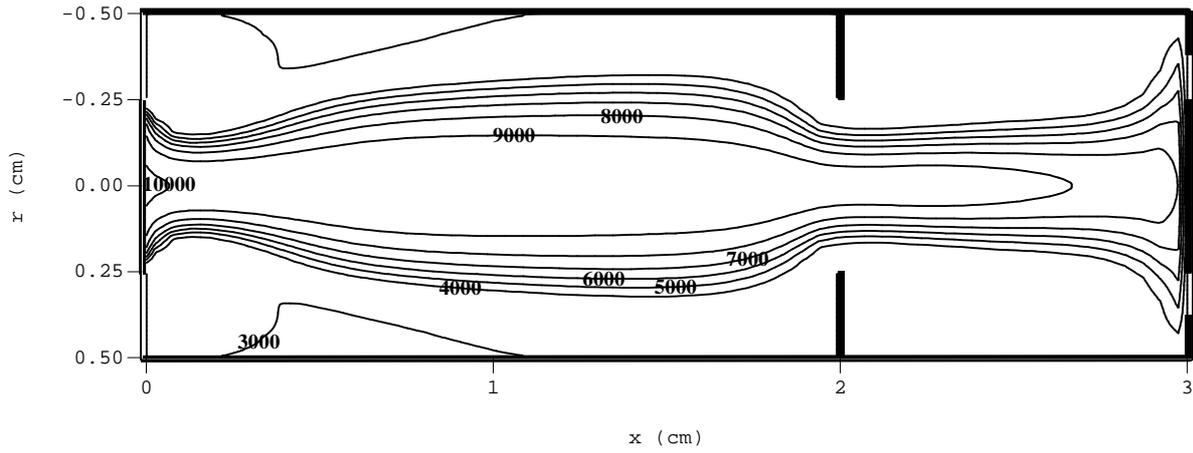


Figure 69 : Champ de température ($t = 10 \text{ m}$).

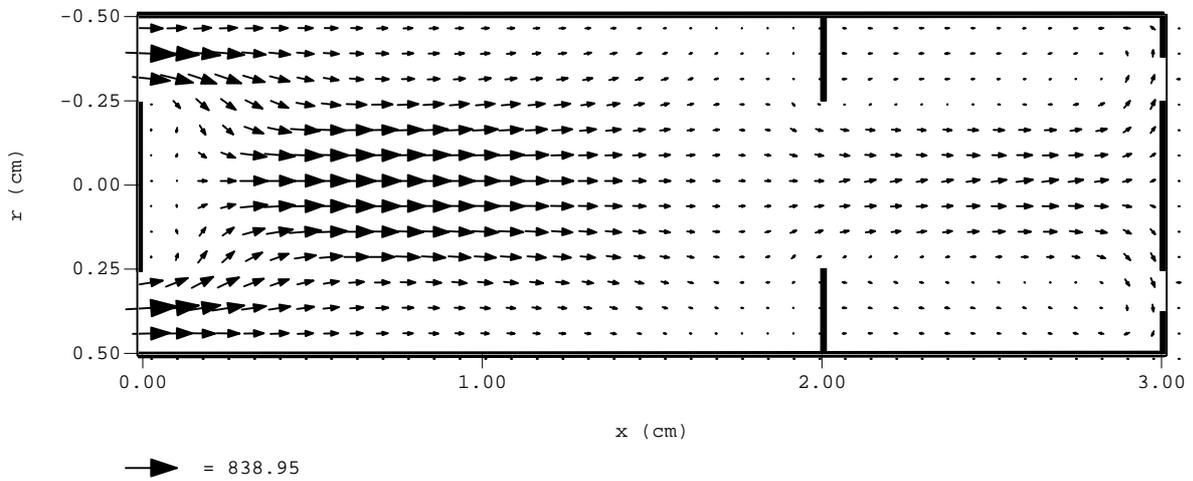


Figure 70 : Champ du vecteur vitesse ($t = 10 \text{ m}$).

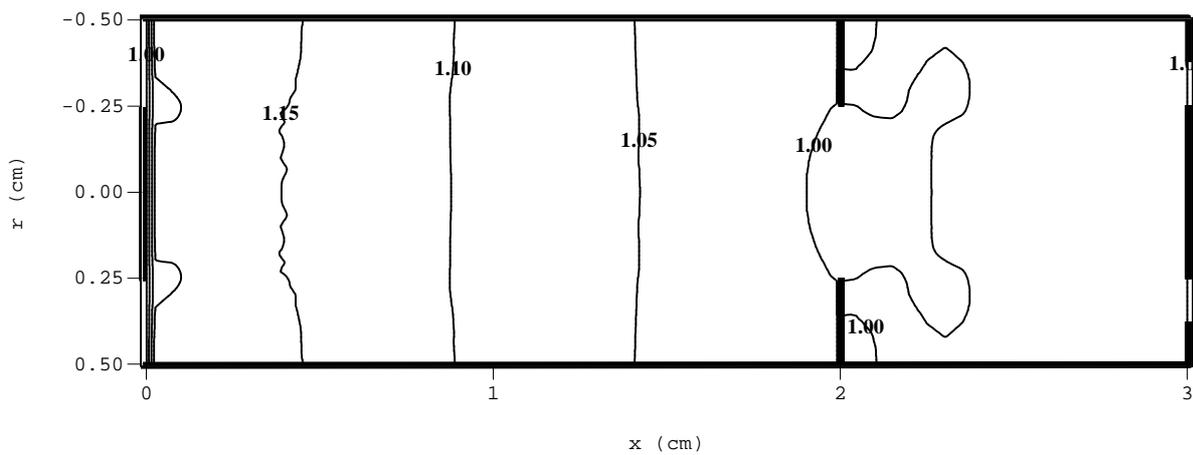


Figure 71 : Champ de pression ($t = 10 \text{ m}$).

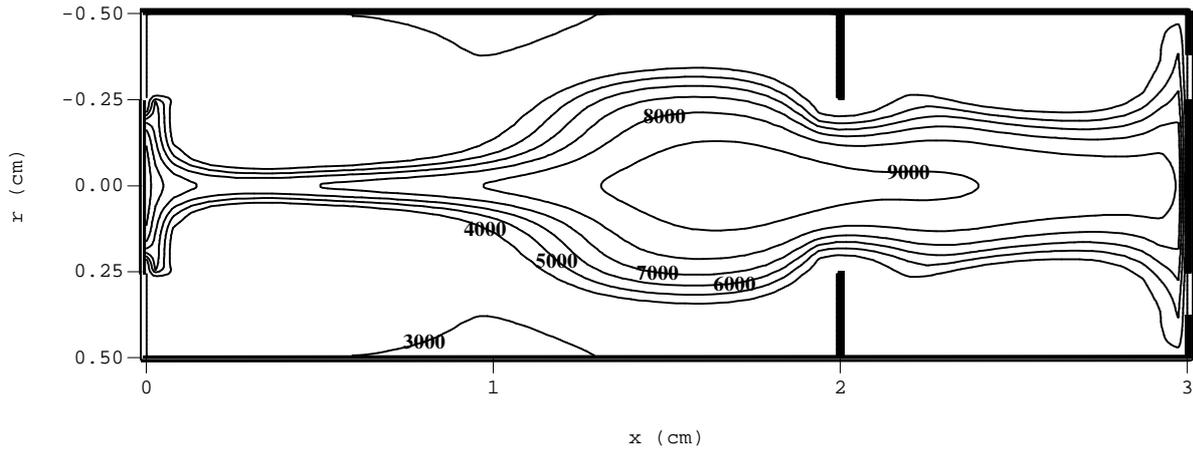


Figure 72⁽¹⁾ : Champ de température ($t = 20 \text{ m}$).

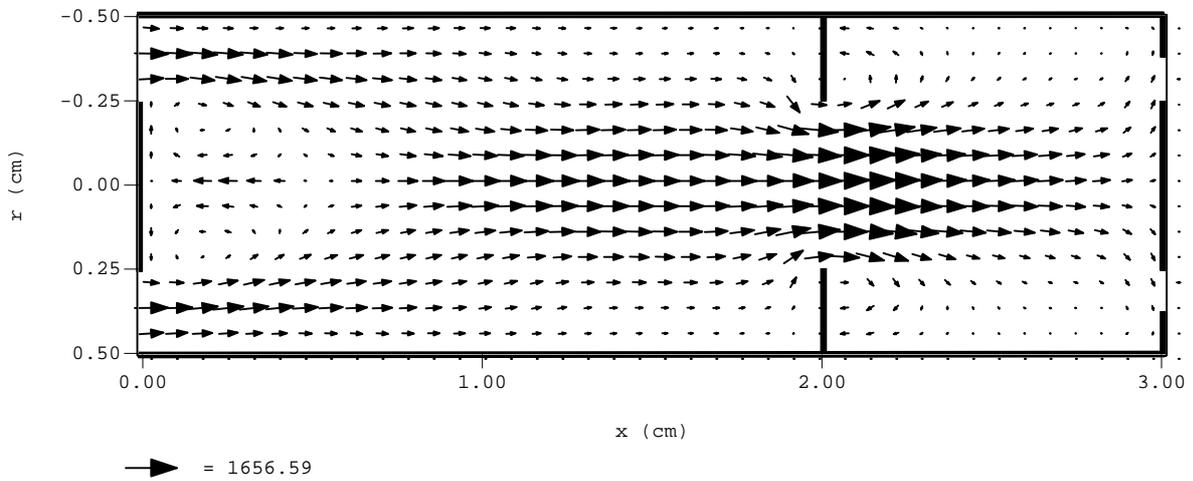


Figure 73 : Champ du vecteur vitesse ($t = 20 \text{ m}$).

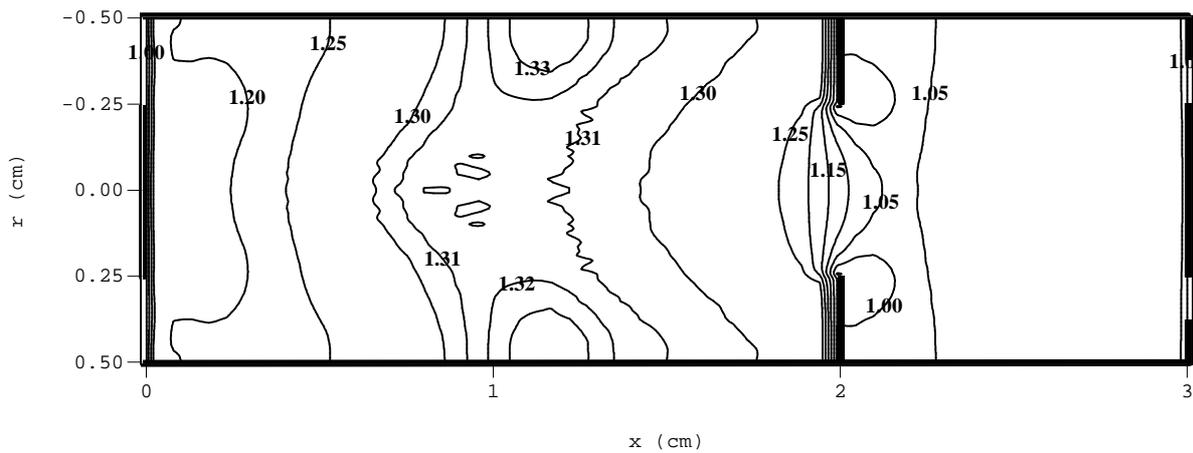


Figure 74 : Champ de pression ($t = 20 \text{ m}$).

⁽¹⁾ Cf. planche en couleur.

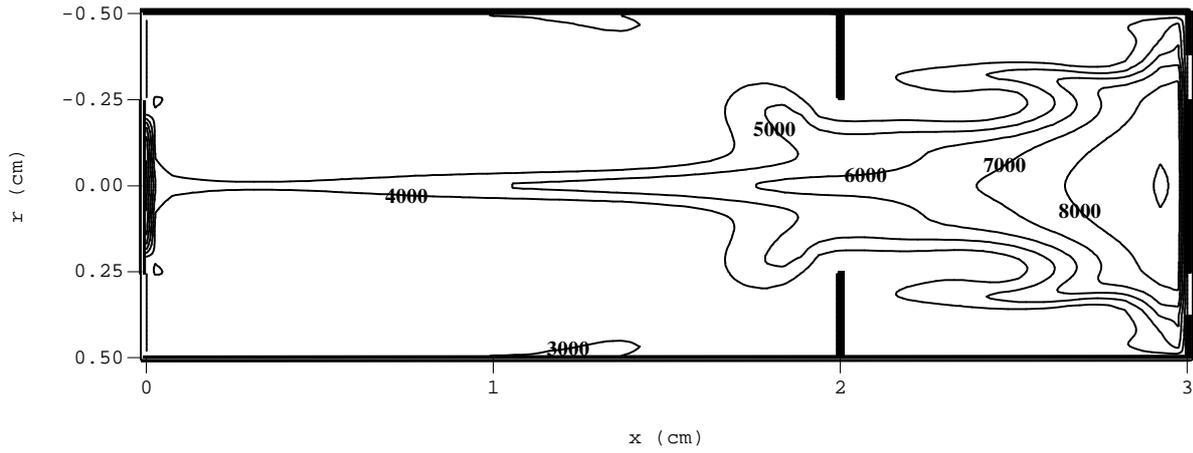


Figure 75 : Champ de température ($t = 30 \text{ m}$).

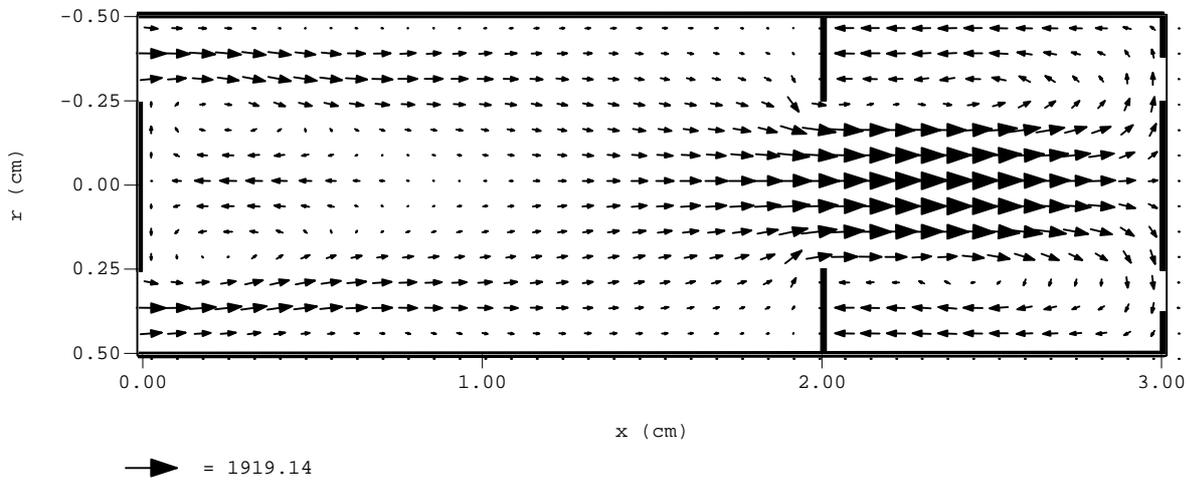


Figure 76 : Champ du vecteur vitesse ($t = 30 \text{ m}$).

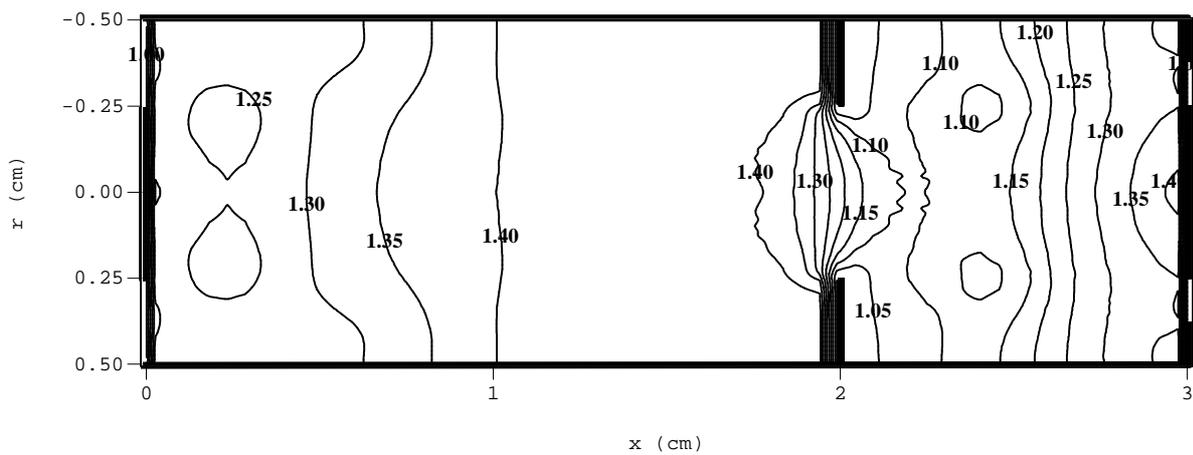


Figure 77 : Champ de pression ($t = 30 \text{ m}$).

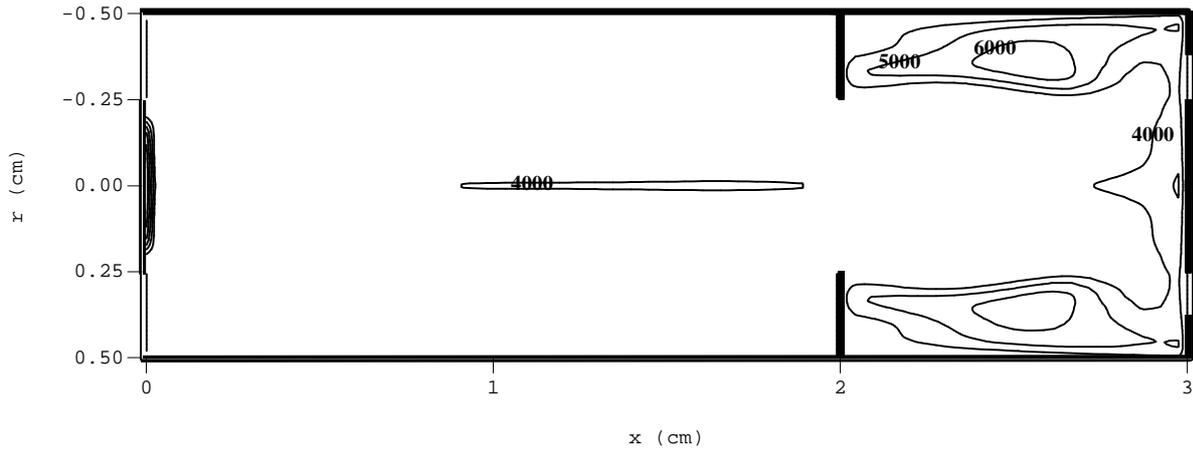


Figure 78 : Champ de température ($t = 40 \text{ m}$).

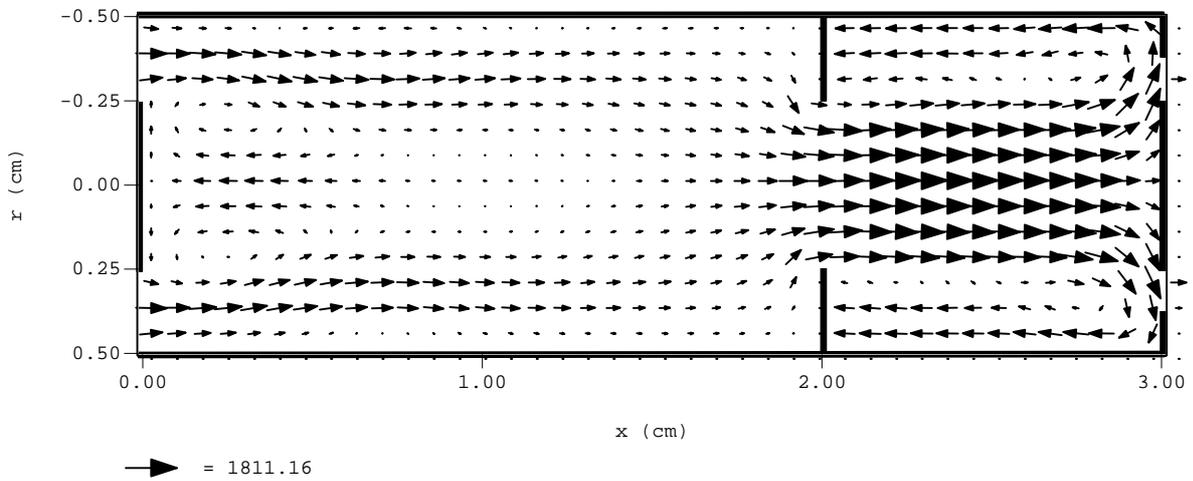


Figure 79 : Champ du vecteur vitesse ($t = 40 \text{ m}$).

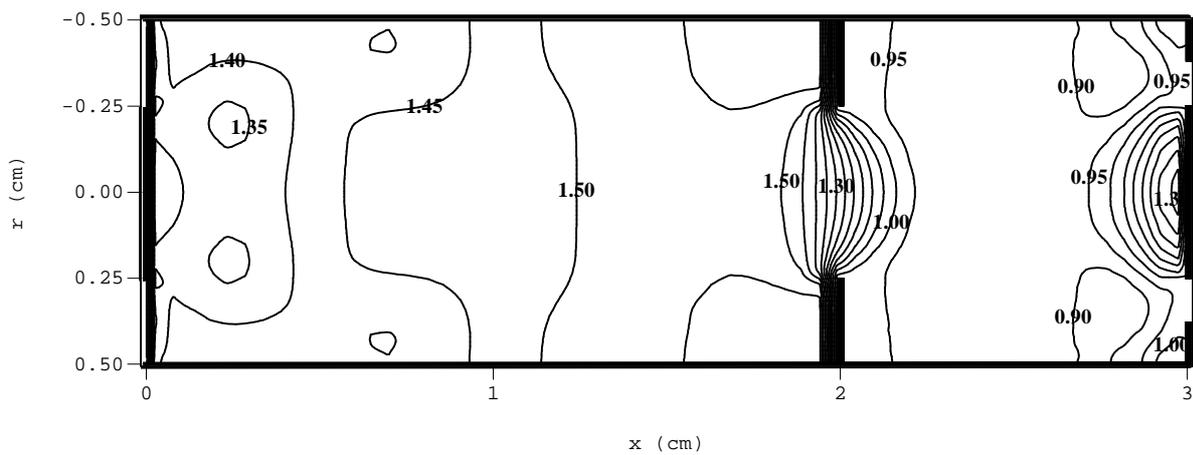


Figure 80 : Champ de pression ($t = 40 \text{ m}$).

IV-4-2-2. Conductance

La figure 81 illustre les évolutions de la conductance linéique (équation II-14) en fonction du temps pour différentes côtes ($x = 0$ cm, 0.5 cm, 1 cm, 1.5 cm, 2 cm et 2.5 cm) de notre modèle, ainsi que les valeurs expérimentales de Hertz [He-5] pour un arc stabilisé par parois de 2.5 mm de rayon. Ces valeurs ont été obtenues pour une intensité égale à 100 A, soit une intensité de deux fois supérieures à celles que nous utilisons. La comparaison de nos résultats avec ceux de Hertz peut cependant être réalisée : en effet, la différence de température axiale qui existe entre les profils de température obtenus pour des configurations de 50 et 100 A, est de l'ordre de 2000 K (cf. III-2-3). Si on considère que la vitesse de refroidissement est de l'ordre de -10^8 K.s⁻¹, la conductance calculée à 20 μ s dans le cas de la configuration à 100 A correspond à la conductance initiale du cas à 50 A. La conductance est le reflet du rayon d'arc (équation II-14) et permet de préjuger la capacité d'un gaz à retrouver sa rigidité diélectrique dans un laps de temps donné. La conductivité électrique peut s'exprimer selon :

$$\sigma(T) = e\mu_e(T) \cdot n_e(T) \quad (\text{IV-21})$$

Où $\mu_e(T)$ est une fonction de la température T et $n_e(T)$ la densité électronique. Pour un calcul hors d'équilibre, nous exprimons la conductivité électrique en fonction de la conductivité électrique calculée à l'équilibre.

$$\sigma = \sigma_{\text{LTE}} \frac{n_e}{n_{e\text{LTE}}} \quad (\text{IV-22})$$

Le profil pour $x = 0$ cm correspond à celui calculé par le modèle à une dimension, et est en accord avec les valeurs de Hertz pour les 50 premières micro secondes, mais à partir de 50 μ s nos valeurs sont plus importantes que celles de Hertz. La température imposée à la paroi est égale à 3000 K, de ce fait les pics de conductivité thermique présents entre 300 K et 3000 K ne sont pas pris en compte ce qui implique un refroidissement plus lent qui entraîne une surestimation de la conductance. Les profils pour $x = 0.5$ cm, $x = 1$ cm, $x = 1.5$ cm et 2 cm montrent une baisse rapide de la conductance entre 10 μ s et 40 μ s. Suivant la côte axiale où nous nous situons ($x = 0.5, 1, 1.5$ ou 2 cm) la chute de la conductance ne se situe pas aux mêmes instants. Celle-ci aura lieu d'autant plus

tard que la côte axiale se situera proche de la sortie. La chute brusque de la conductance s'explique par la propagation du pincement de l'arc par convection. La côte $x = 0$ cm ainsi que la couche $x = 2.0$ cm (électrode poreuse) maintiennent un rayon de conduction élevé sans brusque variation, d'où la décroissance observée sur la figure 81. La côte $x = 2.5$ cm correspond au centre du caisson ; on remarque la présence de deux pics situés à $22 \mu\text{s}$ et $40 \mu\text{s}$, ces pics de conductance correspondent à deux augmentations de la température dans le caisson dues à l'arrivée de poches de gaz.

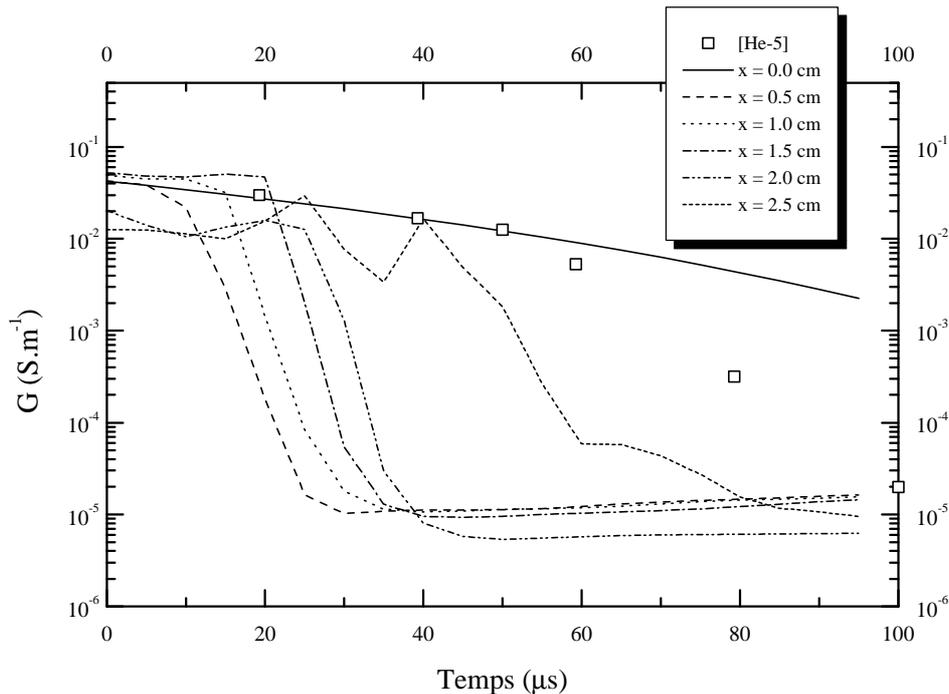


Figure 81 : Evolution de la conductance linéique pour différentes valeurs de x .

IV-4-2-3. Champs de densités de particules

Après avoir étudié l'extinction globale du plasma, nous allons nous intéresser à présent à l'étude des écarts à l'équilibre chimique du milieu. Les champs de densités de particules présentés dans cette partie sont tracés pour un temps de $20 \mu\text{s}$, ce temps correspondant au moment où l'arc est fortement pincé.

Disparition des électrons

Sur la figure 82, nous avons tracé le champ de densité électronique relative. La densité relative est définie comme le rapport entre la densité calculée à l'extinction et la valeur de la densité d'équilibre correspondant aux valeurs locales de la pression et de la température. Les résultats montrent plusieurs zones de sous population électronique. Une zone de sous population est obtenue à l'entrée de la décharge. En réalité, cette zone est peu importante ; en effet la température est inférieure à 4000 K et la densité électronique est donc très faible. Au bord de l'arc pour une température comprise entre 4000 K et 6000 K, une sous population électronique est également obtenue. Pour cette gamme de température, la densité électronique n'est plus négligeable, les phénomènes convectifs seuls ne peuvent expliquer cette sous population. Enfin, on peut noter qu'il existe également des zones de sous populations situées dans le caisson.

Nous avons vu au paragraphe I-3-5 que les molécules S_2 avaient une portée non négligeable par rapport aux autres espèces. De même l'étude cinétique a montré que les espèces diatomiques S_2 , S_2^+ étaient étroitement liées avec les électrons. Dans l'intention d'expliquer la sous population électronique obtenue entre 4000 K et 6000 K, nous avons tracé respectivement sur les figures 83 et 84 les densités relatives de S_2^+ et de S_2 . On peut noter qu'il existe une surpopulation des densités S_2^+ et de S_2 au bord de l'arc dans la zone de température comprise entre 4000 K et 6000 K. Une partie de cette zone correspond à la zone de sous population électronique. Les valeurs de la densité relative de S_2 peuvent être supérieures à 10, tandis que dans le cas de S_2^+ ces valeurs sont inférieures à 3. La zone de sous population électronique peut être expliquée par la présence d'une surpopulation des ions S_2^+ . En effet, l'étude cinétique a montré que la réaction d'attachement entre les électrons et les atomes S_2^+ était prédominante devant les autres réactions. De même l'excès des ions S_2^+ peut être expliqué par l'augmentation de la population des particules S_2 due à la réaction d'échange de charge (cf. I-3). La forte surpopulation des particules S_2 dans la zone de température 4000 K - 6000 K, peut être expliquée par le fait que les particules S_2 possèdent une portée supérieure aux autres espèces ; de ce fait celles-ci, très sensibles aux phénomènes convectifs, pénètrent dans les zones chaudes de la décharge. Au centre de l'arc, nous avons des surpopulations électroniques et des sous populations des molécules diatomiques S_2 et S_2^+ . Ces résultats confirment la relation qu'il existe entre ces trois espèces, à savoir que le défaut des molécules diatomiques S_2 et S_2^+ entraîne une augmentation de la population électronique. Face à une brusque variation de température, la cinétique des réactions chimiques n'est pas assez rapide pour assurer des variations de densités de particules conformes à celles prévues par les lois de l'équilibre. Au niveau du resserrement géométrique, nous avons principalement une surpopulation pour les trois espèces ; ce phénomène est plus lié à la présence de la paroi interne qui provoque une accumulation de gaz (cf. IV-4-2-1).

Au niveau du pincement, il existe une bande étroite sur l'axe où les électrons sont en surpopulation par rapport à l'équilibre. Cette surpopulation est accompagnée de sous population des espèces S_2^+ et de S_2 . Dans cette bande, la température est supérieure à 6000 K. Au cours de l'extinction, les résultats ont montré que cette bande était toujours présente, les zones de sous population électronique de part et d'autres de cette bande ne se recouvrant jamais. Ce phénomène de recouvrement permettrait de mettre en évidence une section complète en sous population électronique et donc une augmentation du pouvoir de coupure ; or la convection n'est pas assez efficace pour forcer les particules froides S_2 à pénétrer dans les zones chaudes du plasma. Nous avons pensé que les conditions aux limites affectées à l'électrode pourraient être responsables de cette bande de surpopulation. En effet le profil de température du modèle à une dimension imposé à l'électrode évolue avec une vitesse de refroidissement inférieure à celle de l'arc. En imposant une condition de Neumann sur la température et sur la vitesse radiale à l'électrode, les résultats n'ont montré aucune modification sur le comportement de l'arc et en particulier sur les champs de densité relative.

Champs de densité relative des espèces diatomiques SF et F₂

Les champs de densité relative de SF et de F₂ (figures 85 et 86) montrent un comportement similaire au champ de S₂, à savoir une zone de surpopulation située au bord de la décharge pour une température comprise entre 4000 K et 6000 K et une zone de sous population au centre de la décharge. Les valeurs relatives de surpopulation de ces espèces sont nettement inférieures à celles de S₂. Ces résultats confirment une sensibilité aux phénomènes convectifs plus important pour S₂ que pour SF et F₂ et sont en accord avec les résultats obtenus par l'étude cinétique (cf. I-3).

Les figures 87 et 88 illustrent les champs de densité relative du fluor atomique et de la molécule SF₂. Entre 4000 K et 6000 K les champs de ces deux espèces montrent une allure générale identique à celle de SF, ces espèces sont étroitement liées par la réaction d'association [47] $F + SF \leftrightarrow SF_2$ et restent en équilibre stoechiométrique. On peut remarquer que le fluor, qui est l'espèce majoritaire du plasma, est proche de l'équilibre sur tout le domaine. Les surpopulations de F au bord de l'arc sont de l'ordre de 1.01. L'équilibre stoechiométrique qui lie SF au fluor est responsable des faibles évolutions de la densité de SF. De la même manière, nous pouvons expliquer les faibles évolutions de la densité de F₂ par rapport à S₂ à partir de la cinétique réactionnelle. En effet pour la même gamme de température (4000 K < T < 6000 K) la réaction d'association [46] $F + SF \leftrightarrow F_2 +$

S domine la disparition de F_2 . Nous avons vu précédemment que F et SF étaient proches de l'équilibre, de ce fait la molécule F_2 restera en équilibre si les variations du soufre sont faibles. Nous pouvons noter au bord de l'arc, que la densité du soufre (figure 89) est en sous population par rapport à l'équilibre dans la gamme de température $4000 \text{ K} < T < 6000 \text{ K}$. Ces sous population restent relativement faibles pour modifier l'équilibre entre les espèces F, SF et F_2 .

Champs de densité relative des espèces ioniques S^+ et S^-

Les champs de densité relative S^+ et S^- sont tracés respectivement sur les figures 90 et 91. La composition à l'équilibre a montré que les valeurs de la densité de l'ion S^+ étaient identiques aux valeurs de la densité électronique pour une température supérieure à 4500 K (cf. figure 1). En-dessous de cette température, les électrons sont majoritaires devant l'ion S^+ . A l'extinction le champ de densité relative de S^+ montre un comportement similaire à celui du champ électronique. Au bord de l'arc de fortes sous population de S^+ sont obtenues. La réaction dominante qui contribue à la disparition de cette espèce (réaction [21] $S^+ + SF \leftrightarrow S_2^+ + F$) favorise la création des ions S_2^+ et donc la disparition des électrons. Ce mécanisme de création de l'ion diatomique S_2^+ est cependant moins important que celui mis en évidence avec la molécule S_2 .

La densité d'équilibre de l'ion S^- est relativement faible devant les autres espèces et de ce fait cette espèce est plus sensible aux phénomènes réactionnels ou convectifs lors de l'extinction. Le champ de densité relative de S^- montre entre l'entrée et le bord de la décharge une alternance de zones de sous population et de zones de surpopulation. Entre 4000 K et 5000 K l'ion S^- est en sous population puis pour une température supérieure à 5000 K les ions S^- se retrouvent en surpopulation. La densité de S^- suit les fluctuations des espèces majoritaires ; en effet, pour une température comprise entre 3000 K et 4850 K la réaction d'échange d'électron [27] $S^- + SF \leftrightarrow S + SF^-$ domine la disparition de S^- puis entre 4850 K et 6000 K c'est le tour de la réaction de recombinaison [34] $S + e^- + F \leftrightarrow S^- + F$.

Champs de densité relative de l'espèce ionique F^-

Pour conclure cette étude cinétique il est intéressant d'étudier le comportement de l'espèce atomique chargée F^- (figure 92). Au centre de la décharge pour une température supérieure à 4500 K, la densité de l'ion F^- est en sous population par rapport à l'équilibre chimique. Les zones de sous population correspondent aux zones de surpopulation électronique. La cinétique réactionnelle a montré que cette espèce s'associe avec le soufre pour former des électrons et du SF (réaction [65] $SF + e \leftrightarrow F^- + S$) entre 2550 K et 8950 K. A l'extinction et à haute température le processus inverse de la réaction [65] est prépondérant devant le processus direct, le soufre se retrouvant en excès contribue à la disparition de F^- et à l'augmentation de la population des électrons. A basse température ($T < 4500$ K) nous notons l'existence de zones en surpopulation de F^- .

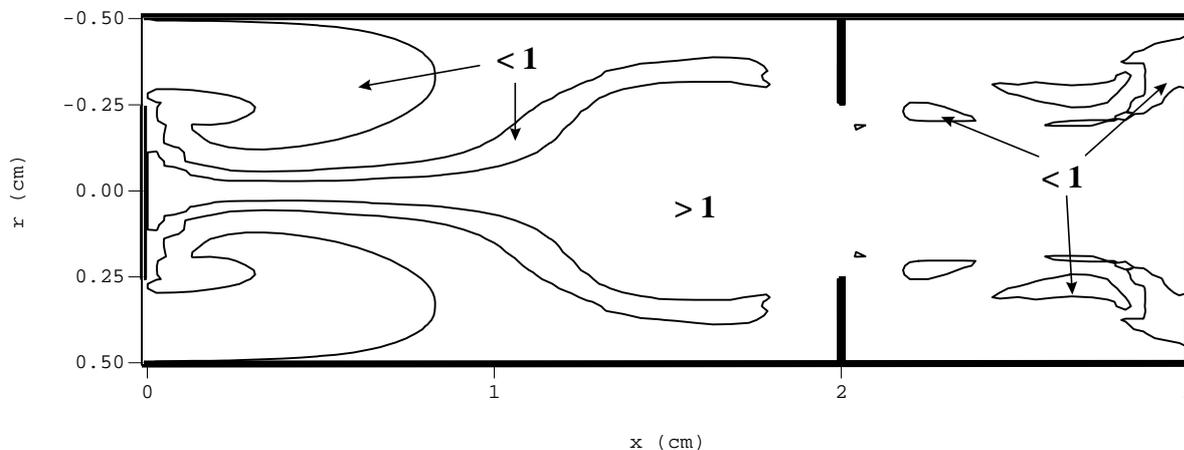


Figure 82⁽¹⁾ : Champ de densité relative (électron, $t = 20$ ns).

⁽¹⁾ Cf. planche en couleur.

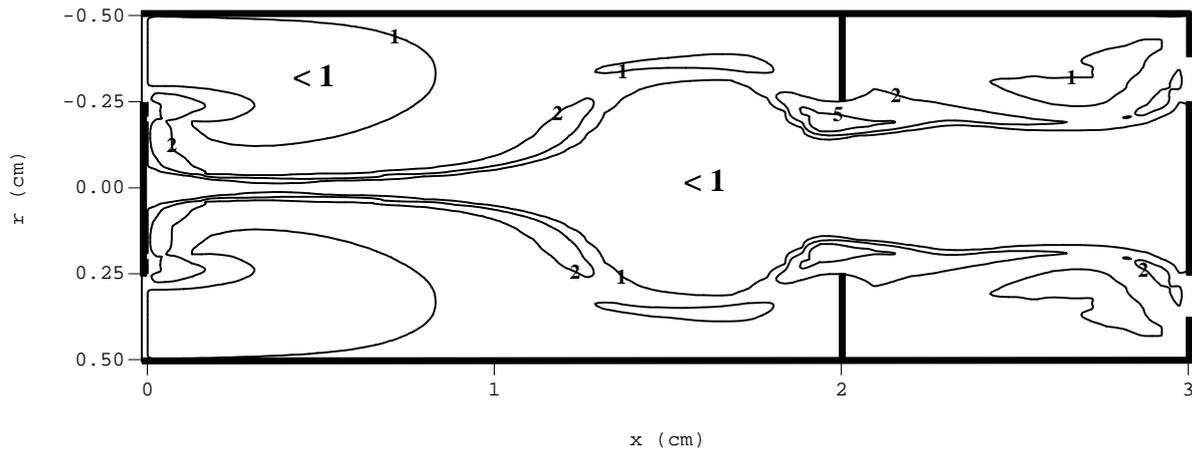


Figure 83⁽¹⁾ : Champ de densité relative (S_2^+ , $t = 20$ m).

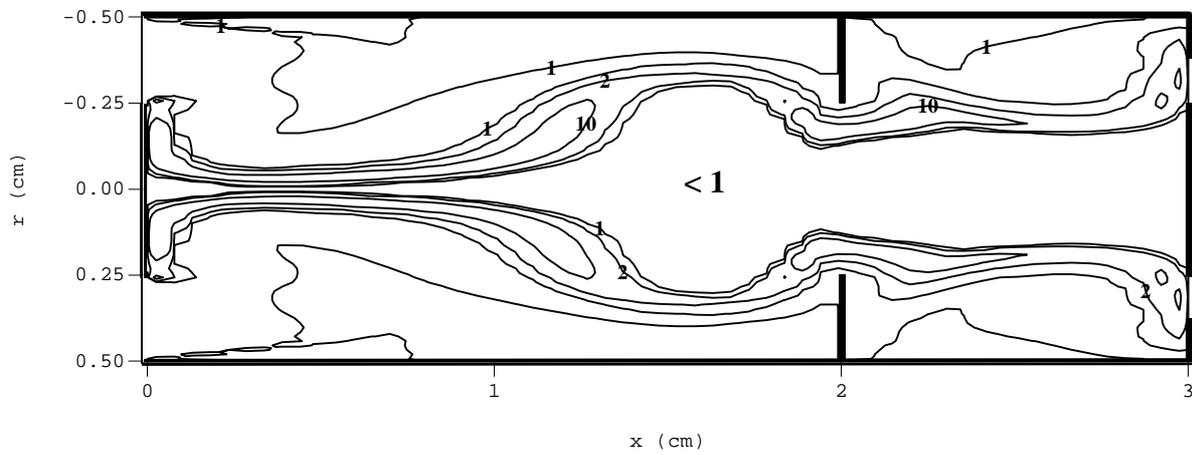


Figure 84⁽²⁾ : Champ de densité relative (S_2 , $t = 20$ m).

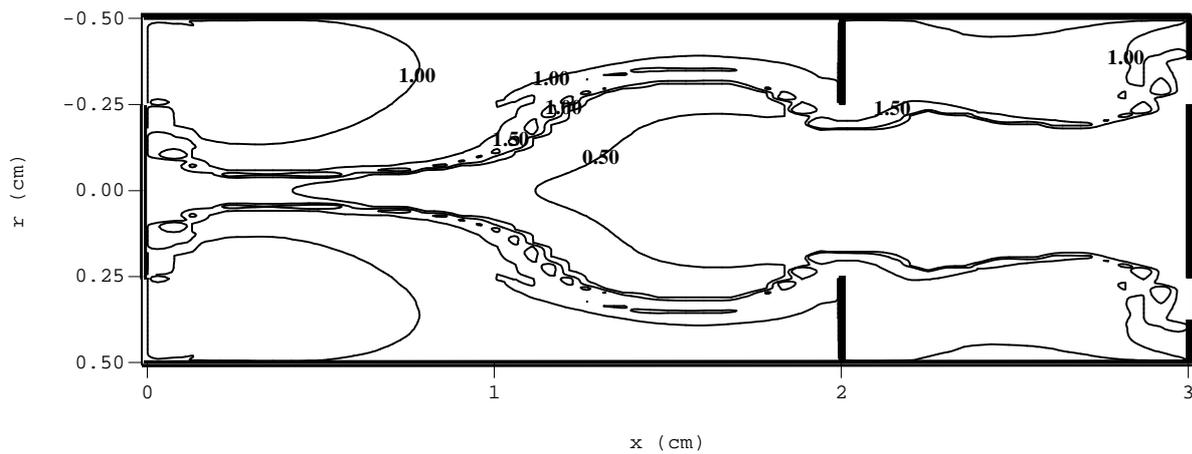


Figure 85 : Champ de densité relative (SF , $t = 20$ m).

⁽¹⁾ Cf. planche en couleur.

⁽²⁾ Cf. planche en couleur.

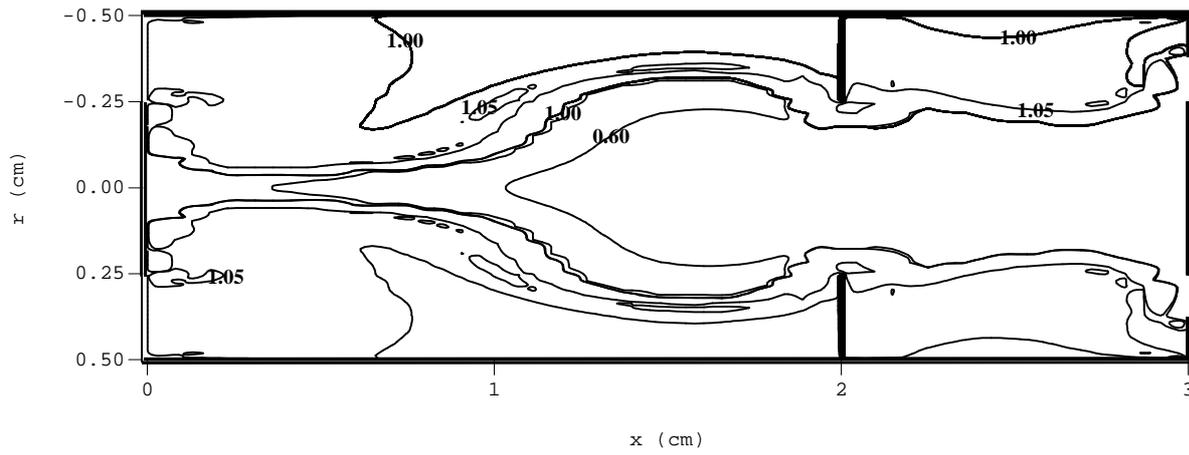


Figure 86 : Champ de densité relative (F_2 , $t = 20$ ms).

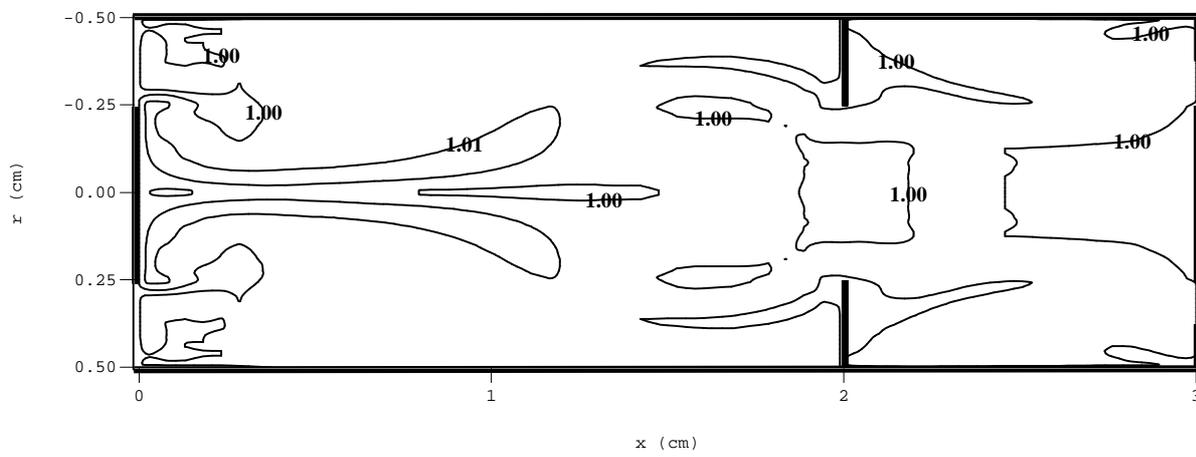


Figure 87 : Champ de densité relative (F , $t = 20$ ms).

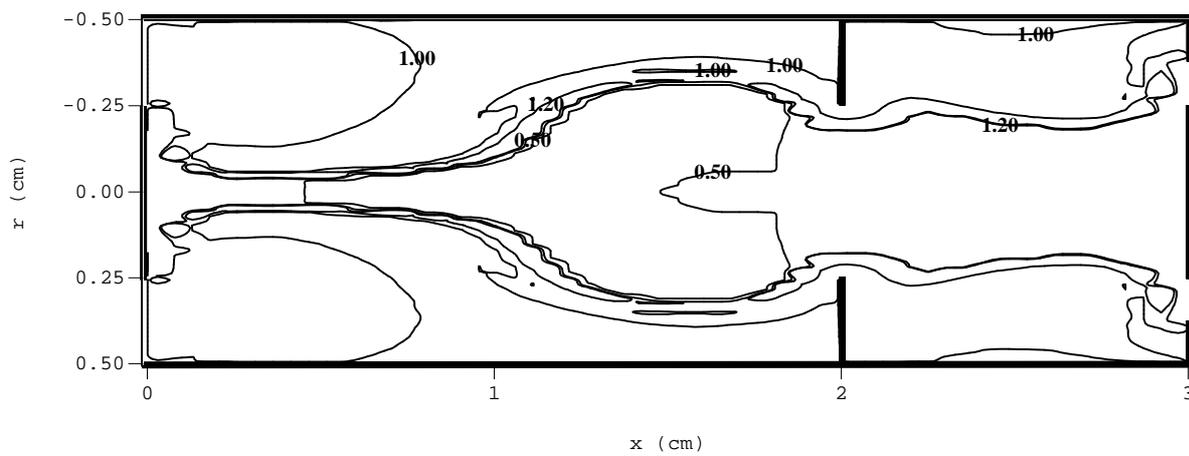


Figure 88 : Champ de densité relative (SF_2 , $t = 20$ ms).

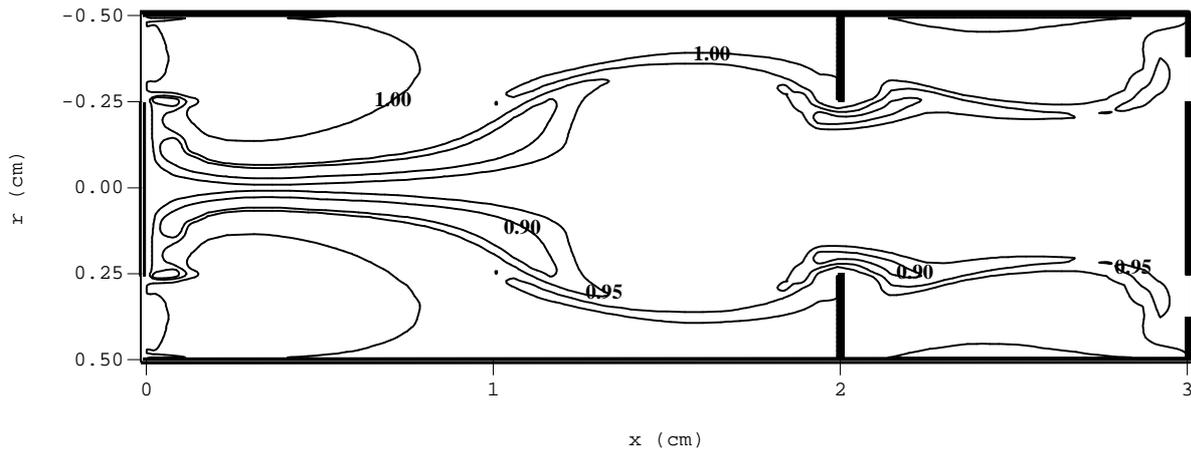


Figure 89 : Champ de densité relative (S , $t = 20$ m).

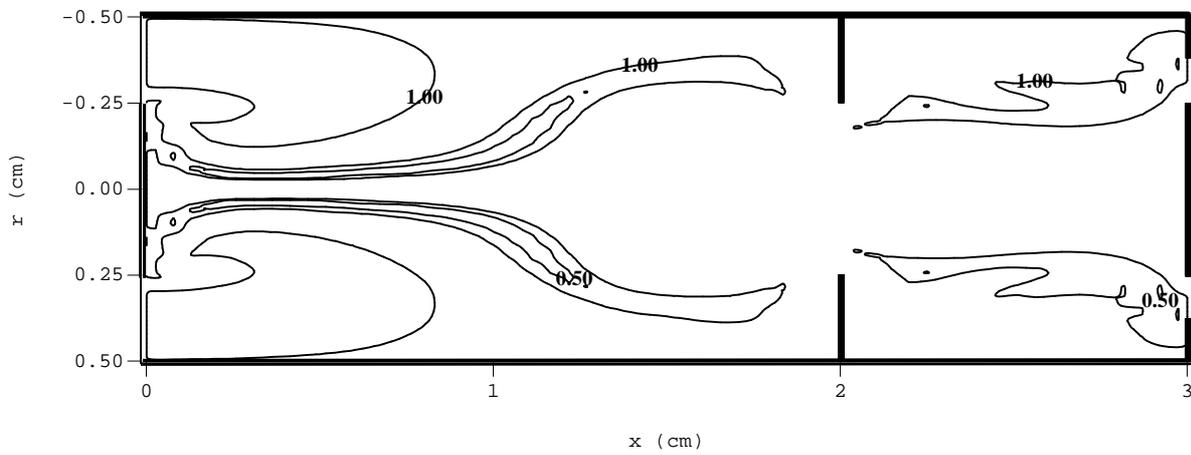


Figure 90 : Champ de densité relative (S^+ , $t = 20$ m).

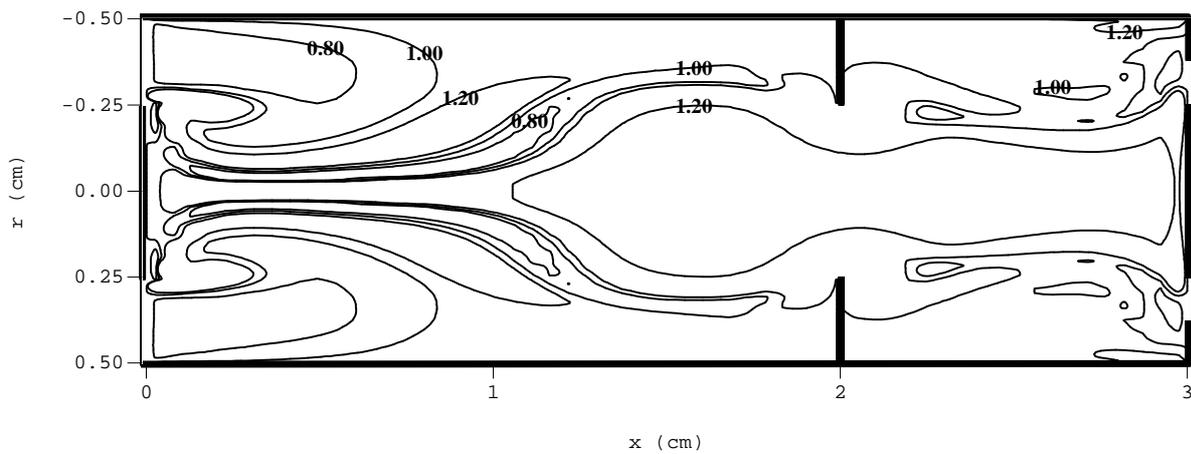


Figure 91 : Champ de densité relative (S^- , $t = 20$ m).

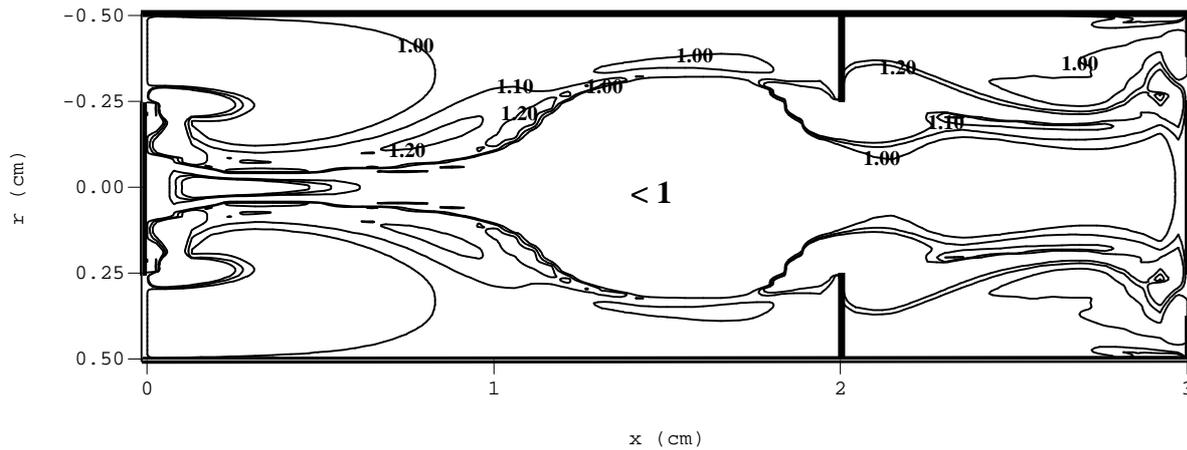


Figure 92 : Champ de densité relative (F , $t = 20 \text{ ns}$).

IV-4-3. Influence de la conductivité thermique

Le modèle hydro-cinétique ne prend pas en compte les effets de convection turbulente qui induit un processus dominant dans le transfert d'énergie. Afin d'étudier son influence nous avons multiplié la conductivité thermique par un facteur égale à 10. Ceci a pour conséquence d'augmenter la vitesse de refroidissement. Les profils de températures et de vitesses initiaux sont issus du calcul du modèle stationnaire décrit au paragraphe IV-3-2, la pression initiale est de 0.1 MPa et le débit initial est de 0.2 g.s^{-1} . Sur la figure 93, nous avons tracé l'évolution du débit d'entrée en fonction du temps. Cette évolution est caractérisée par un temps d'établissement ' τ_d ' égale à 20 ns et par une valeur maximale du débit d'entrée ' D_{\max} ' de 3 g.s^{-1} .

La figure 94 montre le champ de température pour un temps égale à 20 ns . Comme dans la configuration précédente (cf. IV-4-2) on remarque un pincement sur le champ de température près de l'électrode. Par rapport à la figure 75, ce pincement est moins prononcé, car la vitesse d'entrée est moindre, par contre la température dans tout le domaine est moins élevée. L'augmentation de la conductivité thermique accentue le refroidissement global de la décharge, la température axiale est inférieure à 7000 K.

Les figures 95 à 97 illustrent respectivement les champs de densité relative des électrons, de S_2^+ et de S_2 pour un temps de 20 ns . Les résultats ne sont pas fondamentalement différents de ceux obtenus précédemment. Ils montrent une large zone de sous population électronique (figure 95) située dans une gamme de température comprise entre 3000 K et 5000 K. Les surpopulations des

densités de S_2 et de S_2^+ sont obtenues dans la gamme de température comprise entre 4000 K et 5000 K. Comme nous l'avons vu au paragraphe IV-4-2-2 ces surpopulations sont responsables du déséquilibre chimique des électrons en faisant intervenir les mécanismes réactionnels mêlant ces trois espèces. Par contre ces mécanismes ne peuvent expliquer la zone de sous population qui existe à plus basse température. Ce phénomène peut être expliqué de la manière suivante : l'augmentation de la conductivité thermique provoque une augmentation de la vitesse de refroidissement. Tout se passe comme si le gaz froid qui entrainait dans les zones chaudes du plasma, n'avait pas le temps de s'ioniser d'où l'obtention d'une large zone de sous population électronique.

La prise en compte de la forte conduction thermique avait pour rôle d'augmenter les échanges thermiques entre les régions chaudes du plasma et les régions froides. Comme pour le cas normal, nous n'avons pas obtenu une section suivant r en sous population électronique. Un meilleur brassage entre les espèces froides et les espèces chaudes pourrait être mis en évidence en utilisant un modèle de turbulence qui prendrait en compte le déséquilibre chimique local.

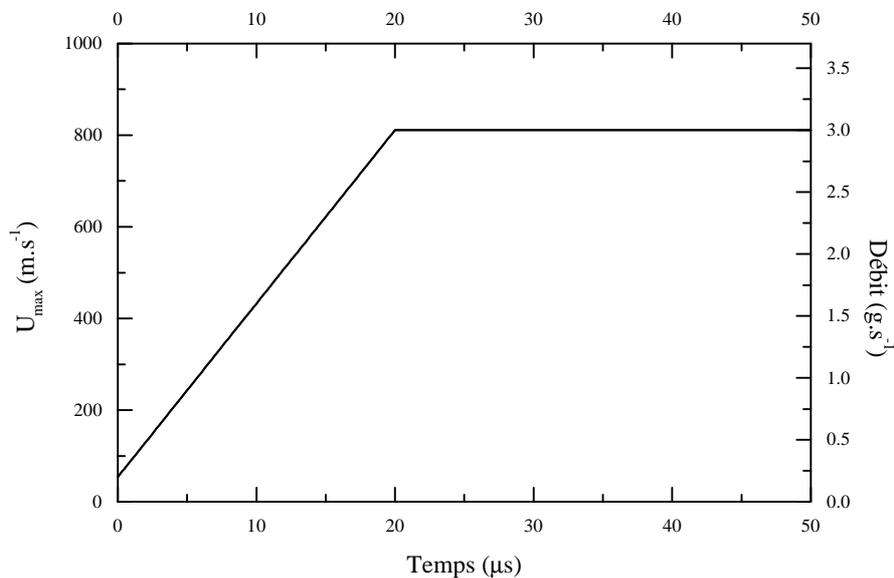


Figure 93 : Evolution de la vitesse maximale d'entrée et du débit d'entrée.

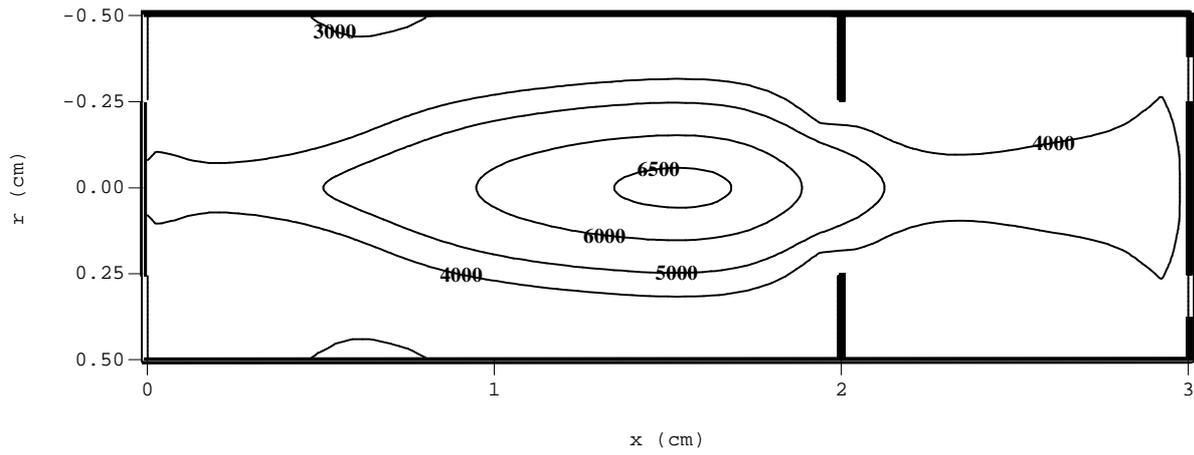


Figure 94 : Champ de température ($t = 20 \text{ ms}$).

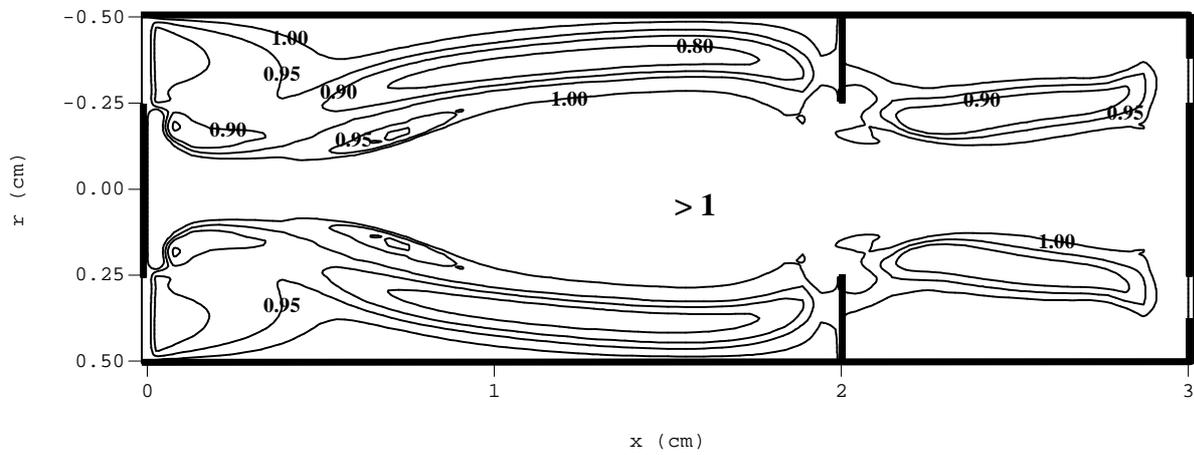


Figure 95 : Champ de densité relative (électron, $t = 20 \text{ ms}$).

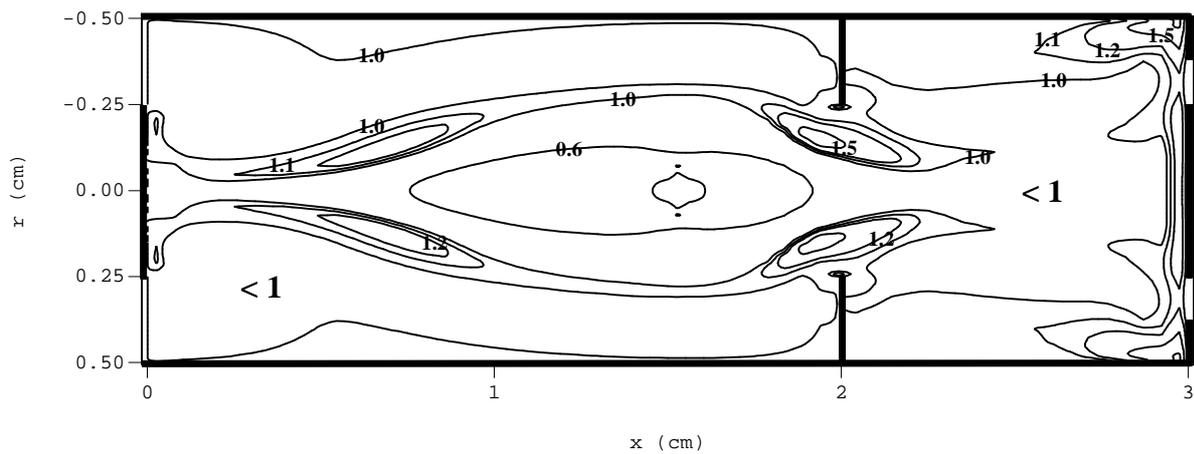


Figure 96 : Champ de densité relative (S_2^+ , $t = 20 \text{ ms}$).

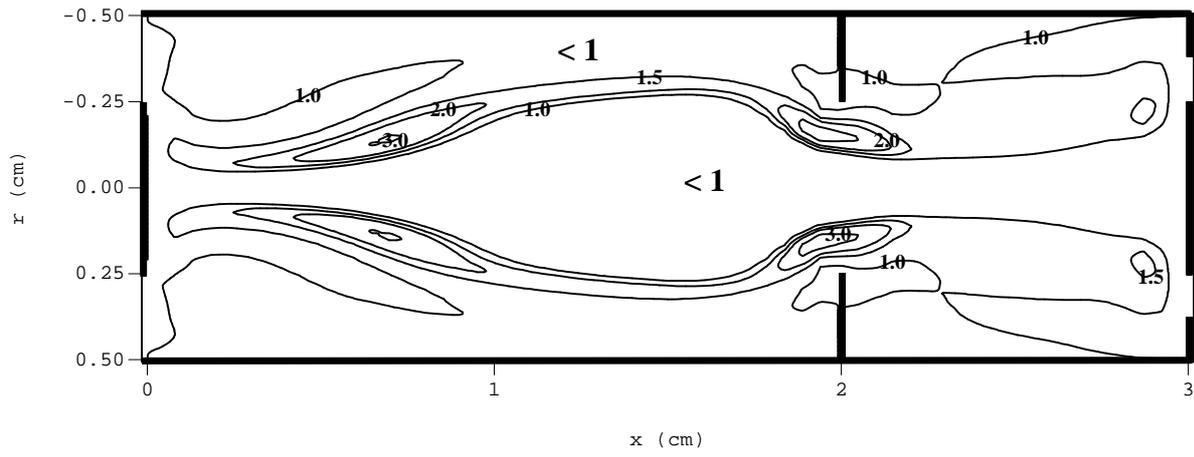


Figure 97 : Champ de densité relative (S_2 , $t = 20$ ms).

CONCLUSION

CONCLUSION

Les travaux développés dans cette thèse ont permis de mettre au point un modèle d'extinction d'un arc de disjoncteur à SF₆ pour une géométrie simplifiée. Ce modèle couple un modèle hydrodynamique à un modèle de cinétique chimique et permet de prendre en compte les écarts à l'équilibre chimique durant l'extinction de l'arc.

Dans une première partie, cette thèse a été consacrée à l'étude de la cinétique chimique du SF₆. La résolution des équations de conservation des espèces en régime stationnaire a permis de calculer la composition d'équilibre par la mise au point d'un modèle collisionnel radiatif. Nous avons ainsi pu vérifier nos résultats avec ceux de la littérature et avec ceux issus d'un code mis au point dans le laboratoire et fondé sur les lois de l'équilibre (Saha, Guldberg-Waage) et non sur la cinétique chimique. Toujours dans cette étude cinétique, nous avons estimé la distance moyenne caractéristique que pouvait parcourir une espèce avant d'être totalement dissociée. L'étude cinétique nous a aussi permis de déterminer les espèces à prendre en compte pour le calcul hydro-cinétique à l'extinction. En effet, certaines espèces possèdent des temps de relaxation très faibles et peuvent être considérées à l'équilibre durant l'extinction afin de ne pas alourdir le temps de résolution.

Dans une autre partie nous avons présenté un couplage entre un modèle hydrodynamique simplifié d'un arc de SF₆ en extinction avec un modèle cinétique (modèle hydro-cinétique) réalisé pour une géométrie à une dimension. Le couplage, entre les modules hydrodynamique et cinétique, est réalisé à travers la densité de masse, la pression et la vitesse. Les résultats obtenus à partir de cette configuration ont montré que les espèces polyatomiques de type SF_X (X=2,6), qui se dissocient très rapidement dès que la température est supérieure à 3000 K, ne sauraient constituer un moyen de faire disparaître les électrons.

La dernière partie de cette thèse a fait l'objet de la réalisation du modèle hydro-cinétique à deux dimensions. A l'état stationnaire, plusieurs cas ont été étudiés. Les conditions aux limites étant délicates à fixer, nous nous sommes affranchis de ce problème par la résolution d'un modèle à une dimension. Il est difficile de quantifier l'influence de la convection sur les sous populations électroniques observées. En effet pour un même instant et deux débits initiaux, les valeurs du champ de température sont très différentes. Nous avons simulé l'extinction de l'arc pour une intensité initiale de 50 A et pour une pression fixée à 0.1. Les principaux résultats du modèle hydrodynamique confirment les valeurs expérimentales de la littérature avec une vitesse de

refroidissement de l'ordre de -10^8 K.s^{-1} . Les résultats sur la cinétique montrent que la convection agit sur les molécules de S_2 qui se retrouvent, au bord de la décharge et pour des températures comprises entre 4000 K et 6000 K, en surpopulation par rapport à l'équilibre. Par processus d'échange de charge entre les particules S_2 et S^+ la surpopulation de S_2 va conduire à une surpopulation des ions S_2^+ . Ces ions vont principalement se recombinaison avec les électrons provoquant une baisse de la population électronique, et une modification de la résistivité du milieu.

Bien que la géométrie utilisée soit très simplifiée par rapport à celle d'un disjoncteur, les premiers résultats obtenus dans ce travail montrent l'influence de la convection sur l'état d'équilibre du plasma. Il semble donc que la prise en compte de la cinétique chimique influe sur le calcul de la conductance de l'arc en extinction et donc sur le pouvoir de coupure de l'appareil. Toutefois, l'effet mis en évidence n'est pas très fort et les conclusions que l'on peut tirer ne sont pas encore définitives ; on peut penser cependant que les conditions de violent soufflage turbulent et la présence de gaz froid dans un disjoncteur réel accentuent les phénomènes hors d'équilibre.

Dans les perspectives sur ce sujet deux voies sont envisagées : la première consisterait à améliorer le code mis en place en prenant en compte le caractère turbulent de l'écoulement lors de l'extinction, au travers d'un modèle k- ϵ standard, et en augmentant la gamme d'utilisation des banques de données cinétiques pour enclencher le module de cinétique chimique à haute température. Pour l'instant, la température maximale est de 12000 K ce qui limite l'intensité utilisée. Une autre voie que nous explorons est l'étude du déséquilibre thermique dans un arc de disjoncteur. En effet, immédiatement après le passage au zéro du courant alternatif, une tension transitoire de rétablissement s'applique aux bornes du disjoncteur et a tendance à chauffer les électrons. Si le transfert d'énergie entre les électrons et les particules lourdes n'est pas assez efficace, on aura rapidement un milieu dans lequel la température électronique est supérieure à la température du gaz. Ce travail fait l'objet d'une thèse en cours de préparation.

ANNEXE

ANNEXE I

A1-1. Espèces considérées

Type	Espèces									
ionique	e ⁻	S ⁻	F ⁻	SF ⁻	S ⁺	F ⁺	SF ⁺	S ₂ ⁺	F ₂ ⁺	
atomique	S	F								
diatomique	SF	F ₂	S ₂							
polyatomique	SF ₂	SF ₃	SF ₄	SF ₅	SF ₆					

Table 1 : Espèces considérées.

A1-2. Réactions chimiques

N°	Type	Réaction chimique	Réf.
1	Recombinaison électron ions atomiques	F ⁺ + e + e ↔ F + e F ⁺ + e → F + hv	Gl-6
2	Recombinaison électron ions atomiques	S ⁺ + e + e ↔ S + e S ⁺ + e → S + hv	Gl-6

Table 2 : Taux de réactions de recombinaison électrons ions atomiques.

N°	Type	Réaction chimique	Réf.	A	B	C
3	Asso. atomes ions négatifs	S + F ⁻ + F ↔ SF ⁻ + F (←)	Br-1	3.92E-12	0.5	24950
4	Asso. atomes ions négatifs	F + S ⁻ + F ↔ SF ⁻ + F (←)	Br-1	3.92E-12	0.5	40849
5	Asso. atomes ions positifs	S + S ⁺ + F ↔ S ₂ ⁺ + F (←)	Br-1	3.81E-12	0.5	74735
6	Asso. atomes ions positifs	F + S ⁺ + F ↔ SF ⁺ + F (←)	Br-1	3.92E-12	0.5	43750
7	Asso. atomes ions positifs	F ⁺ + S + F ↔ SF ⁺ + F (←)		3.91E-12	0.5	44098.62
8	Asso. atomes ions positifs	F + F ⁺ + F ↔ F ₂ ⁺ + F (←)		4.09E-12	0.5	37019
9	Asso. atomes molécules	F + F + F ↔ F ₂ + F	Br-1	5.40E-35	0	0
10	Asso. atomes molécules	F + S + F ↔ SF + F	Br-1	2.80E-34	0	0
11	Asso. atomes molécules	S + S + F ↔ S ₂ + F	Br-1	4.50E-34	0	0
12	Asso. atomes molécules	SF ₄ + F ₂ ↔ SF ₆		2.63E-11	0	7340
13	Asso. atomes molécules	F ₂ ↔ F + F	Bo-1	3.52E-11	0	16970
14	Asso. atomes molécules	SF ₅ + F ₂ ↔ SF ₆ + F	Bo-1	2.63E-11	0	2438
15	Asso. atomes molécules	S ₂ ↔ S + S	Bo-1	7.95E-11	0	38749
16	Asso. atomes molécules	SF ₄ + F ↔ SF ₃ + F ₂	Bo-1	6.61E-14	0	1005

17	Asso. atomes molécules	$SF_4 + F_2 \leftrightarrow SF_5 + F$	Bo-1	2.63E-11	0	7340
18	Asso. atomes molécules	$SF_4 + F \leftrightarrow SF_5$	Bo-1	6.61E-14	0	1307
19	Asso. atomes molécules	$SF_5 + F \leftrightarrow SF_6$	Bo-1	1.66E-11	0	854
20	Asso. atomes molécules	$SF_5 + SF_5 \leftrightarrow SF_4 + SF_6$	Bo-1	1.66E-11	0	7340
21	Asso. ion molécule	$S^+ + SF \leftrightarrow S_2^+ + F$	Bo-1	9.90E-10	0	0
22	Asso. ion molécule	$S^+ + F_2 \leftrightarrow SF^+ + F$	Bo-1	5.89E-10	0	0
23	Attachement dissociatif	$SF^+ + e \leftrightarrow S + F$	Br-1	3.46E-06	-0.5	0
24	Attachement dissociatif	$S_2^+ + e \leftrightarrow S + S$	Br-1	3.46E-06	-0.5	0
25	Attachement dissociatif	$F_2^+ + e \leftrightarrow F + F$	Br-1	3.46E-06	-0.5	0
26	Dissociation	$F_2 + e \leftrightarrow F + F + e$		3.00E-10	0	0
27	Echange d'électron	$S^- + SF \leftrightarrow S + SF^-$	Ch-2	3.28E-11	0.5	0
28	Echange d'ion	$S^+ + S_2 \leftrightarrow S_2^+ + S$	Br-1	1.38E-09	0	0
29	Echange d'ion	$S^+ + SF \leftrightarrow SF^+ + S$	Br-1	1.00E-10	0	0
30	Echange d'ion	$F^+ + S_2 \leftrightarrow S_2^+ + F$	Br-1	1.66E-09	0	0
31	Echange d'ion	$F^+ + SF \leftrightarrow SF^+ + F$	Br-1	1.30E-09	0	0
32	Echange d'ion	$F^+ + F_2 \leftrightarrow F_2^+ + F$	Br-1	6.90E-10	0	0
33	Recombinaison e ⁻ atome	$F + e + F \leftrightarrow F^- + F \quad (\leftarrow)$	Br-1	1.00E-11	0	40000
34	Recombinaison e ⁻ atome	$S + e + F \leftrightarrow S^- + F \quad (\leftarrow)$	Br-1	4.23E-12	0.5	24105
35	Recombinaison ion-ion	$S^+ + S^- + F \leftrightarrow S_2 + F$	Dr-2	6.32E-20	-2.5	0
36	Recombinaison ion-ion	$F^- + S^+ + F \leftrightarrow SF + F$	Dr-2	7.32E-20	-2.5	0
37	Recombinaison ion-ion	$S_2^+ + F^- + F \leftrightarrow S_2 + F + F$	Dr-2	6.61E-20	-2.5	0
38	Recombinaison ion-ion	$S_2^+ + F^- + F \leftrightarrow SF + F + S$	Dr-2	6.61E-20	-2.5	0
39	Recombinaison ion-ion	$S_2^+ + F^- + F \leftrightarrow S_2 + F_2$	Dr-2	6.61E-20	-2.5	0
40	Recombinaison ion-ion	$S_2^+ + F^- + F \leftrightarrow SF + SF$	Dr-2	6.61E-20	-2.5	0
41	Recombinaison ion-ion	$F_2^+ + F^- \leftrightarrow F + F + F$	Wi-1	1.50E-07	0	0
42	Recombinaison ion-ion	$F^+ + F^- + F \leftrightarrow F_2 + F$	Wi-1	8.18E-20	-2.5	0
43	Recombinaison ion-ion	$F^+ + S^- + F \leftrightarrow SF + F$	Dr-2	7.30E-20	-2.5	0

Table 3 : Taux de réactions déterminés par la loi d'Arrhenius : $A T^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right)$

N°	Type	Réaction chimique	Réf.	A	B	C	D	E
44	Association	$SF_6 + SF_2 \leftrightarrow SF_4 + SF_4$	Bo-1	5.22E-20	16.669	1.25E-04	-8.10E-09	15080
45	Association	$SF + SF \leftrightarrow F_2 + S_2$	Bo-1	5.22E-18	16.549	1.03E-04	-5.72E-09	12470
46	Association	$F + SF \leftrightarrow F_2 + S$	Bo-1	5.22E-18	16.347	1.50E-04	-1.07E-08	22270
47	Association	$F + SF \leftrightarrow SF_2$	Bo-1	5.22E-18	16.347	1.50E-04	-1.07E-08	0
48	Association	$F_2 + S \leftrightarrow SF_2$	Bo-1	5.22E-19	16.572	9.99E-05	-5.34E-09	5027
49	Association	$SF + F_2 \leftrightarrow SF_2 + F$	Bo-1	5.22E-19	16.345	1.47E-04	-1.05E-08	5027
50	Association	$SF + SF \leftrightarrow S + SF_2$	Bo-1	5.22E-18	16.549	1.03E-04	-5.72E-09	0
51	Association	$S_2 + F_2 \leftrightarrow SF_2 + S$	Bo-1	5.22E-20	16.654	9.99E-05	-5.34E-09	15080

52	Association	$SF_2 + F \leftrightarrow SF_3$	Bo-1	5.22E-19	16.473	1.50E-04	-1.07E-08	5027
53	Association	$SF_2 + F_2 \leftrightarrow SF_3 + F$	Bo-1	5.22E-20	16.432	1.47E-04	-1.05E-08	15080
54	Association	$SF + F_2 \leftrightarrow SF_3$	Bo-1	5.22E-19	16.345	1.47E-04	-1.05E-08	5027
55	Association	$SF_2 + SF_2 \leftrightarrow SF_3 + SF$	Bo-1	5.22E-20	16.669	1.03E-04	-5.71E-09	27420
56	Association	$SF_3 + F \leftrightarrow SF_4$	Bo-1	5.22E-18	16.567	1.44E-04	-1.01E-08	0
57	Association	$SF_2 + F_2 \leftrightarrow SF_4$	Bo-1	5.22E-20	16.432	1.47E-04	-1.05E-08	15080
58	Association	$SF_3 + SF_3 \leftrightarrow SF_2 + SF_4$	Bo-1	5.22E-18	16.489	1.44E-04	-1.01E-08	0
59	Association	$SF_2 + SF_2 \leftrightarrow SF_4 + S$	Bo-1	5.22E-20	16.669	1.03E-04	-5.71E-09	27960
60	Association	$SF_3 + F_2 \leftrightarrow SF_5$	Bo-1	5.22E-19	16.488	1.44E-04	-1.01E-08	5027

Table 4 : Taux de réactions déterminés par la méthode de Lennard-Jones :

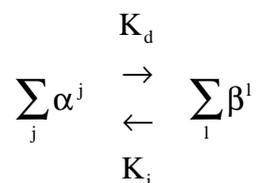
$$A \exp(B + CT + DT^2) \exp\left(-\frac{E}{T}\right)$$

N°	Type	Réaction chimique	Ref.	A	B	C	D	E
61	Attachement	$F + e + e \leftrightarrow F^- + e$	Pe-1	5.32E-31	-1.15E-34	1.27E-38	-6.70E-43	1.35E-47
62	Attachement	$F + e \rightarrow F^- + hv$	Va-1	2.53E-15	-3.46E-19	3.82E-23	-1.86E-27	3.37E-32
63	Attachement	$S + e \rightarrow S^- + hv$	Ro-1	8.93E-15	-1.52E-18	1.51E-22	-5.30E-27	0
64	Attachement	$F_2 + e \leftrightarrow F^- + F$	Co-2	1.02E-08	-4.98E-13	-3.25E-16	4.67E-20	0
65	Attachement	$SF + e \leftrightarrow F^- + S$	Bo-1					
66	Recombinaison	$F + F \rightarrow F_2 + hv$		-2.87E-23	9.69E-26	-2.38E-31	9.86E-33	-5.64E-37

Table 5 : Autres taux de réactions : $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$

Unité de la constante A :

Si on considère la réaction suivante caractérisée par un nombre 'j' de réactifs α menant à un nombre 'l' de produits β :



L'unité de la constante A utilisée dans les tables 1 à 4 est :

$$[A] = [K_d] = \text{cm}^{3(j-1)} \cdot \text{s}^{-1}$$

REFERENCES

REFERENCES

- [Ad-1] L. Adamec
'Mathematical modelling of certain effects and chemical reactions in an electric arc in SF₆ upon the decay of the arc'
Acta Phys Slov, **2**, 39, (1990).
- [Bo-1] E. Borge
'Modélisation de la cinétique chimique d'un plasma d'arc d'hexafluorure de soufre (SF₆) en présence d'impuretés'
Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, n° 2051, (1995).
- [Br-1] K. P. Brand et J. Kopainsky,
'Particle densities in a decaying SF₆ plasma'
Appl. Phys. **16**, 245,(1978).
- [Ch-1] B. Chervy, A. Gleizes et M. Razafinimanana
'Thermodynamic properties and transport coefficients in SF₆-Cu mixtures at temperatures of 300-3000 K and pressures of 0.1-1 MPa'
J. Phys. D.: Appl. Phys., **27**, 1193, (1994).
- [Ch-2] L. G. Christophorou
'Atomic and molecular radiative physics'
Wiley-Interscience, Londres (1971).
- [Cl-1] G. J. Cliteur, K. Suzuki, H Ikeda et T. Sakuta,
'Numerical simulation of recovery phenomena in SF₆ arc plasmas'
Gas Discharges, Greifswald **2**, (1997).
- [Co-1] M. D. Cowley
'Integral methods of analysing electric arcs'
J. Phys. D : Appl. Phys., **7**, 2218, (1974).
- [Co-2] D. L. Mc. Corkle, L. G. Christophorou, A. A. Christodoulidus et L. Pichiarella
'Electron attachment to F₂'
J. Chem. Phys., **85**, 1966, (1986).
- [Dr-1] H. W. Drawin
'Plasma properties and atomic processes at medium and high pressures'
J. Physique Coll.,**40**, C7-149, (1979).
- [Dr-2] H.W. Drawin et F. Emard
'Optical escape factors for bound-bound and free-bound radiation from plasmas'
Beitr. Plasma Physik, **15**, 273, (1975).
- [Fa-1] M. T. C. Fang

- 'Mathematical modelling of basic processes in axially-blown switching arcs'*
Bulletin of the Tech. Uni. Brno, Czechoslovakia, Sbornik, vut, **2-4**, 65, (1992).
- [Fa-2] F. Fayolle Communal
'Analyse et modélisation des degrés d'oxyde de silicium par procédé LPCVD'
Thèse de l'INPT. Toulouse, (1993).
- [G1-1] A. Gleizes, A. Mahieddin Rahal, S. Papadopoulos et S. Vacquié
'Study of a circuit-breaker arc with self-generated flow : Part II- The flow phase'
IEEE Trans. on Plasma Science, **PS-16**, 6, (1988).
- [G1-2] A. Gleizes, M. Mitiche et Pham Van Doan
'Study of a circuit-breaker arc with self-generated flow : Part III- The post-arc phase'
IEEE Trans. on Plasma Science, **19**, 1, (1991).
- [G1-3] A. Gleizes, I. Sakalis, M. Razafinimanana et S. Vacquié
'Decay of wall stabilized arcs in SF₆-N₂ mixtures'
J. Phys. D : Appl. Phys., **61**, 510, (1987).
- [G1-4] A. Gleizes, T. Robert, J.-J. Gonzalez et A. Pons
'Modelling of the SF₆ circuit-breaker arc and of its interaction with the circuit'
J. Phys. D : Appl. Phys., **26**, 1439-1444, (1993).
- [G1-5] A. Gleizes,
'Calculation of recombination and ionization coefficients in Argon'
Beitr. Plasma Physik, **22**, 241, (1982).
- [G1-6] A. Gleizes
'Etude des processus collisionnels et radiatifs d'un plasma d'argon à la pression atmosphérique en régime stationnaire et durant l'extinction'
Thèse de doctorat d'état, Université Paul Sabatier, Toulouse, n° 960, (1980).
- [G1-7] A. Gleizes, A. A. M. Habib et S. Vacquié
'Calculation of electron-ion recombination in an SF₆ arc plasma'
J. Phys. D : Appl. Phys., **22**, 1464, (1989).
- [G1-8] A. Gleizes, J. J. Gonzalez, B. Liani et G. Raynal
'Calculation of net emission coefficient of thermal plasmas in mixtures of gas with metallic vapour'
J. Phys. D, **26**, 1921, (1993).
- [G1-9] A. Gleizes, M. Bouaziz, C. Pradayrol, G. Raynal et M Razafinimanana
'Absorption of SF₆ arc plasma radiation by cold SF₆ gas'
11th Conf. Gas Disch. Applic. GD 95, Tokyo, **1**, 38, (1995).
- [G1-10] A. Gleizes, M. Razafinimanana et S. Vacquié
'Temperature variations in a SF₆-N₂ mixture plasma'
Revue Phys. Appl., **22**, 1411, (1987).

- [Go-1] J. J. Gonzalez, A. Gleizes et P. Krenek
'*SF₆ circuit breaker arc modelling: influence of the electric field on the electrical conductivity*'
J. Phys. D : Appl. Phys., **27**, 985-993, (1994).
- [Go-2] J. J. Gonzalez, J. B. Belhaouari et A. Gleizes
'*Influence of demixing effect on the temperature in wall-stabilized SF₆ arc*'
J. Phys. D : Appl. Phys., **29**, 1520-1524, (1996).
- [Ha-1] A. A. Habib
'*Collision radiative model in a quasi stationary homogeneous SF₆ arc plasma for pressure P between 1 and 8 atmosphere*'
Ph. D. Thesis, University of Assiut Egypte, (1989).
- [He-1] W. Hermann, U. Kogelschatz, L. Niemeyer, K. Ragaller et E. Schade
'*Investigation of a cylindrical, axially blown, high-pressure arc*'
J. Phys. D : Appl. Phys., **7**, 607, (1974).
- [He-2] W. Hermann et K. Ragaller
'*Theoretical description of the current interruption in HV gas blast breakers*'
IEEE Trans. on Power Appa. and Syst., **PAS-96**, 5, (1977).
- [He-3] G. Herzberg
'*Spectra of diatomic molecules*'
2^{ème} edition, Van Nostrand-Reinhold, New-York (1950).
- [He-4] G. Herzberg
'*Molecular Spectra and Molecular Structure*'
II- Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules (1945).
- [He-5] W. Hertz
'*Messung und deutung des leitwertabklingens zylindrischer bogen*'
Z. Phys., **245**, 105, (1971).
- [Hi-1] J. O. Hirschfelder, F. Curtiss et R. Byron Bird
'*Molecular theory of gases and liquids*'
John Wiley and Sons, New-York, (1964).
- [Ja-1] JANAF, J. Phys. Chem. Ref. Data, **14**, suppl.1, (1985).
- [Lo-1] J. J. Lowke
'*Progress in arc theory*'
Bulletin of the Tech. Uni. Brno, Czechoslovakia, Sbornik, vut, **2-4**, (1992).
- [Lo-2] J. J. Lowke, R. E. Voshall et H. C. Ludwig
'*Decay of electrical conductance and temperature of arc plasmas*'
J. Phys. D : Appl. Phys., **44**, 3513, (1973).

- [Lo-3] J.J. Lowke et D. Mitchell
'Net emission coefficients of radiation in sulphur hexafluoride plasmas'
XVI ICPIG 'Int. Conf. Phen. Ionised Gases', Dusseldorf, **4**, 502, (1983).
- [Mb-1] F. Mbolidi
'Evolution des densités des particules chargées dans un plasma d'arc d'hexafluorure de soufre (SF₆) en extinction'
Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, n° 906, (1991).
- [Mu-1] A.B. Murphy
'Modelling and diagnostics of plasma chemical processes in mixed-gas arcs'
12th Int. Symp. Plasma Chem. ISPC 12, Minneapolis, **4**, 1799, (1995).
- [No-1] J. P. Nougier
'Méthodes de calcul numérique'
2^{ème} édition Masson, (1985).
- [Pa-1] S. V. Patankar
'Numerical Heat Transfer and Fluid Flow'
Washington D.C. Hemisphere Publishing Corporation (1980).
- [Pe-1] B. Peart, R. Forrest et K.T. Dolter
'Measurements of detachment from F- by electron impact and tests of classical scaling for electron impact detachment cross sections'
J. Phys. B : Atom. Molec. Phys., **12**, L115, (1979).
- [Ra-1] M. Razafinimanana, S. Coulombe, A. Gleizes et S. Vacquié
'Study of demixing effect in a SF₆ arc plasma at atmospheric pressure'
Int. Conf. Elec. Contact Arc Apparatus and their Applications,
Xi-An China, **1**, 57, (1993).
- [Ro-1] E. J. Robinson et G. Geltman
'Single-and double-quantum photodetachment of negative ions'
Phys. Rev., **153**, 1, (1967).
- [Ro-2] J. Rouauld
'Etude expérimentale d'un plasma d'arc dans les mélanges hexafluorure de soufre-azote (SF₆-N₂)'
Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, n° 3298, (1986).
- [Sa-1] I. V. Sakalis
'Contribution à l'étude du pouvoir de coupure de l'hexafluorure de soufre et des mélanges hexafluorure de soufre-azote'
Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, (1986).
- [Sc-1] E. Schulz-Gulde
'Temperature determination for arcs in sulphur hexafluoride accounting for demixing'
J. Phys. D : Appl. Phys., **13**, 793, (1980).

- [Sc-2] E. Schulz-Gulde et T. Worzyk
'Temperature distributions in wall-stabilized sulphur hexafluoride arcs'
XVI Int. Conf. Phen. Ionised Gases, Dusseldorf, **4**, 500, (1983).
- [Tr-1] J. Troe
'Theory of thermal unimolecular reactions at low pressures. II strong collision rate constants. Applications'
J. Chem. Phys., **66**, 4758, (1977).
- [Tu-1] D. T. Tuma et J. J. Lowke
'Prediction of properties of arcs stabilized by forced convection'
J. Appl. Phys., **46**, 3361, (1975).
- [Tu-2] D. T. Tuma
'A comparison of the behaviour of SF₆ and N₂ blast arcs around current zero'
IEEE Trans. on Power Appa. and Syst., **PAS-99**, 6, (1980).
- [Va-1] S. Vacquié, A. Gleizes et M. Sabsabi
'Measurement of the photodetachment cross section of the negative ion of fluorine'
Phys. Rev., **A35**, 1615, (1987).
- [Va-2] S. Vacquié, A. Gleizes et H. Kafrouni
'Measurement of electron density in a SF₆ arc plasma'
J. Phys. D : Appl. Phys., **18**, 2193, (1985).
- [Va-3] S. Vacquié, M.Y. Amara, A. Gleizes et H. Kafrouni
'Experimental study of a SF₆ arc plasma at atmospheric pressure'
J. Phys. D : Appl. Phys, **15**, 885, (1982).
- [Ve-1] P.-J. Vergne
'Simulation numérique d'un arc de disjoncteur à hexafluorure de soufre en présence d'un écoulement turbulent en régime stationnaire'
Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse, n° 2005, (1995).
- [Wi-1] J. W. Wilson et A. Shapiro
'Nuclear-induced excimer fluorescence'
J. Appl. Phys, **51**, 2387, (1980)

**LISTE DES FIGURES
ET DES TABLEAUX**

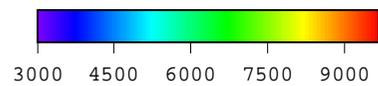
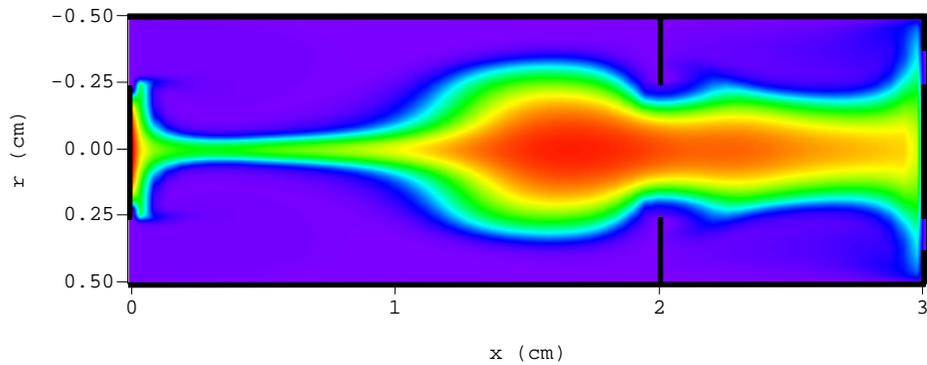
LISTE DES FIGURES ET DES TABLEAUX

<i>Figure 1 : Composition d'équilibre du SF₆ (2100 K < T < 12000 K, p = 0.1 MPa).</i>	47
<i>Figure 2 : Composition d'équilibre du SF₆ (300 K < T < 2100 K, p = 0.1 MPa).</i>	47
<i>Figure 3 : Composition d'équilibre du SF₆ (2100 K < T < 12000 K, p = 0.4 MPa).</i>	48
<i>Figure 4 : Rapport ($n_{0.4 \text{ MPa}} / n_{0.1 \text{ MPa}}$) (2100 K < T < 12000 K).</i>	48
<i>Tableau 1 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces polyatomiques.</i>	51
<i>Tableau 2 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces monoatomiques.</i>	52
<i>Tableau 3 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces diatomiques.</i>	53
<i>Tableau 4 : Réactions dominant le processus de disparition des espèces ionisées.</i>	54
<i>Figure 5 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF₅).</i>	55
<i>Figure 6 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF₆).</i>	56
<i>Figure 7 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF).</i>	56
<i>Figure 8 : Fréquences de disparition en fonction de la température (F₂).</i>	57
<i>Figure 9 : Fréquences de disparition en fonction de la température (S₂).</i>	57
<i>Figure 10 : Fréquences de disparition en fonction de la température (électron).</i>	58
<i>Figure 11 : Fréquences de disparition en fonction de la température (SF⁺).</i>	58
<i>Figure 12 : Fréquences de disparition en fonction de la température (S₂⁺).</i>	59
<i>Figure 13 : Fréquences de disparition en fonction de la température (F₂⁺).</i>	59
<i>Figure 14 : Portée des espèces pour une vitesse égale à 10 m.s⁻¹.</i>	61
<i>Tableau 5 : Variables de l'équation de conservation généralisée.</i>	70
<i>Figure 15 : Volume de contrôle autour du point P.</i>	71
<i>Figure 16 : Eléments de volume pour les composantes axiale et radiale de la quantité de mouvement.</i>	77
<i>Figure 17 : Volume de contrôle autour du point w.</i>	79
<i>Figure 18 : Evolution croissante.</i>	82
<i>Figure 19 : Evolution décroissante.</i>	83
<i>Figure 20 : Taux de destructions des espèces ionisées (p = 0.1 MPa).</i>	85
<i>Figure 21 : Taux de destructions des espèces atomiques et moléculaires (p = 0.1 MPa).</i>	85
<i>Figure 22 : Taux de destructions des espèces ionisées (p = 0.4 MPa).</i>	86
<i>Figure 23 : Taux de destructions des espèces atomiques et moléculaires (p = 0.4 MPa).</i>	86
<i>Figure 24 : Densité de masse du SF₆ pur.</i>	88

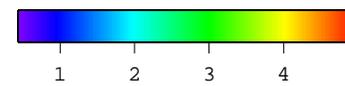
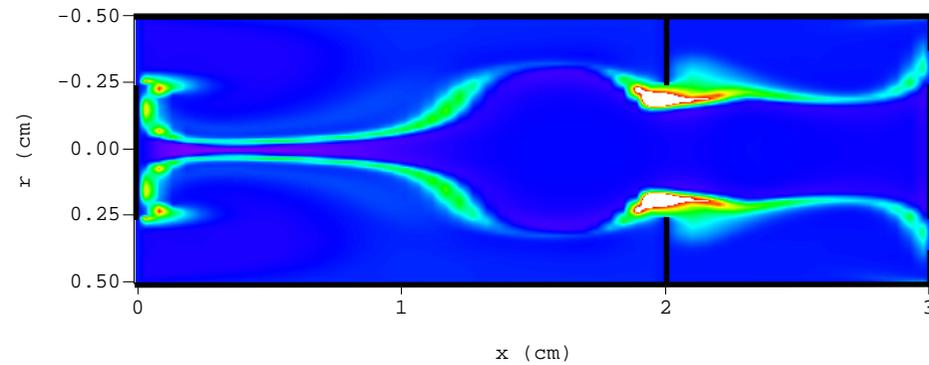
Figure 25 : Conductivité thermique du SF ₆ pur. _____	89
Figure 26 : Conductivité électrique du SF ₆ pur. _____	89
Figure 27 : Coefficient d'émission nette du SF ₆ pur (Rp = 2 mm). _____	90
Tableau 6 : Influence du pas D_r . _____	95
Figure 28 : Influence du pas D_r (I = 100 A, p = 0.1 MPa). _____	96
Figure 29 : Influence du pas D_r (I = 50 A, p = 0.1 MPa). _____	96
Figure 30 : Variations de la température axiale en fonction de l'intensité (p = 0.1 MPa). _____	97
Figure 31 : Variations du champ électrique en fonction de l'intensité (p = 0.1 MPa). _____	98
Tableau 7 : Influence de la pression. _____	99
Figure 32 : Influence de la pression (I = 100 A). _____	100
Figure 33 : Termes d'énergies (p = 0.1 MPa). _____	100
Figure 34 : Termes d'énergies (p = 0.4 MPa). _____	101
Figure 35 : Evolution du profil de température. _____	104
Figure 36 : Evolution du profil de vitesse radiale. _____	104
Figure 37 : Evolution de la température axiale. _____	105
Figure 38 : Evolution de la conductance. _____	105
Tableau 8 : Caractéristique du profil de température initial. _____	107
Figure 39 : Profil de température initial (I = 50 A, p = 0.1 MPa). _____	107
Tableau 9 : Conditions aux limites. _____	109
Figure 40 : Evolution du profil de température (modèle de référence). _____	110
Figure 41 : Evolution du profil de vitesse radiale (modèle de référence). _____	110
Figure 42 : Evolution du profil de température. _____	112
Figure 43 : Evolution du profil de vitesse radiale. _____	112
Figure 44 : Evolution de la vitesse radiale proche de l'axe (r = 0.4 mm). _____	113
Figure 45 : Evolutions de la densité des espèces ionisées (r = 0). _____	114
Figure 46 : Evolutions du rapport n / n _{ETL} des espèces ionisées (r = 0). _____	115
Figure 47 : Evolutions de la densité des espèces neutre (r = 0). _____	115
Figure 48 : Evolutions du rapport n / n _{ETL} des espèces neutres (r = 0). _____	116
Figure 49 : Profils radiaux des densités (t = 100 m). _____	116
Figure 50 : Profils radiaux des densités normalisées à l'équilibre (t = 100 m). _____	117
Figure 51 : Evolutions du profil radial de la densité électronique normalisées à l'équilibre. _____	117
Figure 52 : Schéma de la géométrie simplifiée. _____	122
Tableau 10 : Conditions aux limites. _____	123

<i>Figure 53 : Champ de température ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	127
<i>Figure 54 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	127
<i>Figure 55 : Fonction courant de masse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.2 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	127
<i>Figure 56 : Champ de température ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	128
<i>Figure 57 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	128
<i>Figure 58 : Fonction courant de masse ($p = 0.1 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.02 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	128
<i>Figure 59 : Profils de température ($x = 2 \text{ cm}$).</i>	129
<i>Figure 60 : Profils de la vitesse axiale ($x = 2 \text{ cm}$).</i>	129
<i>Figure 61 : Champ de température ($p = 0.4 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.9 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	131
<i>Figure 62 : Champ du vecteur vitesse ($p = 0.4 \text{ MPa}$, $D_0 = 0.9 \text{ g.s}^{-1}$).</i>	131
<i>Figure 63 : Profils de température ($x = 2 \text{ cm}$).</i>	132
<i>Figure 64 : Profils de vitesse axiale ($x = 2 \text{ cm}$).</i>	132
<i>Figure 65 : Evolution de la vitesse maximale d'entrée et du débit d'entrée.</i>	138
<i>Figure 66 : Champ de température ($t = 5 \text{ ms}$).</i>	139
<i>Figure 67 : Champ du vecteur vitesse ($t = 5 \text{ ms}$).</i>	139
<i>Figure 68 : Champ de pression ($t = 5 \text{ ms}$).</i>	139
<i>Figure 69 : Champ de température ($t = 10 \text{ ms}$).</i>	140
<i>Figure 70 : Champ du vecteur vitesse ($t = 10 \text{ ms}$).</i>	140
<i>Figure 71 : Champ de pression ($t = 10 \text{ ms}$).</i>	140
<i>Figure 72 : Champ de température ($t = 20 \text{ ms}$).</i>	141
<i>Figure 73 : Champ du vecteur vitesse ($t = 20 \text{ ms}$).</i>	141
<i>Figure 74 : Champ de pression ($t = 20 \text{ ms}$).</i>	141
<i>Figure 75 : Champ de température ($t = 30 \text{ ms}$).</i>	142
<i>Figure 76 : Champ du vecteur vitesse ($t = 30 \text{ ms}$).</i>	142
<i>Figure 77 : Champ de pression ($t = 30 \text{ ms}$).</i>	142
<i>Figure 78 : Champ de température ($t = 40 \text{ ms}$).</i>	143
<i>Figure 79 : Champ du vecteur vitesse ($t = 40 \text{ ms}$).</i>	143
<i>Figure 80 : Champ de pression ($t = 40 \text{ ms}$).</i>	143
<i>Figure 81 : Evolution de la conductance linéique pour différentes valeurs de x.</i>	145
<i>Figure 82 : Champ de densité relative (électron, $t = 20 \text{ ms}$).</i>	149
<i>Figure 83 : Champ de densité relative (S_2^+, $t = 20 \text{ ms}$).</i>	150
<i>Figure 84 : Champ de densité relative (S_2, $t = 20 \text{ ms}$).</i>	150

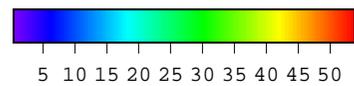
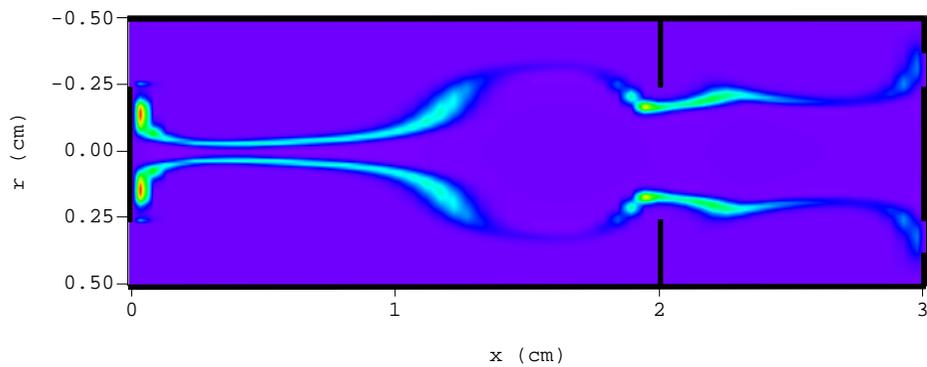
<i>Figure 85 : Champ de densité relative (SF, $t = 20 \text{ m}$).</i>	150
<i>Figure 86 : Champ de densité relative (F_2, $t = 20 \text{ m}$).</i>	151
<i>Figure 87 : Champ de densité relative (F, $t = 20 \text{ m}$).</i>	151
<i>Figure 88 : Champ de densité relative (SF_2, $t = 20 \text{ m}$).</i>	151
<i>Figure 89 : Champ de densité relative (S, $t = 20 \text{ m}$).</i>	152
<i>Figure 90 : Champ de densité relative (S^+, $t = 20 \text{ m}$).</i>	152
<i>Figure 91 : Champ de densité relative (S^-, $t = 20 \text{ m}$).</i>	152
<i>Figure 92 : Champ de densité relative (F^-, $t = 20 \text{ m}$).</i>	153
<i>Figure 93 : Evolution de la vitesse maximale d'entrée et du débit d'entrée.</i>	154
<i>Figure 94 : Champ de température ($t = 20 \text{ m}$).</i>	155
<i>Figure 95 : Champ de densité relative (électron, $t = 20 \text{ m}$).</i>	155
<i>Figure 96 : Champ de densité relative (S_2^+, $t = 20 \text{ m}$).</i>	155
<i>Figure 97 : Champ de densité relative (S_2, $t = 20 \text{ m}$).</i>	156



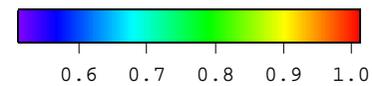
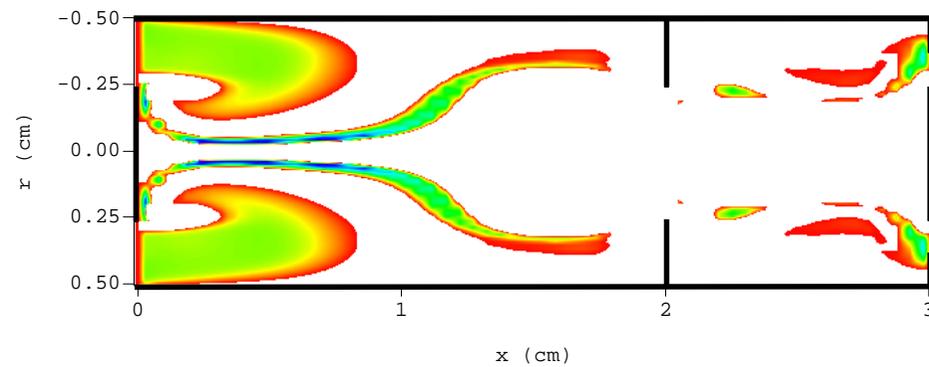
Champ de température (K).



Champ de densité relative (S_2^+).



Champ de densité relative (S_2).



Champ de densité relative (électron).

Principaux résultats du modèle hydro-cinétique en extinction ($p = 0.1$ MPa, $t = 20$ ns).